PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET
NOVI SAD

DIPLOMSKI RAD

TEMA: BOZE KONDENZACIJA U SISTEMU FRENKEL-OVIH EKSITONA I OPTIČKE OSOBINE EKSITONSKOG KONDENZATA

RADJEN IZ PREDMETA: KVANTNA MEHANIKA KOD PROFESORA ŠKRINJAR Dr. MARIJA

STUDENT
PANIĆ D. VESELIN

NAJSRDAČNIJE ZAHVALJUJEM ŠKRINJAR Dr.MARIJU,
KOJI MI JE PREDLOŽIO OVU TEMU,RUKOVODIO NJENOM
IZRADOM UZ SVESRDNU PODRŠKU I KORISNIM SAVETIMA.

SADRŽAJ

UVOD

Kao što je poznato pojava Boze kondenzacije u sistemu čestica i kvazičestica dovodi do niza interesantnih fizičkih karakteristika datih sistema, kao što su npr. superfluidnost (kod tečnog He^4), superprovodljivost (u metalima i legurama) itd. U ovom radu ispitaće se optičke osobine kristala kada u sistemu optičkih pobudjenja u kristalu (odnosno u sistemu eksitona) dolazi do pojave Boze kondenzacije.

U I glavi razmatraće se uslovi pod kojim može doći do pojave Boze kondenzacije u sistemu eksitona i biće data Grinova funkcija eksitona u uslovima Boze kondenzacije.

Koristeći vezu koja postoji izmedju retardovane Grinove funkcije eksitona i tenzora dielektrične konstante, u drugoj glavi izračunaće se tenzor dielektrične konstante molekulskog kristala u uslovima postojanja Boze kondenzata u sistemu eksitona. S obzirom da tenzor dielektrične konstante opisuje optičke osobine kristala, moći će se ispitati do kakvih novih fenomena u optičkim karakteristikama kristala dovodi pojava Boze kondenzacije.

FRENKELOVI EKSITONI

Prilikom pada svetlosnog snopa na kristal dolazi do pobudjivanja molekula u kristalu. Pojavu ovih optičkih pobudjenja u kristalima prvi su objasnili Frenkel i Pajersl za slučaj molekulskih kristala, a Vanije i Mot kod poluprovodnika. Optička pobudjenja koja su indukovana svetlošću u kristalima nazvana su eksitonima. S obzirom na ove dve vrste kristala u kojima se javljaju, razlikuju se i dve vrste eksitona i to: Frenkelovi eksitoni (nastaju optičkim pobudjivanjem molekulskih kristala), a u poluprovodnicima se javljaju eksitoni Vanije-Mota (eksitoni velikog radijusa).

Kada svetlost pada na neki poluprovodnik, ona može izazvati prelaz elektrona iz popunjene (valentne) zone u provodnu, tada u provodnoj zoni imamo elektron, dok na njegovom predjašnjem mestu u valentnoj zoni ostaje šupljina. Pošto izmedju elektrona i šupljine deluje Kulonova privlačna sila, a ukoliko je ona dovoljno velika da ove čestice drži na okupu, formira se neutralna celina i kroz poluprovodnik ne teče struja. Ovaj električno neutralan par se kroz poluprovodnik kreće kao talas (odnosno kao kvazičestica), koji se naziva eksiton Vanije-Mota. Ovako definisan eksiton Vanije-Mota postoji sve dok je Kulonova sila dovoljno velika, dok se u protivnom slučaju eksiton raspada, ponovo na šupljinu i elektron i tada kroz poluprovodnik može da teče struja.

U slućaju optičkog pobudjivanja molekulskih kristala javljaju se Frenkel-ovi eksitoni, kod kojih za razliku od eksitona Vanije-Mota pobudjeni par elektron-šupljina ostaje na istom molekulu. Zbog matričnog elementa interakcije izmedju pobudjenog i ostalih molekula, ovo pobudjenje prelazi i na ostale molekule. Ovaj talas pobudjenja (kvazičestica) i predstavlja Frenkel-ov eksiton.

Dve opisane vrste eksitona (kako se iz gornjeg vidi) se medjusobno energetski veoma malo razlikuju, jer je energija pobudjenja oba eksitona reda veličine eV. Kada se govori o razlici izmedju ove dve vrste eksitona, ona se ogleda u njihovoj veličini. Naime, ako se eksiton shvati kao kvazičestica koja bi bila sfernog oblika, radijus Vanije-Mot-ovih eksitona je velik (nekoliko μ), a radijus Frenkel-ovih eksitona je mali (nekoliko Å) jer je on na samom molekulu.

Pošto je zadatak ovog diplomskog rada proučavanje optičkih osobina molekulskih kristala, u daljem tekstu se pod pojmom eksitona podrazumevaju Frenkel-ovi eksitoni.

Kristal uopšte nastaje pod dejstvom kohezionih sila izmedju atoma ili molekula.Ne upuštajući se ovde u nabrajanje raznih vrsta kristala s obzirom na poreklo kohezionih sila,ovde ćemo nešto više reći o kohezionim silama u molekulskim kristalima. Takve kristale formiraju atomi svih plemenitih gasova,kao i organski molekuli čiji su atomi čvrsto povezani medjusobno i u odnosu na druge grupe ili atome su stabilni.Ovakve atome ili molekule na okupu drži sila koja se u opštem slućaju naziva Van der Walsova. Molekulski kristali su:antracen,naftalin,benzol i plemeniti gasovi (svi na niskim temperaturama).Molekuli ovih kristala su permanentni dipoli (naftalin,benzol,antracen),dok se za kristale plemenitih gasova može reći da su trenutni dipoli.Odavde sledi da izmedju njih deluje dipol-dipolna interakcija, koja je oblika:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}=e^2\frac{\vec{r}_{\vec{n}}\,\vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{n}-\vec{m}|^3}-3e^2\frac{[\vec{r}_{\vec{n}}(\vec{n}-\vec{m})][\vec{r}_{\vec{m}}(\vec{n}-\vec{m})]}{|\vec{n}-\vec{m}|^5} \qquad \text{(I 1.1)},$$

e- naelektrisanje elektrona

$\vec{n},\vec{m}$,- vektori položaja molekula (označava čvorove kristalne rešetke.

$\vec{r}_{\vec{n}},\vec{r}_{\vec{m}}$-vektori dipola molekula na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$

Kao što se vidi,dipol-dipolna interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja i sastoji se iz dva različita dela.Prvi deo ovog izraza naziva se analitičkim i vidi se da on zavisi samo od apsolutne vrednosti rastojanja (dakle od njegovog intenziteta)izmedju posmatranih molekula kristala.Iz izraza se može videti da drugi deo ove dipol-dipolne interakcije,nasuprot prvom delu,pored toga što zavisi od rastojanja izmedju molekula,isto tako je i funkcija uglova koje zaklapaju vektori dipola molekula ($\vec{n}$ i $\vec{m}$) sa vektorom tog rastojanja.Ovaj drugi deo dipol-dipolne interakcije se naziva neanalitičkom.Naime za svaki pravac prostiranja eksitona kroz kristal (anizatropnu sredinu) eksitoni imaju drugačiji zakon disperzije i to zato što Furije lik ovog dela interakcije zavisi od tog pravca prostiranja i otuda se on naziva neanalitičkim.

Napomenimo da prilikom pada na kristal svetlosni kvant može pobuditi kako elektronska tako i unutrašnja vibraciona stanja molekula. Eksitacije koje nastaju u drugom slučaju nazivaju se vibroni, ali oni neće biti predmet našeg proučavanja. U tom slučaju hamiltonijan za molekulske kristale je ustvari hamiltonijan sa dvočestičnom fermijonskom interakcijom i u reprezentaciji druge kvantizacije ima sledeći oblik:

$$H=\sum_{\vec{n}f} E_{\vec{n}f}\, a^{+}_{\vec{n}}\, a_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2; f_3 f_4)\, \times$$

$$\times\, a^{+}_{\vec{n}f_1}\, a^{+}_{\vec{m}f_2}\, a_{\vec{m}f_3}\, a_{\vec{n}f_4} \qquad (I\ 1.2),$$

gde je:

$E_{\vec{n}f}$ -energija elektronskog pobudjenja molekula u čvoru $(\vec{n})$, iz osnovnog stanja u f-to pobudjeno stanje;

$a^{+}_{\vec{n}f}$, $a_{\vec{n}f}$ -Fermi-jevi operatori kreacije i anihilacije elektrona u čvoru $(\vec{n})$ i u stanju (f);

f_1, f_2, f_3, f_4 -kvantni brojevi stanja elektrona u molekulu;

$V_{nm}(f_1 f_2; f_3 f_4)$-predstavlja matrične elemente operatora dipol-dipolne interakcije. Ovi matrični elementi dipol-dipolne interakcije dva molekula koja se nalaze na mestima $(\vec{m})$ i $(\vec{n})$ u kristalu i u različitim stanjima (f_1, f_2, f_3, f_4) dati su u reprezentaciji druge kvantizacije u obliku:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2; f_3 f_4) = \int \varphi^{*f_1}_{\vec{n}}\, \varphi^{*f_2}_{\vec{m}}\, V_{\vec{n}\vec{m}}\, \varphi^{f_3}_{\vec{m}}\, \varphi^{f_4}_{\vec{n}}\, d\sigma_{\vec{n}}\, d\sigma_{\vec{m}} \qquad (I\ 1.3),$$

gde je:

$\varphi^{f}_{\vec{n}}$ -svojstvena funkcija molekula na mestu $(\vec{n})$ i u stanju (f). Ova funkcija brzo opada sa rastojanjem i zato se izraz (I 1.3) integrali po beskonačnoj zapremini;

$d\sigma_{\vec{n}}, d\sigma_{\vec{m}}$ - elementi zapremine.

Izraz (I 1.2) predstavlja hamiltonijan molekulskih kristala u odnosu na opisani proces nastanka eksitona i on je predstavljen kao hamiltonijan sa dvočestičnom fermijonskom interakcijom, dakle to je neki elektronski hamiltonijan, koji strogo uzevši nije pogodan za opisivanje eksitona, jer eksiton ne predstavlja pobudjeni elektron. Zbog toga napisani elektronski hamiltonijan treba prilagoditi eksitonima, tj. mesto Fermi operatora treba uvesti neke nove operatore koji bi opisivali kreaciju i anihilaciju eksitona, koji ćemo označiti sa P^{+} i P.

Pre no što uvedemo ove nove operatore pretpostavimo da eksitoni u ovom slučaju nastaju isključivo u prelazu dva stanja i to izmedju osnovnog stanja (0) i nekog od pobudjenih stanja (f).

Ovakvo shvatanje prelaza je moguće ukoliko je upadna svetlost monehromatska ili ukoliko su ostala pobudjena stanja molekula dosta udaljena od stanja (f).Ovaj zahtev se praktično veoma teško da ostvariti,ali bez obzira na to pri svakom svetlosnom impulsu,ili pri bilo kom rasporedu pobudjenih stanja,uvek je jedna od prelaza više verovatan od ostalih.Uzimajući u obzir gornje dve pretpostavke možemo uzeti da eksitoni nastaju pri prelazu izmedju stanja (0) i (f),tj. posmatraćemo tzv. jednonivovsku šemu.

Sada se konačno mogu definisati ovi novi operatori P^+i P ,gde je P^+operator kreacije,naime on pre stavlja nestanak elektrona iz stanja (0) i njegovu kreaciju na stanju (f),tj. kreira kvant pobudjenja (eksiton). P je operator anihilacije i on pre stavlja nestanak kvanta pobudjenja molekula (eksitona),tj. pre stavlja pojavu elektrona u osnovnom stanju (0) i nestanak elektrona iz stanja (f).Iz opisanog sledi da se ovi novi operatori (nazvani Pauli operatori) mogu pre staviti pomoću dva Fermi operatora i to kao:

$$P^+_{\vec{n}}=a^+_{\vec{n}f}\,a_{\vec{n}0}\quad ;\quad P_{\vec{n}}=a^+_{\vec{n}0}\,a_{\vec{n}f} \qquad (I\ 1.4).$$

Ovako uvedeni Pauli operatori ne pokoravaju se ni Fermi ni Boze komutacionim relacijama,oni ustvari pre stavljaju u neku ruku sredinu izmedju te dve vrste operatora sa sledećim komutacionim relacijama:

$$\left.\begin{aligned}
&[P_{\vec{n}},P^+_{\vec{m}}]=(1-2P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}})\,\delta_{\vec{n}\vec{m}}\\
&[P_{\vec{n}},P_{\vec{m}}]=[P^+_{\vec{n}},P^+_{\vec{m}}]=0 \qquad \vec{m}=\vec{n}\\
&P^2_{\vec{n}}=P^{+2}_{\vec{n}}=0\\
&P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}=a^+_{\vec{n}f}\,a_{\vec{n}f}=0 \ \text{ili}\ 1
\end{aligned}\right\} \qquad (I\ 1.5).$$

Ove komutacione relacije su dobijene iz komutacionih relacija za Fermi operatore i nekih dopunskih uslova (detalji su dati u monografiji [1]. Iz ovako napisanih komutacionih relacija za Pauli operatore vide se njihove osobine.Ukoliko se relacije primene na isti čvor rešetke $(\vec{m}=\vec{n})$ imamo:

$$[P_{\vec{n}},P^+_{\vec{n}}]=1-2P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}\,,$$

tj. Pauli operatori se ponašaju kao Fermi operatori,a za različite čvorove rešetke $(\vec{m}\neq\vec{n})$ imamo:

$$[P_{\vec{n}}, P^{+}_{\vec{m}}] = 0$$

tj. Pauli operatori se ponašaju kao Boze operatori.

