

U N I V E R Z I T E T U N O V O M S A D U

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

katedra za fiziku

D I P L O M S K I R A D

tema:

KINEMATIČKI NIVOI U TEORIJI EKSITONA I APSORPCIJA
SVETLOSTI

Dejanac Lj. Milorad

NOVI SAD 1977.

Zahvaljujem se profesoru Dr Bratislavu S. Tošiću na svesrdnoj pomoći i sugestijama koje mi je pružio pri izradi ovog diplomskog rada.

S A D R Ž A J

UVOD.....str.1

GLAVA I

FRENKELOVI EKSITONI

§1.Osobine Frenkelovih eksitona.....str.2

§2.Zakon disperzije za eksitone u
harmonijskoj aproksimaciji.....str.5

§3.Polaritoni.....str.16

GLAVA II

NELINEARNI EFEKTI U SISTEMU EKSITONA

§1.Kinematički nivoi u sistemu eksitona.....str.18

§2.Opšta formula za tenzor dielektrične
konstante.....str.24

§3.Kinematički nivoi i tenzor dielektrične
konstante.....str.30

ZAKLJUČAK.....str.32

LITERATURA.....str.34

UVOD

Cilj ovog diplomskog rada je da se ispita da li kinematička interakcija eksitona dovodi do stvaranja novih pobuđenja sistema i da se oceni uticaj ovih novih pobuđenja na fenomenološke karakteristike kristala kao što su dielektrična konstanta i koeficijent apsorpcije svetlosti. Tokom pomenutih analiza biće korišćen metod dvovremenskih funkcija Grina, pri čemu će dekumplovanje viših funkcija biti vršena na bazi Vikove teoreme za Boze operatore. Sparivanje operatora vršiće se i za iste trenutke vremena i za različite trenutke vremena. Samo sparivanje po različitim trenucima vremena može da nam da odgovor na pitanje da li se u sistemu javljaju dopunske ekscitacije.



GLAVA I

FRENKELOVI EKSITONI

§1. Osobine Frenkelovih eksitona

Posmatrajmo kristal u kome egzistiraju zone tj. energetski nivoi elektrona u dotičnom kristalu. Kristal se nalazi na temperaturi od nula stepeni kelvina i takvog ga osvetljavamo monohromatskom svetlošću dovoljne energije da može da podigne elektron sa nižeg na viši energetski nivo. Naravno pri tom možemo posmatrati jedan molekulski ili jedan poluprovodnički kristal. Razlika kod optičkog pobuđivanja ovih kristala postoji i u daljem tekstu biće izneti ovi različiti načini optičkog pobuđivanja.

Razmatrajmo ,prvo, optičko pobuđivanje molekulskih kristala npr. optičko pobuđivanje molekulskih kristala antracena, naftalina, benzola, plemenitih gasova i to u čvrstom stanju. Molekuli ovih kristala su jaki dipoli, između ovih molekula deluje jaka sila, tako da je ova interakcija dipol-dipolna. Potencijal ove interakcije između molekula je:

$$V_{\vec{n} \vec{m}} = e^2 \frac{\vec{r}_{\vec{n}} \cdot \vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{n} - \vec{m}|^3} - 3e^2 \frac{[\vec{r}_{\vec{n}}(\vec{n} - \vec{m})][\vec{r}_{\vec{m}}(\vec{n} - \vec{m})]}{|\vec{n} - \vec{m}|^5} \quad \text{I 11.}$$

gde je: e -naelektrisanje elektrona; $\vec{n}, \vec{m}$ -vektori kristalne rešetke; $\vec{r}_{\vec{n}}, \vec{r}_{\vec{m}}$, -vektori dipola molekula na mestu $\vec{n}, \vec{m}$ u kristalnoj rešetki. Ova dipol-dipolna interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja između molekula i ona ima dva dela koja su međusobno različita. Prvi deo zavisi od intenziteta rastojanja između molekula i to je analitički deo dipol-dipolne interakcije. Drugi deo zavisi od intenziteta rastojanja i od uglova koji vektori-dipoli zaklapaju sa rastojanjem $\vec{n}$ i $\vec{m}$ to je neanalitički deo dipol-dipolne interakcije.