Sada se može na osnovu gore navedenih činjenica koje su korišćene pri uvodjenju i kasnije pri opisivanju Pauli operatora, transformisati hamiltonijan (I 1.2) u pogodniji oblik (koji će na odredjen način opisivati eksitone), tj. hamiltonijan sada dobija oblik:

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} \times$$

$$\times (P^{+}_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \qquad (\mathrm{I}\ 1.6),$$

gde je:

$$\left.\begin{aligned}
&\mathcal{E}_0 = N[E_0 + \tfrac{1}{2} V_0(00;00)] \\
&\Delta = E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}0} - V_0(00;00) + \tfrac{1}{2} V_0(f0;0f) + \tfrac{1}{2} V_0(0f;f0) \\
&2 I_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;f0) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0f;0f) \\
&\beta_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(ff;00) = V_{\vec{n}\vec{m}}(00;ff) \\
&2\gamma_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(ff;ff) + V_{\vec{n}\vec{m}}(00;00) - V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;0f) - V_{\vec{n}\vec{m}}(0f;f0) \\
&V_0(f_1 f_2 f_3 f_4) = \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4)
\end{aligned}\right\} \qquad (\mathrm{I}\ 1.7).$$

Zadnja dva sabirka u izrazu za hamiltonijan se sada mogu zanemariti, jer u slučaju malog broja eksitona proces nastanka ili nestanka dva eksitona na različitim mestima u molekulskom kristalu je malo verovatan, te za ovaj slučaj hamiltonijan dobija jednostavniji izgleg:

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} \qquad (\mathrm{I}\ 1.8).$$

Posmatranjem hamiltonijana (I 1.6) koji je dobijen prelazom sa Fermi operatora na Pauli operatore, vidi se da je u njegovom kvadratnom delu uključena fermijonska interakcija (fermijonska interakcija pre stavlja interakciju izmedju čestica, odnosno elektrona), dok sam hamiltonijan (I 1.6) opisuje sistem kvazičestica. Odavde se izvlači zaključak da je u ovom hamiltonijanu dobar deo interakcije izmedju čestica uključen u sistem kvazičestica (ovo je ideja Bogoljubova, metod približne druge kvantizacije). Pomoću ovoga se u suštini sistem jako interagujućih čestica zamenjuje sa sistemom slabo interagujućih kvazičestica.

Sada, koristeći se vezom koja postoji izmedju Pauli i Boze operatora:

$$\left.\begin{aligned} P_{\vec n} &= \left[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B_{\vec n}^{+\nu}B_{\vec n}^{\nu}\right]^{\frac{1}{2}}B_{\vec n} \\ P_{\vec n}^{+} &= B_{\vec n}^{+}\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B_{\vec n}^{+\nu}B_{\vec n}^{\nu}\right]^{\frac{1}{2}} \\ P_{\vec n}^{+}P_{\vec n} &= \hat N^{(p)} = \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B_{\vec n}^{+\nu+1}B_{\vec n}^{\nu+1} \end{aligned}\right\} \qquad (\text{I } 1.9),$$

$\hat N^{(p)}$ - operator broja paulijona,

moguće je u hamiltonijanu (I 1.6) izvršiti prelaz na Boze operatore. Iz relacije (I 1.9) u slučaju malog broja eksitona (slabo eksitirani kristal), možemo približno dobiti:

$$P_{\vec n}=B_{\vec n}\ ;\quad B_{\vec n}^{+}=P_{\vec n}^{+}\ ;\quad P_{\vec n}^{+}P_{\vec n}=B_{\vec n}^{+}B_{\vec n} \qquad (\text{I } 1.10).$$

Bez obzira koliko bio mali broj eksitona, ova smena unosi izvesnu grešku. To možemo videti iz poslednjeg izraza u (I 1.9) koja nam približno daje:

$$\hat N^{(p)}=B_{\vec n}^{+}B_{\vec n}-B_{\vec n}^{+}B_{\vec n}^{+}B_{\vec n}B_{\vec n}=B_{\vec n}^{+}B_{\vec n}-B_{\vec n}^{+}(B_{\vec n}B_{\vec n}^{+}-$$
$$-1)B_{\vec n}=\hat N_{\vec n}-\hat N_{\vec n}(\hat N_{\vec n}-1),$$

$\hat N_{\vec n}$ - operator broja bozona.

S obzirom da je okupacioni broj paulijona $\hat N^{(p)}=0,1$, iz poslednje relacije sledi da će to biti moguće samo kada je broj bozona $\hat N_{\vec n}=0,1,2$, tj. pri slaboj eksitaciji kristala. Ovom zamenom sada se dobija hamiltonijan približne druge kvantizacije:

$$H=\mathcal{E}_0+\Delta\sum_{\vec n}B_{\vec n}^{+}B_{\vec n}+\sum_{\vec n\vec m}I_{\vec n\vec m}B_{\vec n}^{+}B_{\vec m} \qquad (\text{I } 1.11).$$

Korišćenjem Furije-transformacija:

$$\left.\begin{aligned} B_{\vec n}&=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec k}B_{\vec k}e^{i\vec k\vec n}\ ;\qquad B_{\vec n}^{+}=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec k}B_{\vec k}^{+}e^{-i\vec k\vec n}; \\ I_{\vec n\vec m}&=\frac{1}{N}\sum_{\vec k}I(\vec k)\,e^{i\vec k(\vec n-\vec m)} \end{aligned}\right\} \qquad (\text{I } 1.12),$$

dobija se hamiltonijan u dijagonalizovanom obliku:

$$H=\mathcal{E}_0+\sum_{\vec{k}}[\Delta+I(\vec{k})]B^+_{\vec{k}}B_{\vec{k}} \qquad (I\ 1.13).$$

Iz ovog hamiltonijana se sada može odrediti zakon disperzije za eksitone:

$$E(\vec{k})=\frac{\partial H}{\partial B^+_{\vec{k}}\partial B_{\vec{k}}}=\frac{\partial}{\partial B^+_{\vec{k}}\partial B_{\vec{k}}}\Big\{\mathcal{E}_0+\sum_{\vec{k}}[\Delta+I(\vec{k})]\times$$
$$\times B^+_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\Big\}=\Delta+I(\vec{k}) \qquad (I\ 1.14).$$

Ovaj zakon disperzije može se prikazati u prikladnijem obliku,koristeći se sledećim aproksimacijama:

1° Da je kod $I\vec{k}$ bitan samo analitički deo dipol-dipolne interakcije.

2° Koristi se aproksimacija najbližih suseda (dipol-dipolna interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja).

3° Ovde je od interesa samo ona oblast u kojoj talasni vektori imaju male vrednosti,a takodje posmatramo kristale proste kubne strukture.

Iz gornjih aproksimacija se dobija matrični element interakcije $I(\vec{k})$ u obliku:

$$I(\vec{k})=2I(\cos K_x a+\cos K_y a+\cos K_z a) \qquad (I\ 1.15),$$

gde je:

I -vrednost matričnog elementa interakcije za najbliže susede.

Na osnovu aproksimacije (3°) sledi da je moguće izraz u zagradi jednačine (I 1.15) razviti u red,čime se dobija:

$$I(\vec{k})=6I-Ia^2K^2 \qquad (I\ 1.16).$$

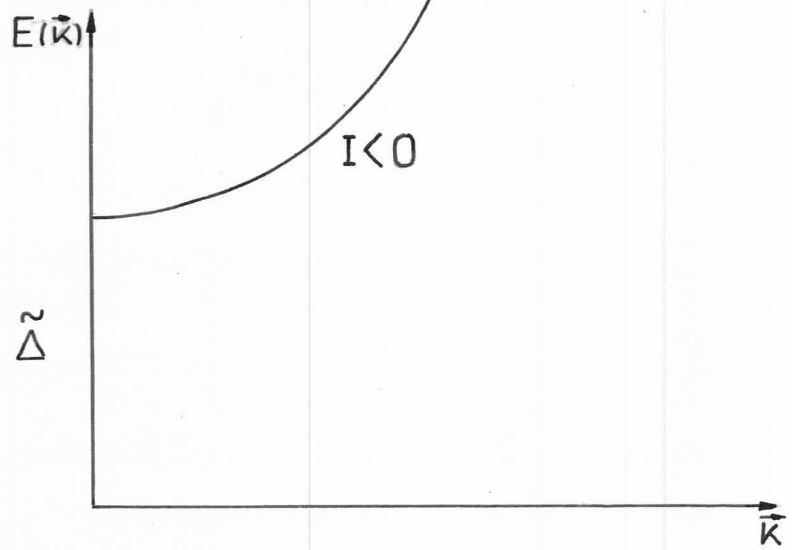
Sada je energija:

$$\left.\begin{aligned}E(\vec{k})&=\Delta+I(\vec{k})=\Delta+6I-Ia^2K^2\\ E(\vec{k})&=\tilde{\Delta}+\frac{\hbar^2K^2}{2m^*}\end{aligned}\right\} \qquad (I\ 1.17).$$

Poslednji izraz prestavlja poznati izraz za energiju čestice mase (m^*).Iz ovoga se može zaključiti da se u slučaju gornje tri aproksimacije eksitoni ponašaju kao kvazičestice sa efektivnom masom:

$$m^*=-\frac{\hbar^2}{2Ia^2} \qquad (I\ 1.18).$$

Da li će ovako dobijena efektivna masa eksitona biti pozitivna ili negativna, zavisi isključivo od predznaka matričnog elementa interakcije (I). Ako je (I) manje od nule (u slučaju privlačenja) m^* će biti veće od nule i zakon disperzije se može predstaviti grafički kao na Sl. 1.



Sl. 1.

I 2. Mogućnosti Boze kondenzacije u sistemu eksitona i efektivni eksitonski hamiltonijan

Pri razmatranju mogućnosti Boze kondenzacije u sistemu eksitona (i kvazičestica uopšte) potrebno je odgovoriti na sledeća dva pitanja. Prvo, pod kojim uslovima će broj eksitona u sistemu biti konstantan?, što je osnovni preduslov da bi moglo doći do Boze kondenzacije. Drugo, potrebno je videti kako na kolektivna svojstva eksitona utiče činjenica da se oni ne pokoravaju Boze-Einsteinovoj statistici, jer je poznato da do pojave kondenzata dolazi u sistemu Boze čestica.

Što se tiče prvog pitanja, većina autora koji su proučavali problem Boze kondenzacije u kvazičestičnim sistemima([2],[3],[4]) slaže se u tome, da će broj eksitona u sistemu biti konstantan, samo u slučaju kada je vreme uspostavljanja termodinamičke ravnoteže (t_c) eksitona i kristalne rešetke (uslovljeno uglavnom eksiton-fonon interakcijom) manje od vremena života eksitona (t_e).

Vreme (t_c) uspostavljanja termodinamičke ravnoteže odredjuje se iz brzine eksitona (v) i njihovog srednje slobodnog puta (λ). Ukoliko se brzina eksitona pokorava Maksvelovoj raspodeli, srednje slobodan put je:

$$\lambda=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{n\sigma} \qquad \text{(I 2.1)},$$

gde je:

σ - presek rasejanja,

a - prečnik eksitona (ako se predpostavi da su svi eksitoni u kristalu indentični, to će (a) biti i rastojanje izmedju centara dva eksitona u trenutku sudara) pa je presek:

$\sigma = \pi a^2$; a vreme (t_c)

$$t_c = \frac{1}{\sqrt{2}\pi}\frac{1}{na^2}\frac{1}{v} \qquad (I\ 2.2),$$

v - brzina eksitona;

n - broj eksitona u cm^3 kristala

Ako uzmemo da je $n \sim 2{,}7\,10^{17} - 2{,}7\,10^{18}$ (cm^{-3}) (može se dobiti pomoću jakog laserskog snopa), $a \sim 5\times10^{-8}(cm)$ i $v = 10^5 - 10^6\,(cm/s)$. Iz formule (I 2.2) sledi da je:

$$t_c \sim 10^{-9} - 10^{-13}\ (s).$$

Vreme života za neke organske kristale odredjeno je eksperimentalno i iznosi:

$$t_e \sim 10^{-6} - 10^{-8}\ (s).$$

Ako se uporede ovi rezultati vidimo da je za sistem eksitona ispunjen uslov $t_c < t_e$, te se može smatrati da se Boze kondenzacija u sistemu eksitona pojavljuje kao statistička fluktacija u vremenskom intervalu

$$10^{-9}(s) < t < 10^{-7}(s).$$

Da bi ispitali kako na kolektivna svojstva eksitona utiče činjenica da se oni ne pokoravaju Boze-Einsteinovoj statistici (drugo pitanje), detaljno ćemo analizirati hamiltonijan dat formulom (I 1.6).