Da vidimo kako nastaju eksitoni kod ovih molekulskih kristala sa ovakvom interakcijom između molekula. Da bi do ekscitacije došlo upadna svetlost, rekli smo, mora da ima energiju veću od razlike energija između dva najbliža energetska nivoa. Upadna svetlost pobuđuje molekul i elektron prelazi sa nižeg na viši energetski nivo. Na njegovom mestu ostaje šupljina. Ovakav par elektron-šupljina ostaje lokalizovan u molekulu i naziva se Frenkelov eksiton. Ekscitiranjem jednog molekula menjaju se matrični elementi interakcije između molekula i ekscitacija se širi tj. prenosi na ostale molekule. Stvara se takozvani talas pobuđenja. Svetlost može inače da ekscitira molekul na dva načina:

- a/ efekat promene stanja elektrona u molekulu,
- b/ efekat promene stanja unutrašnjim vibracijama

u molekulu.

Pri ovom zadnjem efektu nastaju eksitoni koji se nazivaju vibrioni. Ovakvi vibrioni mogu nastati ako je upadna svetlost male energije a to je infracrvena svetlost. Prve teorije u optičkom pobuđivanju kristala dali su Frenkel i Pajerls. Posmatrajmo sad poluprovodnički kristal. Svetlost koja pada na ovaj kristal izbacuje elektron u provodnu zonu a da bi se to ostvarilo energija kvanta pobuđivačke svetlosti treba da je veća od energije zabranjene zone u ovom kristalu. U popunjenoj zoni javlja se šupljina koja se ponaša kao pozitivno naelektrisana čestica. Elektron i šupljina se privlače Kulonovom silom i kroz poluprovodnik ne teče struja sve dok je ova sila privlačenja jaka. Ovaj kompleks se ponaša kao neutralna celina i on se pomera kroz poluprovodnički kristal kao neki talas i taj talas nazovimo ih kvazičestica naziva se eksiton Vanije-Mota.

Kada se raskine ova Kulonovska veza eksiton Vanije-Mota prestaje da postoji. Elektron i šupljina se sada kreću nezavisno jedno od drugog i kroz poluprovodnik teče struja i to struja elektronau provodnoj zoni i struja šupljina u popunjenoj zoni. Ovi eksitoni Vanije-Mota javljaju se samo u poluprovodničkim kristalima.

Vidi se da je osnovna razlika ovih eksitona u smislu njihovog dobijanja optičkim pobuđivanjem u tome što kod eksitona Frenkela par elektron-šupljina indukovani svetlošću ostaje lokalizovan u samom molekulu, dok kod eksitona Vanije-Mota kompleks elektron-šupljina se ponaša kao neutralna celina. Inače u energetskom smislu oba pomenuta tipa eksitona su vrlo slični. Energija im je reda veličine 3-5 eV tj. reda veličine vidljive svetlosti koja ih indukuje.

Međutim, bitna razlika ova dva tipa eksitona je u veličini njihovog radijusa, ako ih shvatimo kao kvazičestice sfernog oblika. Frenkelovi eksitoni imaju mali radijus, reda veličine nekoliko angstrema. Eksitoni Vanije-Mota imaju radijus mnogo veći može čak da bude i nekoliko mikrona. Zbog međusobne sprege molekula, pobuđeno stanje će uticati na ostale molekule. Deekscitacijom stvoreni su uslovi za novo pobuđenje. Ekscitacija se prenosi sa jednog molekula na drugi molekul /sa suseda na sused/. Inače vreme ovih eksitona je reda 10^{-8} s.

Može se zaključiti da se kroz posmatrani kristal prostire eksitonski talas i posle nekog vremena Δt svi molekuli su pobuđeni.