Ako u hamiltonijanu (I 1.6) izvršimo prelaz sa Pauli na Boze operatore (zadržavajući se do članova koji opisuju dvobozonske interakcije) pomoću formula:

$$\left.\begin{aligned} &P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} - B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \ ; \quad P^+_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} - B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} ; \\ &P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} - B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \end{aligned}\right\} \qquad (I\ 2.3),$$

hamiltonijan će sada poprimiti oblik:

$$H = H_2 + H_4$$

$$\left.\begin{aligned}
H_2 &= \sum_{\vec{n}} \Delta B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\neq\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\neq\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} \times \\
&\times (B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} + B_{\vec{n}} B_{\vec{m}}); \\
H_4 &= -\Delta \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\neq\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \times \\
&\times (B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{m}}) + \\
&+ \sum_{\vec{n}\neq\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}}
\end{aligned}\right\} \quad (I\ 2.4).$$

Ostali članovi (članovi višeg reda) hamiltonijana se zanemaruju.

Ovim prelazom sa Pauli na Boze operatore u hamiltonijanu se javljaju i izrazi za kinematičku interakciju eksitona, koji se sastoji iz dva tipa sabiraka, koji su različitog porekla. Prvi od njih nastaje iz sledećih članova, proporcionalni energiji eksitacije Δ :

$$H_\delta = \Delta \sum_{\nu} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} \sum_{\vec{n}} B^{+\nu+1}_{\vec{n}} B^{\nu+1}_{\vec{n}} \qquad (I\ 2.5).$$

Ako se zadržimo kao i kod izraza (I 2.3) na ($\nu = 1$) imamo:

$$H_\delta = -\Delta \sum_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \qquad (I\ 2.6).$$

Ovaj izraz pre stavlja rasejanje eksitona na δ-potencijalu, koji je na osnovu izraza (I 2.4) jednak:

$$U_{\vec{n}\vec{m}} = -2\Delta\, \delta_{\vec{n}\vec{m}} \qquad (I\ 2.7).$$

Drugu grupu sabiraka u kinematičkoj interakciji čine izrazi:

$$H_{\vec{n}\vec{m}} = -\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{m}}) \qquad (I\ 2.8).$$

Ovim hamiltonijanom se prikazuje dejstvo na jedan eksiton koji se nalazi u stanju ($\vec{n}$) i njegovo prebacivanje u stanje ($\vec{m}$). Ovaj hamiltonijan postoji (tj. različit je od nule) samo ukoliko u stanju ($\vec{n}$ ili $\vec{m}$) stoji još jedan eksiton i to na istom mestu na kojem je bio (na koje odlazi) prvi eksiton.

Poslednji sabirak u (I 2.4) daje nam dinamičku interakciju izmedju eksitona (sada bozona)

S obzirom na činjenicu da je $\Delta \gg I_{\vec{n}\vec{m}}$ i $\gamma_{\vec{n}\vec{m}}$ dominantni član u hamiltonijanu H_4 predstavlja član koji nam daje rasejanje na δ-potencijalu i mi ćemo u daljem radu zadržati samo taj član (detaljna analiza hamiltonijana H_4 data je u [1] glava X). Prema tome umesto hamiltonijana (I 2.4) mi ćemo koristiti sledeći (kvadratni deo je dat u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji):

$$H = H_2 + H_4$$

gde je:

$$H_2 = \sum_{\vec{n}} \Delta B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} \qquad (\mathrm{I}\ 2.9)$$

i

$$H_4 = \Delta \sum_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \qquad (\mathrm{I}\ 2.10).$$

Pri prelazu u impulsni prostor rasejanje na δ-potencijalu ne možemo tretirati u Bornovoj aproksimaciji već ćemo primeniti tzv.prelaz na amplitudu rasejanja, koji je dat sledećom relacijom:

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} U_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \longrightarrow \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} I(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) \times$$
$$\times b^+_{\vec{k}_1} b^+_{\vec{k}_2} b_{\vec{k}_3} b_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} ;$$

gde je:

$$I(\vec{k}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m v}\left[A(\vec{k}) + A^*(\vec{k})\right] \qquad (\mathrm{I}\ 2.11)$$

i $A(\vec{k})$ -predstavlja amplitudu rasejanja.

U monografiji ([1] glava X)pokazano je da je amplituda rasejanja eksitona na δ-potencijalu:

$$A(\vec{k}) = f = -\frac{a}{2} \; ; \text{ tako da je u našem slučaju:}$$

$$I(\vec{k}) \equiv \gamma_0 = \frac{2\pi a \hbar^2}{v m} \qquad (\mathrm{I}\ 2.12),$$

gde je:

$v = \frac{V}{N}$ -zapremina elementarne ćelije.

Imajući u vidu gore spomenuto i formulu (I 1.17)eksitonski hamiltonijan u impulsnom prostoru dobijaju sledeći oblik:

$$H = \sum_{\vec{k}} \left(\tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{\gamma_0}{m} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \times$$

$$\times b^{+}_{\vec{k}_1} b^{+}_{\vec{k}_2} b_{\vec{k}_3} b_{\vec{k}_4} \qquad (I\ 2.13).$$

Iz poslednje formule vidimo da u ovoj aproksimaciji sistem eksitona se ponaša kao slabo ne idealan Boze gas i prema tome može se i u ovom slučaju primeniti teorija Bogoljubova za odredjivanje energetskog spektra eksitona u uslovima Boze kondenzacije.

I 3. Mikroskopska teorija Bogoljubova

Kao što je poznato Bogoljubov je prvi teorijski objasnio superfluidnost tečnog He^4 ([5]). S obzirom da se ista teorija može primeniti na sistem eksitona ukratko ćemo dati teoriju Bogoljubova.

Pošto kod idealnog Boze gasa ne može doći do pojave superfluidnosti Bogoljubov je sistem atoma He^4 posmatrao kao slabo ne idealan Boze gas, čiji se hamiltonijan može pisati u obliku:

$$H=\sum_{\vec{n}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \Delta_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}} \qquad (I\ 3.1),$$

odnosno kao suma kinetičke energije pojedinih čestica i potencijalne energije, koja nastaje usled slabe interakcije izmedju čestica.

U reprezentaciji druge kvantizacije hamiltonijan ima sledeći oblik:

$$H=\sum_{\vec{n}} b^{+}_{\vec{n}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{n}}\right) b_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}-\vec{m}}\, b^{+}_{\vec{n}} b^{+}_{\vec{m}} b_{\vec{m}} b_{\vec{n}} \qquad (I\ 3.2).$$

Posle prelaza iz konfiguracionog u impulsni prostor pomoću:

$$b^{+}_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{p}} b^{+}_{\vec{p}}\, e^{-i\vec{p}\vec{n}} \ ; \qquad b_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{p}} b_{\vec{p}}\, e^{i\vec{p}\vec{n}} \qquad (I\ 3.3),$$

hamiltonijan sistema atoma He^4 dobija sledeći oblik:

$$H=\sum_{\vec{p}\neq 0} \frac{p^2}{2m} b^{+}_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + \frac{1}{2N} \sum_{\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{p}_3,\vec{p}_4} W(\vec{p}_4-\vec{p}_1) \times$$

$$\times\, b^{+}_{\vec{p}_1} b^{+}_{\vec{p}_2} b_{\vec{p}_3} b_{\vec{p}_4}\, \delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2;\, \vec{p}_3+\vec{p}_4} \qquad (I\ 3.4).$$

Polazne ideje Bogoljubova baziraju na sledećim fizičkim činjenicama:

a) Boze čestice se mogu sakupljati u neograničenom broju u jednom kvantnom stanju.

b) Postoji opšta težnja u prirodi da sistem zauzme stanje najniže energije.

Predpostavimo da je ukupan broj čestica sistema približno jednak $N \sim 10^{24}$. Na niskoj temperaturi, na osnovu gore rečenog, skoro sve ove čestice se nalaze u kondenzatu. Dakle:

$$\left.\begin{array}{l} \sum_{\vec{p}} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} = b^+_o b_o + \sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} = N_o + \sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}\,; \\ [b_o b^+_o] = b_o b^+_o - b^+_o b_o\,;\ b_o b^+_o - b^+_o b_o = 1\,;\ N \sim N_o \\ b_o b^+_o = 1 + b^+_o b_o \sim 10^{24} = N_o\,;\ \text{pa je}\ \ b_o b^+_o \sim b^+_o b_o \end{array}\right\} \quad (\mathrm{I}\ 3.5).$$

Iz gornjeg se vidi da Boze operatori u kondenzatu se ponašaju kao obični brojevi (a ne kao operatori). Ovo se koristi kod sredjivanja drugog dela hamiltonijana, pri čemu se u njemu vrednosti impulsa uzimaju u skladu sa sledećom tablicom:

p_1	p_2	p_3	p_4
0	0	0	0
p_1	p_2	0	0
p_1	0	p_3	0
p_1	0	0	p_4
0	p_2	p_3	0
0	p_2	0	p_4
0	0	p_3	p_4

Tablica Br. 1.

Na osnovu ovoga je:

$$H_{eff} = \sum_{\vec{p}\neq 0}\left\{\frac{p^2}{2m} + \frac{N_o}{N}W(\vec{p})\right\} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{p}\neq 0} W(\vec{p})\,(b^+_{\vec{p}} b^+_{-\vec{p}} +$$

$$+ b_{-\vec{p}} b_{\vec{p}}) + \frac{N_o}{N} W(0) \sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + \frac{1}{2N} \sum_{\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{p}_3\neq 0} W(\vec{p}_2 - \vec{p}_3) \times$$

$$\times\, b^+_{\vec{p}_1} b^+_{\vec{p}_2} b_{\vec{p}_3} b_{\vec{p}_1+\vec{p}_2-\vec{p}_3} + \frac{N_o^2}{2N} W(0) \qquad (\mathrm{I}\ 3.6).$$

Poslednji član hamiltonijana (I 3.6) predstavlja energiju osnovnog stanja,koja ne utiču na zakon disperzije.Četvrti član istog hamiltonijana se odbacuje (mali je,deli se sa $\sim 10^{24}$).

Ako uzmemo da je:

$$\alpha(\vec{p})=\frac{p^2}{2m}+W(\vec{p}) \quad ; \quad \beta(\vec{p})=W(\vec{p}) \qquad \text{(I 3.7)},$$

dobijamo:

$$H=\sum_{\vec{p}=0}[\alpha(\vec{p})+\beta(\vec{p})]b^{+}_{\vec{p}}b_{\vec{p}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{p}\neq 0}\beta(\vec{p})[b^{+}_{\vec{p}}b^{+}_{-\vec{p}}+b_{\vec{p}}b_{-\vec{p}}] \qquad \text{(I 3.8)}.$$

Da bi smo dobili energiju,naime $\mathcal{E}(\vec{k})$,potrebno je izvršiti dijagonalizaciju gornjeg hamiltonijana tzv."UV" transformaciju. Kao rezultat ove dijagonalizacije dobija se:

$$\mathcal{E}(\vec{k})=\sqrt{\Delta^2_{\vec{k}}-\beta^2_{\vec{k}}} \qquad \text{(I 3.9)}.$$

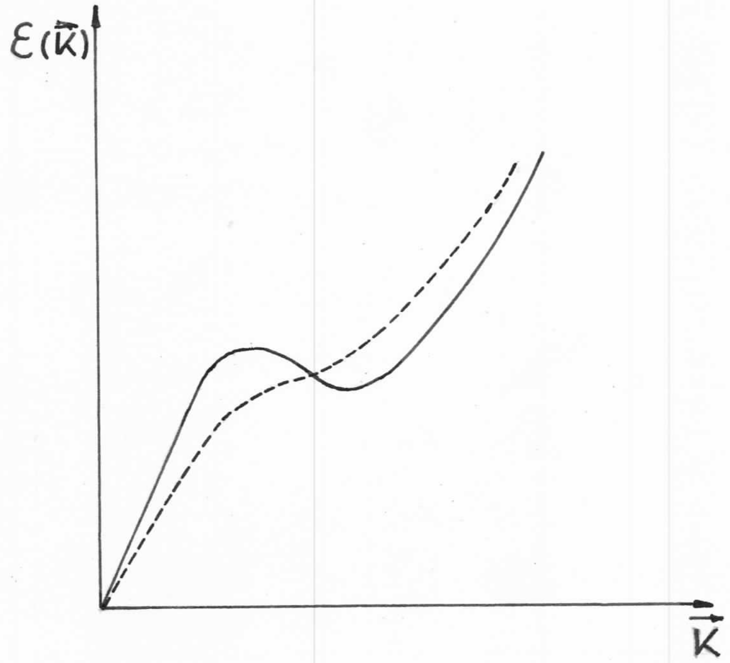
Bogoljubov je u svom radu proučavao tečni He^4 sa niskim temperaturama i pri prelazu na amplitudu rasejanja dobio je sledeći rezultat:

$$\mathcal{E}(\vec{k})=\sqrt{\left(\frac{\hbar^2K^2}{2m}\right)^2+\frac{\hbar^2K^2}{2m}\,\frac{4\pi a\hbar^2N_0}{m}} \qquad \text{(I 3.10)}.$$

Lako se vidi da ovaj zakon disperzije zadovoljava uslov superfluidnosti,koji prema Landau glasi:

$$\min\frac{\mathcal{E}(\vec{p})}{p}>0$$

Time je i objašnjena pojava superfluidnosti tečnog He^4.