§2. Zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji

Ovde ćemo izložiti disperziju Frenkelovih eksitona tj. eksitona koji nastaju isključivo usled promene stanja elektrona u individualnim molekulima. U zavisnosti od toga kakvu će masu eksiton imati zavisi kakvu će disperziju svetlost u kristalu imati. Ograničivši se na molekulski kristal u odnosu na proces optičkih pobuđivanja njegovog elektronskog pod sistema, hamiltonijan ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V_{\vec{n}, \vec{m}} \quad [2.1.]$$

gde je $H_{\vec{n}}$ -hamiltonijan izolovanog molekula na mestu $\vec{n}$,

$V_{\vec{n}, \vec{m}}$ -matrični element operatora dipol-dipolne interakcije.

Ako ovaj hamiltonijan predstavimo u reprezentaciji druge kvantizacije preko Fermi operatora kreacije i anihilacije elektrona na zadatom čvoru rešetke u kvantnom stanju f /koje je dato/ on ima sledeći oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}, f} E_{\vec{n}, f} \hat{a}_{\vec{n}, f}^{\dagger} a_{\vec{n}, f} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V_{\vec{n}, \vec{m}} (f_1, f_2, f_3, f_4) \hat{a}_{\vec{n}, f_1}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{m}, f_2}^{\dagger} a_{\vec{m}, f_3} a_{\vec{n}, f_4} \quad [2.2.]$$

gde f_1, f_2, f_3 i f_4 predstavlja skup kvantnih stanja elektrona,

$\hat{a}_{\vec{n}, f}^{\dagger}$ -operator kreacije elektrona na čvoru $\vec{n}$ u stanju f ,

$a_{\vec{n}, f}$ -operator anihilacije elektrona na čvoru $\vec{n}$ u stanju f .

Svojstveni problem hamiltonijana je:

$$H_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}, f} = E_{\vec{n}, f} \Psi_{\vec{n}, f} \quad \begin{array}{l} E_{\vec{n}} - \text{energija izolovanog molekula} \\ \Psi_{\vec{n}} - \text{svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula} \end{array}$$

Ovi matrični elementi $E_{\vec{n}, f}$, $V_{\vec{n}, \vec{m}}$ operatora $H_{\vec{n}}$, $V_{\vec{n}, \vec{m}}$ po svojstvenim funkcijama operatora $H_{\vec{n}}$ su:

$$E_{\vec{n}, f} = \int \Psi_{\vec{n}, f}^* H_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}, f} d\tau_{\vec{n}} \quad [2.3.]$$

$$V_{\vec{n}, \vec{m}} (f_1, f_2, f_3, f_4) = \int \Psi_{\vec{n}, f_1}^* \Psi_{\vec{n}, f_2} V_{\vec{n}, \vec{m}} \Psi_{\vec{m}, f_3} \Psi_{\vec{n}, f_4} d\tau_{\vec{n}} d\tau_{\vec{m}}$$

gde $d\vec{\tau}_n$ i $d\vec{\tau}_m$ predstavljaju elemente zapremine prostora koji zauzimaju molekuli na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$. Važno je napomenuti da ovaj poslednji integral možemo shvatiti kao integral po beskonačnoj zapremini, jer talasna funkcija ψ brzo opada sa rastojanjem. Pri daljoj analizi, ovog hamiltonijana, pretpostavimo da se elektron može naći samo u dva stanja. Dakle monohromatska svetlost koja pada na dotični kristal može da pobuđuje elektron samo u jednom stanju. Ovo stanje okarakterišimo indeksom τ . Tada na svakom molekulu elektroni imaju na raspolaganju samo dva stanja. Ovo je takozvana šema sa dva nivoa. Osnovno stanje obeležimo sa indeksom 0 a pobuđeno sa indeksom τ . Ako fotoni nisu monohromatski, ova šema je opravdana kada su ostali mogući nivoi energetske jako različiti od nivoa τ . Ovakav elektronski hamiltonijan sa dvočestičnim interakcijama nije zgodan ni sa matematičke ni sa fizičke tačke gledišta. Naime eksiton nije pobuđen elektron, već kvant pobuđenja posmatranog molekula, kristala. Zbog Paulijevog principa na svakom molekulu /uz gornju pretpostavku/ mogu se realizovati samo sledeća kvantno-mehanička stanja:

$$S_1 \equiv (|a_0 a_\tau > ; |1_0 1_\tau >)$$

I 2.4.