Sl.2.

Puna linija na grafiku pokazuje eksperimentalno dobijenu krivu, a isprekidana linija pokazuje teorijski odredjenu krivu.

Ako u eksitonskom hamiltonijanu (I 2.13)energiju eksitona računamo od dna eksitonske zone ($d(\vec{k}) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k}) - \tilde{\Delta}$) i stavimo formalno $\gamma_0 = \gamma(\vec{k})$, eksitonski hamiltonijan dobija isti oblik kao i hamiltonijan sistema atoma He^4 (I 3.4).Primenjujući na sistem eksitona ista razmatranja kao i na He^4,efektivni eksitonski hamiltonija u slučaju Boze kondenzacije dobija sledeći oblik:

$$H = \frac{1}{2}\frac{N_0^2}{N}\gamma_0 + \sum_{\vec{k}\neq 0}[d(\vec{k}) + \frac{N_0}{N}\gamma(\vec{k})]b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} +$$

$$+ \frac{b_0^2}{2N}\sum_{\vec{k}\neq 0}\gamma(\vec{k}) b^+_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} + \frac{b_0^{+2}}{2N}\sum_{\vec{k}\neq 0}\gamma(\vec{k}) b^+_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3\neq 0}\gamma(\vec{k}_1-\vec{k}_3)\, b^+_{\vec{k}_1} b^+_{\vec{k}_2} b_{\vec{k}_3} b_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \qquad (I\ 3.11),$$

gde je:

$$\frac{N_0}{N}\gamma(\vec{k}) = \frac{N_0}{N}\,\frac{2\pi a \hbar^2}{m v} = \beta(\vec{k})$$

Ako uvedemo nove operatore:

$$B_{\vec{k}} = \frac{b_0^+ b_{\vec{k}}}{\sqrt{N_0}} \quad ; \quad B^+_{\vec{k}} = \frac{b_0 b_{\vec{k}}}{\sqrt{N_0}} \qquad (I\ 3.12),$$

hamiltonijan postaje:

$$\left.\begin{aligned} H = \frac{1}{2}\frac{N_0^2}{N}\gamma(0) + \sum_{\vec{k}\neq 0}[d(\vec{k}) + \beta(\vec{k})]B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + \frac{N_0}{2N}\sum_{\vec{k}\neq 0}\gamma(\vec{k}) \times \\ \times (B^+_{\vec{k}} B^+_{-\vec{k}} + B_{\vec{k}} B_{-\vec{k}}) + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3\neq 0}\gamma(\vec{k}_1-\vec{k}_3)\, B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \end{aligned}\right\} (I\ 3.13).$$

Odavde sledi gore napisani rezultat Bogoljubova,ako dijagonalizujemo kvadratni deo hamiltonijana.U sledećem paragrafu do istog rezultata doći ćemo primenom metoda Grnovih funkcija.

I 4. Grinova funkcija eksitona u uslovima Boze kondenzacije i spektar elementarnih eksitacija

Spektar elementarnih eksitacija u uslovima postojanja kondenzata ovde nećemo tražiti metodom Bogoljubova (odnosno "UV" transformacijom),već metodom dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija,koje je razvio Tjablikov ([6]).

Napomenimo samo da je specijalnu dijagramsku tehniku za Boze sisteme sa kondenzatom razvio Beljajev [7] ,koju medjutim mi ovde nećemo koristiti.

S obzirom da u sistemu sa kondenzatom pored rasejanja izmedju samih nad-kondenzatnih eksitona postoje i procesi kreacije ili anihilacije dva nad-kondenzatna eksitona na račun anihilacije odnosno kreacije dva kondenzatna, što simbolički možemo napisati kao:

$$0+0 \longrightarrow \vec{k}+(-\vec{k}) \quad ; \quad \vec{k}+(-\vec{k}) \longrightarrow 0+0 .$$

U ovom slućaju moramo simultano rešavati sistem jednačina za retardovane Grinove funkcije

$$\left.\begin{aligned} G^R(\vec{k};t-t') &= \Theta(t-t')\langle[B_{\vec{k}}(t), B^+_{\vec{k}}(t')]\rangle \\ G^R(\vec{k};t-t') &= \Theta(t-t')\langle[B^+_{-\vec{k}}(t), B^+_{\vec{k}}(t)]\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (\mathrm{I}\ 4.1).$$

Druga funkcija upravo opisuje spomenuti proces kreacije (anihilacije)dva nad-kondenzatna eksitona.Sistem jednačina za Furije transforme po vremenu gornjih funkcija ima sledeći oblik:

$$\left.\begin{aligned} \tilde{E}\langle\langle B_{\vec{k}} | B^+_{\vec{k}}\rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi} + \langle\langle [B_{\vec{k}}, H] | B^+_{\vec{k}}\rangle\rangle \\ \tilde{E}\langle\langle B_{-\vec{k}} | B^+_{\vec{k}}\rangle\rangle &= \langle\langle [B^+_{-\vec{k}}, H] | B^+_{\vec{k}}\rangle\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (\mathrm{I}\ 4.2).$$

Sada se na osnovu hamiltonijana:

$$H = \sum_{\vec{k}} [\alpha(\vec{k}) + \beta(\vec{k})] B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} (B^+_{-\vec{k}} B^+_{\vec{k}} + B_{\vec{k}} B_{-\vec{k}})$$

mogu odrediti komutatori koji figurišu u Grinovoj funkciji

$$\begin{aligned} [B_{\vec{k}}, H] &= \sum_{\vec{q}} [\alpha(\vec{q}) + \beta(\vec{q})] [B_{\vec{k}}, B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}}] + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \beta(\vec{q}) \times \\ &\times [B_{\vec{k}}, B^+_{-\vec{q}} B^+_{\vec{q}}] + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \beta(\vec{q}) [B_{\vec{k}}, B_{\vec{q}} B_{-\vec{q}}] = \\ &= [\alpha(\vec{k}) + \beta(\vec{k})] B_{\vec{k}} + \beta(\vec{k}) B^+_{-\vec{k}} \end{aligned} \qquad (\mathrm{I}\ 4.3),$$

isto tako je:

$$\begin{aligned} [B^+_{-\vec{k}}, H] &= \sum_{\vec{q}} [\alpha(\vec{q}) + \beta(\vec{q})] [B^+_{-\vec{k}}, B^+_{\vec{q}} B_{\vec{q}}] + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \beta(\vec{q}) \times \\ &\times [B^+_{-\vec{k}}, B^+_{-\vec{q}} B^+_{\vec{q}}] + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \beta(\vec{q}) [B^+_{-\vec{k}}, B_{\vec{q}} B_{-\vec{q}}] = \\ &= -[\alpha(\vec{k}) + \beta(\vec{k})] B^+_{-\vec{k}} - \beta(\vec{k}) B_{\vec{k}} \end{aligned} \qquad (\mathrm{I}\ 4.4),$$

Ovi komutatori se sada vraćaju u izraze (I 4.2) i dobija se sistem jednačina u obliku:

$$\left.\begin{aligned} &\tilde{E}\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}+[\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle+\\ &\qquad+\beta(\vec{k})\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B_{\vec{k}}\rangle\rangle\\ &\tilde{E}\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle=-[\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle+\\ &\qquad+\beta(\vec{k})\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (I\ 4.5).$$

Iz ovog sistema odredićemo funkciju $\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle$,koja će nam trebati kasnije kod ispitivanja optičkih osobina eksitonskog kondenzata.Iz druge jednačine dobijamo:

$$[\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B_{\vec{k}}\rangle\rangle=-\beta(\vec{k})\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle$$

Odakle možemo izraziti Grinovu funkciju $\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle$ .Uvrštavanjem u prvu jednačinu sistema (I 4.5), dobijamo:

$$\begin{aligned} &\tilde{E}\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}+[\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle+\\ &\qquad+\beta(\vec{k})\left[-\frac{\beta(\vec{k})}{\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}\right]\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle \end{aligned} \qquad (I4.6),$$

tj.

$$[\tilde{E}-\alpha(\vec{k})-\beta(\vec{k})+\frac{\beta^{2}(\vec{k})}{\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}]\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi} \qquad (I\ 4.7),$$

odavde se dobija:

$$\begin{aligned} &[\tilde{E}(\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k}))-\alpha(\vec{k})(\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k}))-\beta(\vec{k})\times\\ &\times(\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k}))+\beta^{2}(\vec{k})]\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}\times\\ &\times(\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})) \end{aligned} \qquad (I\ 4.8),$$

konačno:

$$\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}\;\frac{\tilde{E}+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}{\tilde{E}^{2}-\alpha^{2}(\vec{k})-2\alpha(\vec{k})\beta(\vec{k})} \qquad (I\ 4.9).$$

S obzirom da pol Grinove funkcije odredjuje energiju elementarnih eksitacija,iz poslednje relacije se dobija rezultat Bogoljubova:

$$\tilde{E}^2-\alpha^2(\vec{K})-2\alpha(\vec{K})\beta(\vec{K})=0\ ;$$

gde je: $\tilde{E}=\omega(\vec{K})+i\delta\ ;$

a $\omega(\vec{K})=E$; pa je:

$$E\equiv\omega(\vec{K})=\sqrt{\alpha(\vec{K})+2\alpha(\vec{K})\beta(\vec{K})} \qquad \text{(I 4.10).}$$

Dalje Grinova funkcija $\tilde{G}(\tilde{E},\vec{K})$ može se napisati kao:

$$G(\tilde{E},\vec{K})=\frac{i}{2\pi}\left(\frac{A}{\tilde{E}-\omega(\vec{K})}+\frac{B}{\tilde{E}+\omega(\vec{K})}\right) \qquad \text{(I 4.11),}$$

gde su konstante (A iB)odredjene iz jednačine:

$$\frac{\tilde{E}+\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K})}{\tilde{E}-[\alpha^2(\vec{K})+2\alpha(\vec{K})\beta(\vec{K})]}=\frac{\tilde{E}+\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K})}{[\tilde{E}-\omega(\vec{K})][\tilde{E}+\omega(\vec{K})]}=\frac{A}{\tilde{E}-\omega(\vec{K})}+$$

$$+\frac{B}{\tilde{E}+\omega(\vec{K})}=\frac{A\tilde{E}+A\omega(\vec{K})+B\tilde{E}-B\omega(\vec{K})}{\tilde{E}^2-\omega^2(\vec{K})} \qquad \text{(I 4.12),}$$

tj.

$$(A+B)\tilde{E}+(A-B)\omega(\vec{K})=\tilde{E}+\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K}) \qquad \text{(I 4.13).}$$

Iz poslednjeg izraza sledi sistem jednačina,iz kojeg se sada odredjuju konstante (A i B)

$$A+B=1\ ;\ (A-B)\omega(\vec{K})=\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K})\ ;$$

$$A\omega(\vec{K})-(1-A)\omega(\vec{K})=\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K})+\omega(\vec{K})\ ;\ \text{pa je:}$$

$$A=\frac{\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K})+\omega(\vec{K})}{2\omega(\vec{K})} \qquad \text{(I 4.14}$$

a sada se za konstantu (B) dobija:

$$B=1-\frac{\alpha(\vec{K})+\beta(\vec{K})+\omega(\vec{K})}{2\omega(\vec{K})}=\frac{\omega(\vec{K})-\alpha(\vec{K})-\beta(\vec{K})}{2\omega(\vec{K})} \qquad \text{(I 4.15).}$$

Uvrštavanjem ovih vrednosti za (A i B) u (I 4.11),dobijamo:

$$\tilde{G}(\tilde{E},\vec{k})=\frac{i}{2\pi}\left(\frac{\frac{\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})+\omega(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})}}{\tilde{E}-\omega(\vec{k})}+\frac{\frac{\omega(\vec{k})-\alpha(\vec{k})-\beta(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})}}{\tilde{E}-\omega(\vec{k})}\right) \qquad (I\,4.16).$$

Kako je $\tilde{E}$ kompleksna promenljiva,može se predstaviti kao:

$$\tilde{E}=E+i\delta \ ; \ \delta \ll E \ ; \ \text{pa je :}$$

$$\tilde{G}(\tilde{E},\vec{k})=\frac{i}{2\pi}\left(\frac{\frac{\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})+\omega(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})}}{E-\omega(\vec{k})+i\delta}+\frac{\frac{\omega(\vec{k})-\alpha(\vec{k})-\beta(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})}}{E+\omega(\vec{k})+i\delta}\right) \qquad (I\,4.17).$$

S obzirom da ćemo tenzor električne susceptibilnosti u II glavi izraziti preko Grinove funkcije $G^R(\tilde{E},\vec{k})$,koja je sa funkcijom (I 4.17)povezane relacijom:

$$G^R(\tilde{E},\vec{k})=-i\,\tilde{G}(\tilde{E},\vec{k}) \qquad (I\,4.18),$$

odnosno:

$$G^R(E,\vec{k})=\frac{1}{2\pi}\left\{\frac{\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})+\omega(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})[E-\omega(\vec{k})+i\delta]}-\frac{\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})-\omega(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})[E+\omega(\vec{k})+i\delta]}\right\} \qquad (I\,4.19),$$

u daljem radu koristićemo ovu poslednju.

Ukoliko se ponovo vratimo na konstante (A i B) i stavimo C=-B dobijamo:

$$G^R(E,\vec{k})=\frac{1}{2\pi}\left[\frac{A}{E-\omega(\vec{k})+i\delta}-\frac{C}{E+\omega(\vec{k})+i\delta}\right] \qquad (I\,4.20).$$

Da bi se odredio realan i imaginaran deo Grinove funkcije,koja je data u gornjem obliku,iskoristićemo izraz (26.16) iz[6]

$$\frac{f(x)}{x-a\pm i\varepsilon}=\mathcal{P}\frac{f(x)}{x-a}\mp i\pi\delta(x-a)f(x).$$

Na osnovu ovog izraza i Grinove funkcije (I 4.20)koja je već navedena u podesnom obliku,direktno se može napisati njen realan i imaginaran deo.Ovde će se posmatrati samo imaginaran deo funkcije Grina, jer se na osnovu njega odredjuje spektralna intenzivnost i broj eksitona ($N_{\vec{k}}$) (na osnovu jednačina A.25).Dakle:

$$\mathrm{Im}\,G^R(E,\vec{k})=\frac{1}{2\pi}[-\pi\delta(E-\omega(\vec{k}))A+\pi\delta(E+\omega(\vec{k}))C],$$

tj.

$$\mathrm{Im}\, G^R(E,\vec{k}) = -\frac{A}{2}\delta(E-\omega(\vec{k})) + \frac{C}{2}\delta(E+\omega(\vec{k})) \qquad (\mathrm{I}\ 4.21),$$

za slučaj kada je $T=0$ dobija se spektralna intenzivnost:

$$I^{0}_{AB}(E) = -2\,\mathrm{Im}\, G^R_{AB}(E,\vec{k}) = A\,\delta(E-\omega(\vec{k})) -$$

$$- C\delta(E+\omega(\vec{k})) \qquad (\mathrm{I}\ 4.22),$$

gde su:

A i B-operatori.

Ova spektralna intenzivnost je različita od nule kada je $E>0$ na apsolutnoj nuli ($T=0$).

Srednja vrednost proizvoda dva operatora se definiše preko spektralne intenzivnosti ($I^{0}_{AB}(E)$) i to:

$$\langle AB\rangle = \int_0^\infty I^{0}_{AB}(E)\,dE \qquad (\mathrm{I}\ 4.23).$$

U ovom radu operatori A i B su: $A=B_{\vec{k}}$ i $B=B^+_{\vec{k}}$, pa je njihova srednja vrednost:

$$\langle B_{\vec{k}}B^+_{\vec{k}}\rangle = \int_0^\infty [A\delta(E-\omega(\vec{k})) - C\delta(E+\omega(\vec{k}))]\,dE =$$

$$= A\underbrace{\int_0^\infty \delta(E-\omega(\vec{k}))\,dE}_{1} - C\underbrace{\int_0^\infty \delta(E+\omega(\vec{k}))\,dE}_{0} = A \qquad (\mathrm{I}\ 4.24).$$

S obzirom da je:

$$B_{\vec{k}}B^+_{\vec{k}} = N_{\vec{k}}+1$$

na osnovu izraza (I 4.24) sledi:

$$A = N_{\vec{k}}+1 \qquad (\mathrm{I}\ 4.25).$$

Iz (I 4.13) dobija se:

$$A+B=1 \; ; \; C=-B \; ; \; A-C=1$$

pa je:

$$N_{\vec{k}}+1-C=1 \longrightarrow C=N_{\vec{k}} \qquad (\mathrm{I}\ 4.26).$$

Konačno ako se ove vrednosti za konstante A i C uvrste u Grinovu funkciju (I 4.20) dobija se:

$$N_{\vec{k}} = \frac{\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})-\omega(\vec{k})}{2\omega(\vec{k})} \qquad (\mathrm{I}\ 4.27)$$

i

$$G^R(E,\vec{K})=\frac{1}{2\pi}\,\frac{N_{\vec{K}}+1}{E-\omega(\vec{K})+i\delta}-\frac{1}{2\pi}\,\frac{N_{\vec{K}}}{E+\omega(\vec{K})+i\delta} \qquad (I\ 4.28).$$

Iz relacije (I 4.27)vidimo da je okupacioni broj nadkondenzatnih eksitona $N_{\vec{K}}$ različit od nule i na apsolutnoj nuli (a na osnovu relacije:
$N_{\vec{K}}=\frac{1}{\exp(E(\vec{K})/KT)-1}$ za $T=0$ sledi $N_{\vec{K}}=0$), što je posledica procesa radjanja para eksitona iz kondenzata.

Grinovu funkciju $G^R(E,\vec{K})$ datu relacijom (I 4.28)koristićemo u II glavi pri izračunavanju tenzora dielektrične susceptibilnost.

II 1. Optičke osobine eksitonskog kondenzata

U dosadašnjem izlaganju pokazano je koji se uslovi moraju ispuniti da bi u sistemu eksitona došlo do pojave Boze kondenzacije. Sada se mogu, na osnovu toga što je odredjena retardovana funkcija Grina, odrediti optičke osobine kondenzata, tj. može se odrediti dielektrična konstanta, odnosno susceptibilnost za molekulske kristale, koje i definišu optičke karakteristike kondenzata, što je ustvari i zadatak ovog rada.

Dakle, u ovom delu rada tražićemo tenzor električne susceptibilnosti eksitonskog kondenzata, koji je preko izraza: $\varepsilon_{ij}=\delta_{ij}+4\pi\chi_{ij}$ povezan sa tenzorom dielektrične konstante. Prema tome za odredjivanje optičkih osobina kondenzata dovoljno je odrediti susceptibilnost χ_{ij}.

Pri optičkom pobudjivanju molekulskog kristala, kao što je rečeno u prvom delu ovog rada, energetski prelazi molekula se vrše samo izmedju dva stanja (i to izmedju osnovnog stanja (0) i jednog pobudjenog stanja (f)).

$$0\rightarrow f$$

Ovde treba imati u vidu da usled toga što postoji interakcija izmedju eksitona i fotona, energija eksitona se ne može računati od dna eksitonske zone, (već od osnovnog nivoa molekula, tj. u izrazu (I 4.28) se zamenjuje E sa:

$$E+\Delta=\Omega \qquad (\text{II } 1.1).$$

Na osnovu izraza (B.18 iz dodatka) može se uspostaviti veza izmedju polarizacije i retardovane Grnove funkcije eksitona (I 4.28):

$$\langle \vec{P}_{\vec{n}}(\vec{Q},\omega)\rangle=-\frac{\vec{d}(\vec{E}\vec{d})\,\omega_f}{2v\Omega}\left[G^R(\vec{Q},\Omega)-G^R_+(-\vec{Q},-\Omega)\right] \qquad (\text{II } 1.2),$$

gde je:

$\vec{P}_{\vec{n}}$ -vektor električne polarizacije;

v -zapremina elementarne ćelije;

$\vec{Q}$ -impuls;

Ω -energija fotona;

ω_f-energija unutar molekulskog prelaza;

$\vec{d}$ -dipolni moment prelaza u molekulu.

Grinove funkcije $G^R(\vec{Q},\Omega)$ i $G^R_+(-\vec{Q},-\Omega)$ predstavljaju Furije komponente funkcija definisanih sledećim relacijama:

$$\left.\begin{aligned} G^R(\vec{a},t-\tau) &= -i\,\Theta(t-\tau)\langle[B(\vec{a},t),B^+(\vec{a},\tau)]\rangle \\ G_+^R(\vec{a},t-\tau) &= -i\,\Theta(t-\tau)\langle[B^+(\vec{a},t),B(\vec{a},\tau)]\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (\text{II } 1.3).$$

Konačan oblik jednačine koja pokazuje zavisnost vektora električne polarizacije od Grinovih funkcija $G^R(\vec{a},\Omega)$ i $G_+^R(\vec{a},\Omega)$ dat je u dodatku:Na osnovu vektora polarizacije može se odrediti tenzor električne susceptibilnosti,imajući u vidu da možemo pisati:

$$P_i(\omega,\vec{k}) = \chi_{ij}^{\perp}(\omega,\vec{k})\,E_j^{\perp}(\omega,\vec{k}) \qquad (\text{II } 1.4),$$

a time i dielektrična konstanta:

$$\varepsilon_{ij}^{\perp} - \delta_{ij} = 4\pi\,\chi_{ij}^{\perp}(\omega,\vec{k})$$

Oznake $E_j^{\perp},\varepsilon_{ij}^{\perp},\chi_{ij}^{\perp}$ -označavaju transverzalne komponente jačine električnog polja,dielektrične konstante i susceptibilnosti.Ovde su od interesa samo transverzalne komponente tih veličina zbog toga što svetlost koja vrši pobudjivanje molekulskih kristala (dakle inicijator je pojave eksitona)je transverzalne prirode.

Iz jednačina (II 1.2) i (II 1.4) sledi da je:

$$\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{a}) = -\frac{d^i d^j \omega f}{V\Omega}\left[G^R(\vec{a},\Omega) - G_+^R(-\vec{a},-\Omega)\right] \qquad (\text{II } 1.5).$$

Da bi na osnovu poslednje relacije odredili tenzor električne susceptibilnosti χ_{ij} moramo odrediti Grinovu funkciju $G_+^R(-\vec{a},-\Omega)$,dok je Grinova funkcija $G^R(\vec{a},\Omega)$ data relacijom (I 4.28).Za nalaženje retardovane Grinove funkcije $G_+^R(-\vec{a},-\Omega)$ polazimo od prve jednačine iz sistema (I 4.2),koja daje:

$$E\langle\langle B_{\vec{k}}^+ | B_{\vec{k}}\rangle\rangle = -\frac{i}{2\pi} - \langle\langle B_{\vec{k}}^+ | [B_{\vec{k}},H]\rangle\rangle \qquad (\text{II } 1.6).$$

Komutator u Grinovoj funkciji sa desne strane jednačine (II 1.6) je dat sa izrazom (I 4.3)tj.

$$[B_{\vec{k}},H] = [\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]B_{\vec{k}} + \beta(\vec{k})\,B_{-\vec{k}}$$

znači da će (II 1.6) dobiti oblik:

$$E\langle\langle B_{\vec{k}}^+ | B_{\vec{k}}\rangle\rangle = -\frac{i}{2\pi} - [\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B_{\vec{k}}^+ | B_{\vec{k}}\rangle\rangle -$$

$$-\beta(\vec{k})\langle\langle B^{+}_{\vec{k}}|B^{+}_{-\vec{k}}\rangle\rangle \qquad (\mathrm{II}\ 1.7),$$

odnosno:

$$[E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B^{+}_{\vec{k}}|B_{\vec{k}}\rangle\rangle=-\frac{i}{2\pi}-\beta(\vec{k})\langle\langle B^{+}_{\vec{k}}|B^{+}_{-\vec{k}}\rangle\rangle \qquad (\mathrm{II}\ 1.8).$$

Ako iskoristimo osobinu da je:

$$\langle\langle B^{+}_{\vec{k}}|B^{+}_{-\vec{k}}\rangle\rangle=\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle$$

pomoću izraza (II 1.8) i druge jednačine iz sistema (I 4.5), koja glasi:

$$\langle\langle B^{+}_{-\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle[E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]=-\beta(\vec{k})\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle$$

može se napisati:

$$[E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]\langle\langle B^{+}_{\vec{k}}|B_{\vec{k}}\rangle\rangle=-\frac{i}{2\pi}+\beta^{2}(\vec{k})\times$$

$$\times\frac{1}{E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle \qquad (\mathrm{II}\ 1.9),$$

odnosno:

$$\langle\langle B^{+}_{\vec{k}}|B_{\vec{k}}\rangle\rangle=-\frac{i}{2\pi}\,\frac{1}{E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}+\frac{\beta^{2}(\vec{k})}{[E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]^{2}}\times$$

$$\times\langle\langle B_{\vec{k}}|B^{+}_{\vec{k}}\rangle\rangle \qquad (\mathrm{II}\ 1.10).$$

Ako sada poslednju relaciju (II 1.10) pomnožimo sa $(-i)$ dobija se:

$$G^{R}_{+}(E,\vec{k})=-\frac{1}{2\pi[E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]}+\frac{\beta^{2}(\vec{k})}{[E+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]^{2}}\times$$

$$\times G^{R}(E,\vec{k}) \qquad (\mathrm{II}\ 1.11).$$

Sama retardovana funkcija Grina $G^{R}(E,\vec{k})$,kao što je već spomenuto,data je izrazom (I 4.28),tj.

$$G^{R}(E,\vec{k})=\frac{1}{2\pi}\,\frac{N_{\vec{k}}+1}{E-\omega(\vec{k})+i\delta}-\frac{1}{2\pi}\,\frac{N_{\vec{k}}}{E+\omega(\vec{k})+i\delta}$$

gde je: $\delta\ll E$.