$$S_2 \equiv (|1_0 a_\tau > ; |a_0 1_\tau >)$$

Zbog matematičkih a više fizičkih razloga umesto elektronskih operatora /Fermi operatora/ $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ uvodimo kvazičestične operatore $p_{\vec{n}}^+$ i $p_{\vec{n}}$. Njih definišemo na sledeći način:

$$p_{\vec{n}}^+ = a_{\vec{n}\tau}^+ a_{\vec{n}0} \quad ; \quad p_{\vec{n}} = a_{\vec{n}0}^+ a_{\vec{n}\tau}$$

I 2.5.

Njihov fizički smisao je u sledećem: operator $p_{\vec{n}}^+$ odgovara procesu kada elektron nestaje u osnovnom stanju i pojavljuje

se u ekscitovanom stanju $\tilde{\tau}$. Ovaj operator kreira kvant eks-
itovanja /pobuđenja/ molekula pri čemu je energija ovog kvan-
ta $E_{\vec{n}\tilde{\tau}} - E_{\vec{n}0}$. Operator $P_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome je iščezao
elektron u ekscitovanom stanju $\tilde{\tau}$ i kreira se u osnovnom sta-
nju 0. Ovaj operator odgovara procesu uništavanja kvanta eks-
itovanja sa energijom $E_{\vec{n}\tilde{\tau}} - E_{\vec{n}0}$. Dakle ovaj operator uništa-
va /anihilira/ kvant pobuđenja. Inače ovi operatori $P_{\vec{n}}$ i $P_{\vec{n}}^+$
su Pauli operatori. Oni predstavljaju neku sredinu između Fer-
mi i Boze operatora. Izvešćemo komutacione relacije za ove
Pauli operatore koristeći se pri tom komutacionim relacijama
za Fermi i Boze operatore. Pauli operatori su identički jednaki
nuli u fermionskom podprostoru S_1 , dok u podprostoru S_2 delu-
ju na funkcije stanja i to deluju tako što daju uvek funkcije
iz tog podprostora. Dakle isključivanje podprostora je opravd-
ano. Hamiltonijan 12.2. je formulisan tako da važi u podprost-
oru S_2 . U ovom podprostoru važi sledeća relacija:

$$a_{\vec{n}\tilde{\tau}}^+ a_{\vec{n}\tilde{\tau}} + a_{\vec{n}0}^+ a_{\vec{n}0} = 1 \quad \text{I 2.6.}$$

Na osnovu relacije 12.6. i na osnovu komutacionih relacija za
Fermi operatore

$$[a_{\vec{n}\tilde{\tau}}, a_{\vec{m}\tilde{\tau}}^+] = \delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\tilde{\tau}\tilde{\tau}'} ; [a_{\vec{n}\tilde{\tau}}, a_{\vec{m}\tilde{\tau}'}] = [a_{\vec{n}\tilde{\tau}}^+, a_{\vec{m}\tilde{\tau}}^+] = 0$$

$$a_{\vec{n}\tilde{\tau}}^{+2} = a_{\vec{n}\tilde{\tau}}^2 = 0 \quad ; \quad a_{\vec{n}\tilde{\tau}}^+ a_{\vec{n}\tilde{\tau}} = 0 \text{ ili } 1 \quad \text{I 2.7.}$$

imamo komutacione relacije za Pauli operatorima:

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^+] = (1 - 2P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$[P_{\vec{n}}^+, P_{\vec{m}}^+] = [P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}] = 0 \quad m \neq n \quad \text{I 2.8.}$$