Kao što smo na početku ovog paragrafa rekli, energetski nivoi se moraju računati od osnovnog stanja molekula, a ne od dna eksitonske zone. Znači da se u zadnjem izrazu mora izvršiti smena (II 1.1) ($E \longrightarrow \Omega$):

$E=\Omega-\Delta$; tj. energija eksitona će sada biti:

$$E(\vec{k})=\Delta+\omega(\vec{k})=E_0+\omega(\vec{k}) \; ;$$

prema tome:

$$G^R_+(\Omega,\vec{k})=-\frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{\Omega-\Delta+d(\vec{k})+\beta(\vec{k})}-\frac{\beta^2(\vec{k})}{[\Omega-\Delta+d(\vec{k})+\beta(\vec{k})]^2}\times$$

$$\times G^R(\Omega,\vec{k}) \qquad \text{(II 1.12)}$$

i, u skladu sa (I 4.28):

$$G^R(\Omega,\vec{k})=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{N_{\vec{k}}+1}{\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})+i\delta}-\frac{N_{\vec{k}}}{\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})+i\delta}\right).$$

Sada je potrebno oceniti Grinovu funkciju $G^R_+(-\Omega,-\vec{k})$ u odnosu na $G^R(\Omega,\vec{k})$ i to u oblasti eksiton-fotonske rezonanse, tj. za slučaj kada je:

$\Omega=\Delta+\omega(\vec{k})$, gde je:

Ω - energija fotona.

Ako sa Δ označimo energiju prelaza izmedju osnovnog stanja (0) i stanja (f) molekula, ta energija prelaza je reda nekoliko (eV), tj. energija prelaza ima vrednost od oko $\Delta \approx 3-5$ eV. Sa $\omega(\vec{k})$ obeležena je energetska širina pobudjenog nivoa (širina eksitonske zone) i njena vrednost je: $\max|\omega(\vec{k})| \approx 0{,}1-0{,}01$ eV, a iz ovoga se može izvući zaključak da je:

$$\Delta \gg \omega(\vec{k}) \; ; \; \text{dakle} \; \Omega \approx \Delta \qquad \text{(II 1.13).}$$

Pre nego što se konačno napiše izraz za $G^R_+(-\Omega,-\vec{k})$ treba napomenuti da su funkcije $d(\vec{k})$ i $\beta(\vec{k})$ parne tj:

$$d(\vec{k})=d(-\vec{k}) \quad \text{i} \quad \beta(\vec{k})=\beta(-\vec{k})$$

dakle:

$$G^R_+(-\Omega,-\vec{k})=-\frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{-\Omega-\Delta+d(\vec{k})+\beta(\vec{k})}+\beta^2(\vec{k})\times$$

$$\times\frac{1}{[-\Omega-\Delta+d(\vec{k})+\beta(\vec{k})]^2}\,G^R(-\Omega,-\vec{k}) \qquad \text{(II 1.14).}$$

Ako se sada iskoristi izraz: (II 1.13) dobija se:

$$G_{+}^{R}(-\Omega,-\vec{k})=-\frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{-2\Delta+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}+\beta^{2}(\vec{k})\times$$

$$\times\frac{1}{[-2\Delta+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})]^{2}}G^{R}(-\Omega,-\vec{k}) \qquad (\text{II } 1.15),$$

tj.konačno je:

$$G_{+}^{R}(-\Omega,-\vec{k})\approx-\frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{-2\Delta+\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})}+\beta^{2}(\vec{k})\times$$

$$\times\frac{1}{4\Delta^{2}}G^{R}(-\Omega,-\vec{k}) \qquad (\text{II } 1.16).$$

Ovaj izraz ostaje konačan kada je $\Omega\rightarrow\Delta+\omega(\vec{k})$ i tada se ima da je:

$$G_{+}^{R}(-\Omega,-\vec{k})\approx\frac{1}{2\Delta}\approx\frac{1}{10}\,[eV]^{-1},$$

pa prema tome iz uslova $\Omega\rightarrow\Delta+\omega(\vec{k})$ sledi da je:

$$G_{+}^{R}(-\Omega,-\vec{k})\ll G^{R}(\Omega,\vec{k}) \qquad (\text{II } 1.17),$$

jer $G^{R}(\Omega,\vec{k})$ za $\Omega=\Delta+\omega(\vec{k})$ ima rezonantni član.

U izrazu za električnu susceptibilnost (II 1.15) se sada može zanemariti drugi sabirak u velikoj zagradi (na osnovu (II 1.17)) .Dakle za susceptibilnost u oblasti eksiton-fotonske rezonance dobija se:

$$\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})\approx-\frac{d^{i}d^{j}\Delta}{v\Omega\hbar}G^{R}(\Omega,\vec{k}) \qquad (\text{II } 1.18),$$

zamenom (I 4.28),konačno imamo da je:

$$\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})\approx-\frac{d^{i}d^{j}\Delta}{2\pi v\Omega\hbar}\left\{\frac{N_{\vec{k}}+1}{\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})+i\delta}-\right.$$

$$\left.-\frac{N_{\vec{k}}}{\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})+i\delta}\right\} \qquad (\text{II } 1.19).$$

Tako smo odredili tenzor električne susceptibilnosti i kao što se može videti on je kompleksan.S obzirom da realni deo tenzora $\chi_{ij}^{\perp}$ odredjuje disperziju elektromagnetnih talasa u kristalu,a imaginarni apsorciju elektromagnetnih talasa,mi ćemo iz izraza (II 1. 19)odrediti realni i imaginarni deo tenzora $\chi_{ij}^{\perp}$

Da bi se električna susceptibilnost $\chi_{ij}^{\perp}$ mogla rastaviti,tj. da bi se odvojio realan i imaginarni deo koristićemo već spomenutu relaciju (26. 16) iz[6],koja glasi:

$$\frac{f(x)}{x-a\pm i\delta}=\mathcal{P}\frac{f(x)}{x-a}\mp i\pi\,\delta(x-a)\,f(x)$$

Dobijena jednačina za električnu susceptibilnost (II 1.19) je upravo ovog oblika, te se gornji izraz može direktno primeniti za dobijanje imaginarnog i realnog dela tenzora električne susceptibilnosti. Iz (II 1.19) za imaginarni deo električne susceptibilnosti dobija se:

$$\operatorname{Im}\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})=-\pi\left(-\frac{d^i d^j\Delta}{2\pi v\Omega\hbar}\right)\Big\{(N_{\vec{k}}+1)\,\delta[\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})]-$$
$$-N_{\vec{k}}\,\delta[\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})]\Big\};$$

odnosno:

$$\operatorname{Im}\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})=\frac{d^i d^j\Delta}{2v\Omega\hbar}\Big\{(N_{\vec{k}}+1)\,\delta[\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})]-$$
$$-N_{\vec{k}}\,\delta[\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})]\Big\} \qquad (\text{II } 1.20).$$

Za realni deo električne susceptibilnosti iz gornjeg izraza (II 1.19)se dobija:

$$\operatorname{Re}\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})=-\frac{d^i d^j\Delta}{2\pi v\Omega\hbar}\left\{\frac{N_{\vec{k}}+1}{\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})}-\frac{N_{\vec{k}}}{\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})}\right\} \qquad (\text{II } 1.21).$$

Sada ćemo uvesti nove oznake:

$$\Omega_1=\Delta+\omega(\vec{k})\;;\;\Omega_2=\Delta-\omega(\vec{k}) \qquad (\text{II } 1.22),$$

gde Ω_1 i Ω_2 predstavljaju energiju fotona. Ukoliko se (II 1.22) uvrsti u izraze za realni i imaginarni deo električne susceptibilnosti dobija se:

$$\left.\begin{aligned}\operatorname{Im}\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})&=\frac{d^i d^j\Delta}{2v\Omega\hbar}\Big\{(N_{\vec{k}}+1)\,\delta(\Omega-\Omega_1)-N_{\vec{k}}\,\delta(\Omega-\Omega_2)\Big\}\\ \operatorname{Re}\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})&=-\frac{d^i d^j\Delta}{2\pi v\Omega\hbar}\left\{\frac{N_{\vec{k}}+1}{\Omega-\Omega_1}-\frac{N_{\vec{k}}}{\Omega-\Omega_2}\right\}\end{aligned}\right\} \qquad (\text{II } 1.23).$$

Sada ćemo analizirati dobijene rezultate.

1.)Prvo ćemo posmatrati imaginarni deo električne susceptibilnosti $\operatorname{Im}\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{k})$,koji nam odredjuje apsorpciju elektromagnetnih talasa, tj.

$$\mathrm{Im}\,\chi^{\perp}_{ij}=\frac{d^i d^j \Delta}{2 V \Omega \hbar}\Big\{(N_{\vec{k}}+1)\,\delta[\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})]-$$

$$-N_{\vec{k}}\,\delta[\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})]\Big\}$$

a) Prvi sabirak u gornjem izrazu, tj. izraz:

$$\frac{d^i d^j \Delta}{2 V \Omega \hbar}(N_{\vec{k}}+1)\,\delta[\Omega-\Delta-\omega(\vec{k})] \qquad (\text{II } 1.24),$$

pokazuje apsorpciju i to pozitivnu apsorpciju fotona (svetlosti) od strane molekula kristala, tj. ovaj deo tenzora električne susceptibilnosti pokazuje kreaciju eksitona sa energijom

$$\Omega_1=\Delta+\omega(\vec{k}) \;;\; \Delta=E_0,$$

na račun anihilacije fotona iste energije i impulsa. Da je ovaj proces proporcionalan faktoru $N_{\vec{k}}+1$, možemo se lako uveriti ako posmatramo verovatnoću prelaza sistema eksitona iz početnog stanja sa $N_{\vec{k}}$ eksitona u konačno stanje sa $N_{\vec{k}}+1$ eksitonom:

$$W_{if}\approx|\langle f|H_{int}|i\rangle|^2\,\delta(E-E_f+E_i)$$

U ovom slučaju inicijalno stanje je $|i\rangle=|N_{\vec{k}}\rangle$, a konačno stanje, je stanje $|f\rangle=|N_{\vec{k}}+1\rangle$. Hamiltonijan interakcije, koji prebacuje sistem iz jednog u drugo stanje može se napisati kao (dipolni prelaz):

$$H_{int}=aB^+_{\vec{k}}+bB_{\vec{k}}$$

i tada je:

$$|\langle f|B^+_{\vec{k}}|i\rangle|^2\,\delta(E-E_f+E_i)\sim(N_{\vec{k}}+1)\,\delta(E-E_f+E_i),$$

što je u saglasnosti sa (II 1.24).

Potrebno je da se još jednom naglasi, da je $N_{\vec{k}}\neq 0$ i kada je apsolutna temperatura $T=0$ i to zbog procesa radjanja nadkondenzatnih eksitona iz kondenzata i $N_{\vec{k}}$ je dato izrazom (I 4.27)

$$N_{\vec{k}}=\frac{1}{2\,\omega(\vec{k})}[\alpha(\vec{k})+\beta(\vec{k})-\omega(\vec{k})]$$

b) Posmatrajmo sada drugi sabirak iz izraza za imaginarni deo električne susceptibilnosti, koji je gore dat, tj.

$$-\frac{d^i d^j \Delta}{2 V \Omega \hbar}N_{\vec{k}}\,\delta[\Omega-\Delta+\omega(\vec{k})]$$

Ovaj deo električne susceptibilnosti takodje pokazuje apsorpciju, ali zbog predznaka (—), to je negativna apsorpcija, dakle on pokazuje stimulisanu emisiju svetlosti od strane eksitonskog kondenzata.

Ova stimulisana emisija se može objasniti upravo postojanjem interakcije, usled koje se u kristalu iz dva kondenzatna radjaju dva nadkondenzatna eksitona, od kojih se jedan eksiton emituje kao foton (stimulisana emisija), dok drugi eksiton ostaje u kristalu, kao nadkondenzatni eksiton. Dva nadkondenzatna eksitona koja nastaju u ovom procesu su suprotnih impulsa tj:

$\vec{K}+(-\vec{K})=0$ (zakon održanja impulsa), a zakon održanja energije daje:

$$2\Delta=\Delta+\omega(-\vec{K})+\Delta-\omega(\vec{K})$$

gde je:

$\Delta+\omega(-\vec{K})$ -energija nadkondenzatnih eksitona; a

$\Omega_2=\Delta-\omega(\vec{K})$ -energija emitovanog fotona.