$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = a_{\vec{n}\tilde{\tau}}^+ a_{\vec{n}\tilde{\tau}} = 0 \text{ ili } 1 ; P_{\vec{n}}^{+2} = P_{\vec{n}}^2 = 0$$

Vidimo da za jedan čvor rešetke Pauli operatori se ponašaju kao Fermi operatori dok za različite čvorove ponašaju se kao Boze operatori. Ako kristal ima centar inverzije i ako se taj centar inverzije poklapa sa centrom inverzije izolovanog molekula, svi matrični elementi $V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1, f_2, f_3, f_4)$ koji imaju broj indeksa neparan su jednaki nuli. Hamiltonijan mora biti invarijantan u odnosu na transformaciju $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Da vidimo koji su članovi, iz hamiltonijana, u kojem je paran broj indeksa različit od nule. Naravno pri tom moramo uzeti u obzir da indeksi f mogu uzimati samo dve vrednosti i to: 0 i τ .

Prvi slučaj je kada su svi indeksi nule ili svi imaju vrednost τ . Drugi slučaj je kada f_1 i f_2 imaju vrednost τ a f_3 i f_4 vrednost nula i obrnuto, ako f_3 i f_4 imaju vrednost nula a f_1 i f_2 vrednost τ . Treći slučaj je kada f_1 i f_4 imaju vrednost τ a f_2 i f_3 vrednost nula i obrnuto ako f_1 i f_4 imaju vrednost nula a f_2 i f_3 vrednost τ . Ako hamiltonijan 12.2. koristeći se ovim navedenim uslovima kao i relacijama 12.6. i 12.8. razvijemo u tom slučaju imamo hamiltonijan izražen u kvazičestičnim Pauli operatorima

$$H = H_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \mathcal{L}_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \mathcal{M}_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \quad [2.9.]$$

Ovaj hamiltonijan smo uprostiti koristeći se izvesnim oznakama. I to:

$$H_0 = K [E_{\vec{n}0} + \frac{1}{2} V_{\vec{n}0}(0,0,0,0)] ; V_0(f_1, f_2, f_3, f_4) = \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1, f_2, f_3, f_4)$$

$$\Delta = E_{\vec{n}\tau} - E_{\vec{n}0} - \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0,0,0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda, 0; 0, \lambda) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0, \lambda; \lambda, 0)$$

$$\mathcal{L}_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2} [V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda, 0; \lambda, 0) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0, \lambda; 0, \lambda)]$$

$$B_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(2,2;0,0) = V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;2,2)$$

$$\mu_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2} [V_{\vec{n}\vec{m}}(2,2;2,2) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0) - V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;0,f) - V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;f,0)] \quad \text{I 2.10.}$$

Pošto su svi molekuli kristala međusobno identični tada $E_{\vec{n}\vec{0}}$, $E_{\vec{n}\vec{0}}$ a time i Δ ne zavisi od indeksa rešetke. Matrični elementi sa neparnim indeksima jednaki su nuli.

U daljem radu vršićemo analizu hamiltonijana datog relacijom I2.9. Zamenićemo prvo Pauli operatore u hamiltonijanu I2.9.

Boze operatorima po približnim formulama:

$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \cong B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}}; \quad P_{\vec{n}}^+ \cong B_{\vec{n}}^+; \quad P_{\vec{n}} \cong B_{\vec{n}} \quad \text{I 2.11.}$$

Naravno ovakva prosta veza između Pauli i Boze operatora unosi u daljnji račun izvesnu grešku. Ako je broj ekscitiranih molekula u kristalu veći i greška je veća. Tačne formule za ovaj prelaz Pauli na Boze operatore izgledaju ovako:

$$P_{\vec{n}} = \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\ell}}{(1+\ell)!} B_{\vec{n}}^{+\ell} B_{\vec{n}}^{\ell} \right\}^{\frac{1}{2}} B_{\vec{n}}; \quad P_{\vec{n}}^+ = B_{\vec{n}}^+ \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\ell}}{(1+\ell)!} B_{\vec{n}}^{+\ell} B_{\vec{n}}^{\ell} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\ell}}{(1+\ell)!} B_{\vec{n}}^{+\ell+1} B_{\vec{n}}^{\ell+1} \quad \text{I 2.12.}$$

razvijajući ovaj član $P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\ell}}{(1+\ell)!} B_{\vec{n}}^{+\ell+1} B_{\vec{n}}^{\ell+1}$ dobijamo približno:

$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} \cong B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} - B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} = \hat{K}_{\vec{n}} - \hat{K}_{\vec{n}} (\hat{K}_{\vec{n}} - 1)$$

Na osnovu formule I2.12. vidi se da broj pauliona $P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}$ dobija pravilne indekse 0 i 1 samo onda kada je broj bozona jednak 0, 1 i 2. Za $K=3$ dobijamo nepravilan rezultat za broj pauliona $P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}}$. Naime može se reći da je ova približna formula zamene I2.11. dobra samo onda dok je broj bozona mali tj. dok je sistem slabo ekscitiran. Ovakva zamena operatora pripada me-

-todu približne druge kvantizacije. Autor ove metode je Bogoljubov. Fizička suština ove metode je u zameni sistema jako interagujućih čestica sistemom slabo interagujućih kvazičestica. Međutim metod približne druge kvantizacije se ne sastoji samo u ovoj zameni Pauli operatora Boze operatorima već i odbacivanjem članova četvrtog reda kao i članova višeg reda po Boze operatorima iz hamiltonijana. Ovi članovi četvrtog reda kao i članovi višeg reda dolaze usled razlike između Pauli i Boze komutacionih relacija po Boze operatorima.

Hamiltonijan metodom približne druge kvantizacije ima oblik:

$$H = H_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} L_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \beta_{\vec{n}, \vec{m}} (B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}^+ + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}}) \quad \text{I 2.13.}$$

Izvršimo Furije transformaciju Boze operatora

$$B_{\vec{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{\vec{\ell}} B_{\vec{\ell}}^+ e^{-i\vec{\ell}\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{\vec{\ell}} B_{-\vec{\ell}}^+ e^{i\vec{\ell}\vec{n}}$$

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{\vec{\ell}} B_{\vec{\ell}} e^{i\vec{\ell}\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{\vec{\ell}} B_{-\vec{\ell}} e^{-i\vec{\ell}\vec{n}} \quad \text{I 2.14.}$$

Imajući u vidu ovu Furije transformaciju Boze operatora hamiltonijan ima sledeći oblik:

$$H = H_0 + \sum_{\vec{\ell}} (\Delta + L_{\vec{\ell}}) B_{\vec{\ell}}^+ B_{\vec{\ell}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{\ell}} \beta_{\vec{\ell}} (B_{\vec{\ell}}^+ B_{-\vec{\ell}}^+ + B_{-\vec{\ell}} B_{\vec{\ell}})$$

$$L_{\vec{\ell}} = \sum_{\vec{n}} L_{\vec{n}, 0} e^{i\vec{\ell}\vec{n}} ; \quad \beta_{\vec{\ell}} = \sum_{\vec{n}} \beta_{\vec{n}, 0} e^{i\vec{\ell}\vec{n}} \quad \text{I 2.15.}$$

Ovaj hamiltonijan ne odražava totalni broj čestica $\hat{K} = \sum_{\vec{\ell}} B_{\vec{\ell}}^+ B_{\vec{\ell}}$ odnosno kvantno mehanički $[\hat{K}, \hat{H}] \neq 0$. Ovako dobijen hamiltonijan /I2.15./ možemo dijagonalizovati prelaskom na nove Boze operatore $b_{\vec{\ell}}$ i to na ovaj način:

$$B_{\vec{e}} = U_{\vec{e}} b_{\vec{e}} + V_{\vec{e}} b_{\vec{e}}^+$$

$$B_{\vec{e}}^+ = U_{\vec{e}} b_{\vec{e}}^+ + V_{\vec{e}} b_{\vec{e}}$$

I 2.16.