Prema tome kompletni imaginarni deo električne susceptibilnosti pokazuje apsorpciju svetlosti i to pozitivnu apsorpciju na frekvenciji:

$$\Omega_1=\Delta+\omega(\vec{K}),$$

a drugi, negativnu apsorpciju (stimulisanu emisiju) na frekvenciji:

$$\Omega_2=\Delta-\omega(\vec{K}).$$

Rastojanje izmedju ove dve linije (apsorpcije i emisije) je:

$$\Omega_1-\Omega_2=2\,\omega(\vec{K}).$$

Ranije je pokazano da je $\omega(\vec{K})\ll\Delta=E_0$, odnosno $2\omega(\vec{K})\ll\Delta$, što ukazuje da su linije apsorpcije i emisije energetski veoma bliske, a to otežava njihovo zapažanje kao dve odvojene linije.

Potrebno je još napomenuti da u slučaju kada je $N_{\vec{K}}=0$ (na $T=0$) ne može doći do stimulisane emisije svetlosti, tj. procesi interakcije kondenzatnih i nadkondenzatnih eksitona imaju odlučujuću ulogu u stimulisanoj emisiji.

2.) Ako posmatramo realni deo tenzora električne susceptibilnosti , tj:

$$Re\,\chi_{ij}^{\perp}(\Omega,\vec{K})=-\frac{d^i d^j\Delta}{2\pi v\Omega\hbar}\left\{\frac{N_{\vec{K}}+1}{\Omega-\Omega_1}-\frac{N_{\vec{K}}}{\Omega-\Omega_2}\right\},$$

koji nam daje disperziju elektromagnetnih talasa u kristalu, vidimo da on ima rezonance na frekvencijama apsorpcije (Ω_1) i emisije (Ω_2). Sličan rezultat se dobija i u slučaju kada u sistemu eksitona ne postoji kondenzat (monografija [1] glava IV §3), samo što u tom slučaju nemamo stimulisanu emisiju. Zbog toga nećemo detaljnije analizirati ovaj deo tenzora $\chi_{ij}^{\perp}$.

Na kraju ove glave možemo zaključiti da se optičke karakteristike eksitonskog kondenzata bitno razlikuju od karakteristika sistema bez kondenzata, upravo zbog postojanja stimulisane emisije svetlosti.

ZAKLJUČAK

Osnovni rezultati ovog rada sastoje se u sledećem:

a) U prvoj glavi odredjena je Grinova funkcija eksitona u uslovima Boze kondenzacije i pomoću nje dobijen je spektar Bogoljubova kao i okupacioni broj $N_{\vec{k}}$ nadkondenzatnih eksitona na apsolutnoj temperaturi $T=0$.

b) Koristeći vezu izmedju Grinove funkcije eksitona i tenzora električne susceptibilnosti (odnosno dielektrične konstante) izračunat je tenzor električne susceptibilnosti molekulskih kristala u uslovima Boze kondenzacije u sistemu eksitona.

Analizirajući imaginarni deo tenzora električne susceptibilnosti $\chi_{ij}^{\perp}$,koji nam opisuje apsorpciju elektromagnetnih talasa u kristalu došlo se do zaključka da u eksitonskom kondenzatu dolazi do pojave negativne apsorpcije,odnosno do pojave stimulisane emisije svetlosti.Ova činjenica je svakako najinteresantniji rezultat ovog rada i pored praktične primene mogla bi se iskoristiti za eksperimentalno dokazivanje postojanja kondenzata u sistemu Frenkelovih eksitona.Naime i pored mnogobrojnih teorijskih radova u vezi sa problemom Boze kondenzacije u sistemu Frenkelovih eksitona do sada još nisu pronadjeni i pouzdani eksperimentalni dokazi.

DODATAK

A. Dvovremenska temperaturska Grinova funkcija

S obzirom da u literaturi postoji više (sličnih) definicija Grinovih funkcija mi ćemo se u ovom dodatku zadržati samo na retardovanoj dvovremenskoj temperaturskoj Grinovoj funkciji (prema [6]), koja nam je potrebna u ovom diplomskom radu.

Retardovana dvovremenska temperaturska Grinova funkcija definiše se relacijom:

$$G^R_{AB}(\vec{r},\vec{r}',t,t') \equiv \langle\langle A(\vec{r},t) | B(\vec{r}',t')\rangle\rangle =$$

$$= \Theta(t-t')\,\langle[A(\vec{r},t);B(\vec{r}',t')]\rangle \qquad (A.1),$$

gde je:

$\Theta(t-t')$ -stepenasta (tzv. Hevisajdova) funkcija;

Ova funkcija je data sa:

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 \;; & t>t' \\ 0 \;; & t<t' \end{cases} \qquad (A.2),$$

$[A;B]$ -predstavlja komutator operatora A i B ; a

$\langle\ \rangle$ -predstavlja statističku srednju vrednost po kanonskom ansamblu; tj.

$$\langle A\rangle = \frac{Sp\, e^{-\beta H}A}{Sp\, e^{-\beta H}} \;; \quad \beta = \frac{1}{K_B T} \qquad (A.3).$$

Napomenimo da izvod stepenaste funkcije daje kao rezultat δ-funkciju, tj:

$$\frac{d}{dt}\Theta(t-t') = \begin{cases} 0 \;; & t<t' \\ \infty \;; & t=t' \\ 0 \;; & t>t' \end{cases} \qquad (A.4).$$

Ove osobine $\Theta(t-t')$ funkcije, kao i već dobro poznate osobine $\delta(t-t')$ funkcije koristiće se u daljem radu.

Sada ćemo izvesti jednačinu koja zadovoljava retardovana Grinova funkcija (tzv. jednačinu kretanja). U tom cilju tražićemo izvod izraza (A.1) po vremenu t ,pošto smo predhodno levu i desnu stranu istog izraza proširili imaginarnom jedinicom.

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(\vec{r},t)|B(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[A(\vec{r},t);B(\vec{r}',t')]\rangle +$$

$$+i\Theta(t-t')\langle[\dot{A}(\vec{r},t);B(\vec{r}',t')]\rangle \quad (A.5).$$

Ako iskoristimo Hajzenbergovu jednačinu kretanja,koja je:

$$i\dot{A}(\vec{r},t) = [A,H]_t \quad (A.6),$$

dobijamo:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(\vec{r},t)|B(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[A(\vec{r},t);B(\vec{r}',t')]\rangle +$$

$$+\Theta(t-t')\langle[[A(\vec{r},t);H];B(\vec{r}',t')]\rangle ;$$

odnosno:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(\vec{r},t)|B(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[A(\vec{r},t);B(\vec{r}',t')]\rangle +$$

$$+\langle\langle[A(\vec{r},t);H]|B(\vec{r}',t')\rangle\rangle \quad (A.7).$$

Svaki od članova gornjeg izraza se može predstaviti preko Furije lika:

$$\langle\langle A(\vec{r},t)|B(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \int d^3k\, dE \langle\langle A|B\rangle\rangle_{\vec{k}E}\, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')-iE(t-t')}$$

$$\langle[A(\vec{r},t);B(\vec{r}',t')]\rangle = \int d^3k\, \mathcal{K}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (A.8).$$

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int dE\, e^{-iE(t-t')}$$

Uvodjenjem ovih smena u (A.7)dobija se konačan oblik jednačine za Furije lik retardovane Grinove funkcije

$$\tilde{G}^{R}_{AB}(E,\vec{k}) \equiv \langle\langle A|B\rangle\rangle_{E,\vec{k}}$$

i to u obliku:

$$E\langle\langle A|B\rangle\rangle_{\vec{k},E} = \frac{i}{2\pi}\mathcal{K}(\vec{k}) + \langle\langle [A;H]|B\rangle\rangle_{\vec{k},E} \qquad (A.9).$$

Realan deo pola Grinove funkcije predstavlja energiju interakcije, dok imaginaran deo pola daje recipročnu vrednost vremena života.

Sličan oblik jednačine za retardovanu funkciju Grina se dobija i ukoliko se izraz (A.1)diferencira po vremenu t' .

Pomoću jednačine (A.9)odredjena je, retardovana Grinova funkcija $\tilde{G}^{R}_{AB}(E,\vec{k})$,u suštini, preko jednog beskonačnog niza jednačina, jer komutator sa desne strane jednačine predstavlja obično retardovanu Grinovu funkciju višeg reda (jednočestična Grinova funkcija se izražava preko dvočestične, ova preko tročestične itd.). Taj niz jednačina prekida se u zavisnosti od tačnosti sa kojom želimo raditi i u zavisnosti od konkretnog fizičkog problema.

Za odredjivanje srednjih vrednosti proizvoda operatora pogodno je koristiti tzv. spektralnu intenzivnost.

Spektralna intenzivnost I_{AB} može se definisati na sledeći način. Ako posmatramo vremensku korelacionu funkciju:

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)\, B(t')\rangle \qquad (A.10),$$

koja u suštini predstavlja statističku srednju vrednost proizvoda operatora A i B , lako se može videti da važe sledeće relacije:

$$\langle B(t')\, A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}\, d\omega \qquad (A.11)$$

i

$$\langle A(t)\, B(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega)\, e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')}\, d\omega \qquad (A.12),$$

gde:

$I_{AB}(\omega)$ -predstavlja spektralnu intenzivnost, koja je data jednačinom:

$$I_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{\mu\nu} (\rho^{*}_{\nu}, B(0)\rho_{\mu})(\rho^{*}_{\mu}, A(0)\rho_{\nu})\, e^{-\mathcal{E}_{\nu}\beta} \times$$

$$\times\, \delta(\mathcal{E}_{\nu} - \mathcal{E}_{\mu} - \omega) \qquad (A.13).$$

U poslednjoj jednačini φ_ν i φ_μ predstavljaju svojstvene funkcije i svojstvene vrednosti hamiltonijana sistema, tj:

$$H\varphi_\nu = \mathcal{E}_\nu \varphi_\nu \qquad (A.14).$$

Iz jednačina (A.11) i (A.12) za $t=t'=0$ dobijamo obične srednje vrednosti proizvoda operatora preko spektralne intenzivnosti:

$$\langle B(0)A(0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega)\, d\omega \qquad (A.15)$$

i

$$\langle A(0)B(0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega)\, e^{\omega\beta} d\omega \qquad (A.16).$$

Sada ćemo izraziti retardovanu funkciju Grina $\tilde{G}^R(t)$ preko spektralne intenzivnosti, da bi se pomoću te relacije mogla odrediti sama spektralna intenzivnost.

Polazimo od retardovane Grinove funkcije:

$$\tilde{G}^R_{AB}(t) = \Theta(t)\langle [A(t), B(0)]\rangle = \Theta(t)\{\langle A(t)\, B(0)\rangle -$$

$$-\langle B(0)\, A(t)\rangle\} \qquad (A.17).$$

Na osnovu relacija (A.11) i (A.12) dobija se:

$$\tilde{G}^R_{AB}(t) = \Theta(t)\int_{-\infty}^{\infty}(1-e^{-\beta\omega'})\, I_{AB}(\omega')\, e^{-i\omega' t}\,\frac{d\omega'}{2\pi} \qquad (A.18).$$

Ako iskoristimo sledeću reprezentaciju $\Theta(t)$ funkcije:

$$\Theta(t) = \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon t'}\delta(t')dt' = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\,\frac{e^{-iEt}}{E+i\varepsilon}, \quad \varepsilon \to +0$$

i u jednačini (A.18) predjemo na Furije lik retardovane Grinove funkcije, dobijamo:

$$\tilde{G}^R_{AB}(\omega) = i\int_{-\infty}^{\infty}(e^{-\beta\omega'}-1)\,\frac{I_{AB}}{\omega-\omega'+i\delta}\,\frac{d\omega'}{2\pi} \qquad (A.19).$$

Sada se može odrediti realan i imaginaran deo Grinove funkcije, pomoću relacije (26.16 iz [6]). Ovde je od interesa samo realan deo Grinove funkcije, to zbog toga jer nam on omogućuje direktno odredjivanje spektralne intenzivnosti $I_{AB}(\omega)$. Ovaj realan deo retardovane Grinove funkcije iznosi:

$$\mathrm{Re}\,\tilde{G}^R_{AB}=\frac{-i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{-\beta\omega'}-1)\,I_{AB}\,i\pi\delta(\omega-\omega')=$$

$$=\frac{1}{2}(e^{-\beta\omega}-1)\,I_{AB}(\omega) \qquad (A.20),$$

odavde je:

$$I_{AB}=\frac{2\,\mathrm{Re}\,\tilde{G}^R_{AB}}{e^{-\beta\omega}-1}\;;\quad \text{kada je } \omega\neq 0 \qquad (A.21).$$

Za slučaj kada se posmatrani sistem nalazi na apsolutnoj nuli ($T=0$), tada $\beta\to\infty$, a $e^{-\beta\omega}\to 0$ i spektralna intenzivnost dobija jednostavniji oblik:

$$I_{AB}=-2\,\mathrm{Re}\,\tilde{G}^R_{AB} \qquad (A.22).$$

U ovom diplomskom radu korišćena je retardovana Grinova funkcija u obliku (pomnožena sa $-i$):

$$G^R(t)=-i\,\tilde{G}^R(t)\;,\; tj.$$

$$G^R_{AB}(t)=-i\,\Theta(t)\langle[A(t),B(0)]\rangle \qquad (A.23).$$

Veza izmedju ove retardovane funkcije Grina i spektralne intenzivnosti $I_{AB}(\omega)$ nalazi se na isti način kao i za prethodnu funkciju, stim što je sada za nas od interesa imaginarni deo Grinove funkcije, jer nam za ovu retardovanu Grinovu funkciju $G^R_{AB}(\omega)$ omogućava direktno odredjivanje spektralne intenzivnosti $I_{AB}(\omega)$ .Spektralna intenzivnost se sada dobija kao

$$I_{AB}(\omega)=-\frac{2}{1-e^{-\beta\omega}}\,\mathrm{Jm}\,G^R_{AB}(\omega)\;,\; \text{kada je } \omega\neq 0 \qquad (A.24).$$

odnosno na apsolutnoj nuli ($T=0$)isti izraz se uprošćava

$$I_{AB}=-2\,\mathrm{Jm}\,G^R_{AB}(\omega) \qquad (A.25).$$

B.Tenzor dielektrične konstante i retardovana Grinova funkcija eksitona

U ovom dodatku ukratko ćemo izložiti način na koji se povezuje tenzor dielektrične konstante $\varepsilon^{\perp}_{ij}$ sa retardovanom Grinovom funkcijom eksitona, s obzirom da smo tu vezu koristili u II glavi ovog rada.