$$B_{-\vec{e}} = U_{\vec{e}} b_{-\vec{e}} + V_{\vec{e}} b_{\vec{e}}^+$$

$$B_{-\vec{e}}^+ = U_{\vec{e}} b_{-\vec{e}}^+ + V_{\vec{e}} b_{\vec{e}}$$

/ovo je takozvana UV transformacija Bogoljubova/

Funkcije $U_{\vec{e}}$ i $V_{\vec{e}}$ su transformacione funkcije i po pretpostavci su realne i parne. Potrebno je, međutim, da za ove transformacione funkcije U i V postavimo uslov kanoničnosti i tada će biti $b_{\vec{e}}$ Boze operator. Obrazujmo komutator $[B_{\vec{e}}, B_{\vec{e}}^+]$ koristeći se relacijom I2.16.

$$[B_{\vec{e}}, B_{\vec{e}}^+] = U_{\vec{e}}^2 [b_{\vec{e}}, b_{\vec{e}}^+] + V_{\vec{e}}^2 [b_{-\vec{e}}^+, b_{\vec{e}}] + U_{\vec{e}} V_{\vec{e}} \{ [b_{\vec{e}}, b_{-\vec{e}}] + [b_{-\vec{e}}^+, b_{\vec{e}}^+] \}$$

Dakle da bi $b_{\vec{e}}^+$ i $b_{\vec{e}}$ bili Boze operatori potrebno je da

$$[b_{\vec{e}}, b_{\vec{e}}^+] = 1; [b_{-\vec{e}}^+, b_{-\vec{e}}] = -1; [b_{\vec{e}}, b_{-\vec{e}}] = [b_{-\vec{e}}^+, b_{\vec{e}}^+] = 0$$

pa vidimo da je uslov kanoničnosti za funkcije U i V sledeći:

$$U_{\vec{e}}^2 - V_{\vec{e}}^2 = 1$$

I 2.17.

jer je $[B_{\vec{e}}, B_{\vec{e}}^+] = 1$. Da bi dobili hamiltonijan uzimajući u obzir nove Boze operatore ubacimo relacije I2.16. u hamiltonijan I2.15. pa dobijamo:

$$H = H_0 + \sum_{\vec{e}} [V_{\vec{e}}^2 (\Delta + L_{\vec{e}}) + U_{\vec{e}} V_{\vec{e}} B_{\vec{e}}] + \sum_{\vec{e}} [(\Delta + L_{\vec{e}})(U_{\vec{e}}^2 + V_{\vec{e}}^2) + 2U_{\vec{e}} V_{\vec{e}} B_{\vec{e}}] b_{\vec{e}}^+ b_{\vec{e}} + \sum_{\vec{e}} [(\Delta + L_{\vec{e}}) U_{\vec{e}} V_{\vec{e}} + \frac{1}{2} B_{\vec{e}} (U_{\vec{e}}^2 + V_{\vec{e}}^2)] (b_{\vec{e}}^+ b_{-\vec{e}}^+ + b_{\vec{e}} b_{-\vec{e}}) \quad \text{I 2.18.}$$

U ovom hamiltonijanu figurišu neki nedijagonalni članovi proporcionalni $b_{\vec{e}}^+ b_{-\vec{e}}^+ + b_{\vec{e}} b_{-\vec{e}}$. Da bi se njih oslobodili izjednačimo koeficijente koji stoje uz njih sa nulom. Tako dobijamo:

$$U_{\vec{e}}^2 - V_{\vec{e}}^2 = 1$$

$$(\Delta + \mathcal{L}\vec{e}) U_{\vec{e}} V_{\vec{e}} + \frac{1}{2} \beta_{\vec{e}} (U_{\vec{e}}^2 + V_{\vec{e}}^2) = 0$$