Ako se kristal nalazi pod dejstvom transverzalnih elektromagnetnih talasa, čija je jačina električnog polja data relacijom:

$$\left.\begin{aligned}&\vec{E}(\vec{r},t)=\frac{1}{2}\vec{E}_0\exp(i[\vec{Q}\vec{r}-\omega t)+k.e.\\&(\vec{E}_0\vec{Q})=0\end{aligned}\right\}\qquad(B.1).$$

kao što je pokazano u ([8])moguće je tada, zbog relacije

$$\vec{D}\cdot\vec{Q}=0,$$

definisati transverzalni tenzor dielektrične konstante

$$D_i=\varepsilon_{ij}^{\perp}E_j,$$

odnosno preko električne polarizacije:

$$\langle\vec{P}(\vec{r},t)\rangle=\frac{1}{2}\left\{\frac{\varepsilon_{ij}^{\perp}(\omega,\vec{Q})-1}{4\pi}\vec{E}_0\exp(i[\vec{Q}\vec{r}-\omega t])+h.e.\right\}\qquad(B.2).$$

U poslednjem izrazu data je srednja vrednost električnog momenta koji se indukuje u kristalu pod dejstvom električnog polja (B.1).

Operator uzajamnog dejstva kristala sa poljem (B.1) u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik:

$$V(t)=-\frac{e}{mc}\sum_{\vec{n}}\left\{\vec{A}_0\exp(i[\vec{Q}(\vec{n}-\vec{r}_{\vec{n}})-\omega t])\vec{p}_{\vec{n}}+h.e\right\}\qquad(B.3),$$

gde je:

$\vec{A}_0=-\frac{ic}{2\omega}\vec{E}_0$ -amplituda vektorskog potencijala;

$\vec{r}_{\vec{n}}$ i $\vec{p}_{\vec{n}}$ -operatori koordinata i impulsa svih elektrona molekula u čvoru $\vec{n}$;

m i e -masa i naelektrisanje elektrona.

Sada ćemo operator (B.3) napisati u reprezentaciji druge kvantizacije, preko operatora kreacije i anihilacije eksitona. Uzmimo kao osnovno stanje $|0\rangle$ i samo jedno pobudjeno stanje molekula $|f\rangle$; tada možemo pisati (za dalje vidi [8] glava III):

$$V(t)=\mathcal{W}\exp(-i\omega t+\eta t)+h.e.\qquad(B.4),$$

gde je:

$$\begin{aligned}\mathcal{W}=\frac{ie\sqrt{N}}{2m\omega}\vec{E}_0\Big\{&\langle f|e^{i\vec{Q}\vec{r}_{\vec{n}}}\vec{p}_{\vec{n}}|0\rangle B^{+}(\vec{Q})+\\&+\langle 0|e^{i\vec{Q}\vec{r}_{\vec{n}}}\vec{p}_{\vec{n}}|f\rangle B(-\vec{Q})\Big\}\end{aligned}\qquad(B.5).$$

Da bi izbegli uticaj nelinearnih procesa, koji se javljaju u momentu uključivanja interakcije predpostavićemo da se interakcija (B.4) uključuje adijabatski u beskonačno prošlom vremenu. Zbog toga u izraz (B.4) uvodimo množitelj $\exp(\eta t)$ gde je η – mala pozitivna veličina.

U dugotalasnoj aproksimaciji ($\vec{q}\vec{a} \ll 1$)može se pisati:

$$\langle f | e^{i\vec{q}\vec{r}_{\bar{n}}} \vec{p}_{\bar{n}} | 0 \rangle = i m \omega_f \langle f | \vec{r}_{\bar{n}} | 0 \rangle ,$$

ω_f -učestanost unutar molekulskog prelaza, pri tome se operator (B.5)uprošćava:

$$\mathcal{W} = -\frac{\omega_f \sqrt{N}}{2\omega} (\vec{E}_o \vec{d}_f) [B^+(\vec{q}) - B(-\vec{q})] \qquad (B.6),$$

gde je:

$\vec{d}_f = e \langle f | \vec{r}_{\bar{n}} | 0 \rangle$ -dipolni električni moment prelaza u molekulu. Uzajamno dejstvo (B.4)dovodi do promene matrice gustine

$$\rho_o = \exp\{\beta[\Omega - \mathcal{H}]\}$$

i ta promena u reprezentaciji uzajamnog dejstva tada je jednačinom:

$$i \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)] \ , \ za \ \hbar = 1 \qquad (B.7),$$

pri početnim uslovima

$$[\tilde{\rho}(t)]_{t \to -\infty} = \rho_o .$$

Koristeći se Hajzembergovom reprezentacijom dobija se:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\rho}(t) &= e^{iHt} \rho(t) \, e^{-iHt} \\ \tilde{V}(t) &= \mathcal{W}(t) \exp(-i\omega t + \eta t) + h.e. \end{aligned} \right\} \qquad (B.8),$$

gde je:

$$\mathcal{W}(t) = -\frac{\omega_f}{2\omega} (\vec{E}_o \vec{d}_f) [B^+(\vec{q},t) - B(-\vec{q},t)] \qquad (B.9),$$

$$a \quad B(\vec{q},t) = e^{iHt} B(\vec{q}) \, e^{-iHt} \qquad (B.10).$$

Rešavanjem jednačine (B.7)nalazimo matricu gustine:

$$\tilde{\rho}(t)=\rho_0-i\int_{-\infty}^{t}[\tilde{V}(\tau),\rho_0]\,d\tau \qquad (B.11).$$

Pomoću matrice gustine (B.11)može se srednja vrednost operatora električnog momenta u čvoru„$\vec{n}$"kristala izraziti:

$$\langle\vec{P}(\vec{n},t)\rangle_f=Sp\left\{\tilde{\rho}(t)\,\vec{P}(\vec{n},t)\right\} \qquad (B.12),$$

gde je:

$$\vec{P}(\vec{n},t)=\frac{\vec{d}}{v\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}[B^+(-\vec{k},t)+B(\vec{k},t)]\,e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad (B.13).$$

Operator električnog momenta u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik:

$$\vec{p}\vec{n}=\frac{1}{v}\,e\vec{r}\vec{n}.$$

Koristeći izraze (B.11) i (B.13) i jednačinu (B.12) i uzimajući u obzir da je srednji specifični dipolni moment kristala (polarizacija),bez spoljnog polja,jednaka nuli,dobijamo posle usrednjavanja:

$$\langle\vec{P}(\vec{n},t)\rangle_f=\frac{i\vec{d}(\vec{E}\vec{d})\,\omega_f}{2v\omega}\int_{-\infty}^{t}\Big\{\langle[B(\vec{q},t),B^+(\vec{q},\tau)]\rangle-$$

$$-\langle[B^+(-\vec{q},t),B(-\vec{q},\tau)]\rangle\exp\{i[\vec{q}\vec{n}-$$

$$-\omega\tau]+\eta\tau\Big\}\,d\tau+h.e. \qquad (B.14),$$

gde je:

$$\langle[B(\vec{q},t),B^+(\vec{q},\tau)]\rangle\equiv Sp\left\{\rho_0[B(\vec{q},t),B^+(\vec{q},\tau)]\right\}.$$

Uvedemo li pod znak integrala stepenu funkciju:

$$\Theta(t-\tau)=\begin{cases}1\;;\;t>\tau\\0\;;\;t<\tau\end{cases},$$

gornja granica integraljenja može se zameniti sa beskonačnošću. Pri tome pod integralom stojaće izraz,koji se svodi na dvovremensku temperatursku retardovanu funkciju Grina za slučaj uzajamnog dejstva eksitona sa fononima.

$$\left.\begin{aligned} G_r(\vec{Q},t-\tau)&=-i\,\Theta(t-\tau)\langle[B(\vec{Q},t),B^+(\vec{Q},\tau)]\rangle \\ G_r^+(\vec{Q},t-\tau)&=-i\Theta(t-\tau)\langle[B^+(\vec{Q},t),B(\vec{Q},\tau)]\rangle \end{aligned}\right\} \quad (B.15).$$

Sada se može izraz (B.14)napisati kao:

$$\langle\vec{P}(\vec{n},t)\rangle_f=-\frac{\vec{d}(\vec{d}\vec{E}_0)}{2v\omega}\exp(i[\vec{Q}\cdot\vec{n}-\omega t])\times$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\{G_r(\vec{Q},\tau)-G_r^+(-\vec{Q},\tau)\}e^{i\omega\tau}d\tau+h.e. \quad (B.16).$$

Dalje se uvode Furije komponente vremenskih retardovanih funkcija Grina pomoću jednačine:

$$G_r(\vec{Q},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}G_r(\vec{Q},\tau)\,e^{i\omega\tau}d\tau \quad (B.17),$$

tako da konačno za srednju vrednost električne polarizacije, uslovljene uzajamnim dejstvom polja poprečnih elektromagnetnih talasa sa elektronima dobijamo:

$$\langle\vec{P}(\vec{n},t)\rangle_f=-\frac{\vec{d}(\vec{E}_0\vec{d})\,\omega_f}{2v\omega}[G_r(\vec{Q},\omega)-G_r^+(-\vec{Q},-\omega)]\times$$

$$\times e^{i(\vec{Q}\vec{n}-\omega t)}+h.e. \quad (B.18).$$

Formula (B.17)uzima u obzir samo jedno pobudjeno stanje molekula.Srednja apsolutna polarizacija kristala može se zapisati u obliku:

$$\langle\vec{P}(\vec{n},t)\rangle=\langle\vec{P}(\vec{n},t)\rangle_f+\frac{1}{2}\beta_0^{\perp}\vec{E}_0\,e^{i[\vec{Q}\vec{n}-\omega t]}+h.e. \quad (B.19),$$

gde je:

$\beta_0^{\perp}$ -tenzor koji uzima u obzir uticaj svih ostalih pobudjenih stanja molekula.

Sada se konačno može uspostaviti veza izmedju komponenata tenzora $\varepsilon^{\perp}(\omega,\vec{Q})$ i Furije komponenata vremenskih retardovanih funkcija Grina za eksitone,pri uzajamnom dejstvu sa fononima:

$$\varepsilon_{xy}^{\perp}-\delta_{xy}=4\pi\beta_{xy,0}^{\perp}-\frac{4\pi d^x d^y\,\omega_f}{v\omega}\{G_r(\vec{Q},\omega)-$$

$$-G_r^+(-\vec{Q},-\omega)\} \quad (B.19).$$

LITERATURA

[1]–В.М.АГРАНОВИЧ „ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ" (1968)

[2]–P.BOCEHIERI, F.SENECI, NUOVO CIMEMTO <u>18</u> B, 392 (1965)

[3]–В.А.ГЕРГЕЛЬ, Р.Ф. КАЗАРИНОВ, Р.А.СУРИС ЖЭТФ <u>53</u>, 544 (1967); <u>54</u>, 298 (1968)

[4]–В.М.АГРАНОВИЧ, Б.С.ТОШИЧ, ЖЭТФ <u>53</u>, 149 (1967)

[5]–N.N.BOGOLJUBOV, JOUR.OF PHYS. <u>9</u>, 23 (1947)

[6]–С.В.ТЯБЛИКОВ „МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА" (1965)

[7]–С.Т.БЕЛЯЕВ, ЖЭТФ <u>34</u>, 417; 433 (1958)

[8]–А.С.ДАВЫДОВ „ТЕОРИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЭКСИТОНОВ" (1968)