Dobili smo sistem jednačina koji lako možemo rešiti i rešenja tog sistema očigledno su:

$$U_{\vec{e}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta + \mathcal{L}\vec{e}}{\sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2}} + 1 \right] ; \quad V_{\vec{e}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta + \mathcal{L}\vec{e}}{\sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2}} - 1 \right]$$

$$U_{\vec{e}} V_{\vec{e}} = -\frac{1}{2} \frac{\beta_{\vec{e}}}{\sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2}} ; \quad U_{\vec{e}} + V_{\vec{e}} = \frac{\Delta + \mathcal{L}\vec{e}}{\sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2}} \quad \text{I 2.19.}$$

Ubacimo li ove formule u hamiltonijan I2.10. dobićemo dijagonalizovani eksitonski hamiltonijan. Njegov oblik je:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{e}} \left[\sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2} - \Delta - \mathcal{L}\vec{e} \right] + \sum_{\vec{e}} \sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2} b_{\vec{e}}^+ b_{\vec{e}} \quad \text{I 2.20.}$$

U daljem radu /koristićemo hamiltonijan u ovom obliku/ tražićemo zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji. Inače zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji nalazimo kao parcijalni izvod ovog hamiltonijana po $b_{\vec{e}}^+ b_{\vec{e}}$.

$$E_{\text{eks}}(\vec{e}) = \frac{\partial H}{\partial b_{\vec{e}}^+ b_{\vec{e}}} = \sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2} \quad \text{I 2.21.}$$

Važno je napomenuti da isti ovaj rezultat možemo dobiti i primenom generalisanog Vajlovog identiteta, ali taj postupak nećemo ovde tretirati.

Veličina Δ je reda veličine 5eV, što odgovara energiji upadne svetlosti, dok su $\mathcal{L}$ i β reda veličine 0,1 - 0,01eV.

Na osnovu ovog koren u jednačini I2.21. razvijemo u red

$$E_{\text{eks}}(\vec{e}) = \sqrt{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2 - \beta_{\vec{e}}^2} = (\Delta + \mathcal{L}\vec{e}) \sqrt{1 - \frac{\beta_{\vec{e}}^2}{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2}} \cong (\Delta + \mathcal{L}\vec{e}) \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\beta_{\vec{e}}^2}{(\Delta + \mathcal{L}\vec{e})^2} \right]$$

pa je:

$$E_{\text{eks}}(\vec{\ell}) = \Delta + \mathcal{L}\vec{\ell} - \frac{1}{2} \frac{\beta_{\vec{\ell}}^2}{\Delta + \mathcal{L}\vec{\ell}} \cong \Delta + \mathcal{L}\vec{\ell} - \frac{\beta_{\vec{\ell}}^2}{2\Delta}$$

Dakle približno zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji je:

$$E_{\text{eks}}(\vec{\ell}) = \Delta + \mathcal{L}\vec{\ell} - \frac{\beta_{\vec{\ell}}^2}{2\Delta} \quad \text{I 2.22.}$$

Da bi ovaj zakon disperzije još bolje razumeli izvršićemo neke pretpostavke i to:

-Ograničimo se na kristal sa prostom kubnom strukturom /najbližih šest suseda/ aproksimacijom najbližih suseda i aproksimacijom talasnih vektora.

-Da je u $\mathcal{L}\vec{\ell}$ i $\beta_{\vec{\ell}}$ važan samo analitički deo operatora dipol-dipolne interakcije.

Tada je:

$$\mathcal{L}\vec{\ell} = 2\mathcal{L}(\cos \ell_x d + \cos \ell_y d + \cos \ell_z d) \quad \text{I 2.23.}$$

$$\beta_{\vec{\ell}} = 2\beta(\cos \ell_x d + \cos \ell_y d + \cos \ell_z d)$$

gde je d -konstanta rešetke a $\mathcal{L}\vec{\ell}$ i $\beta_{\vec{\ell}}$ matričnielementi za najbliže susede. Ubacimo li relaciju I2.23. u izraz za zakon disperzije eksitona u harmonijskoj aproksimaciji I2.22. imamo:

$$E_{\text{eks}}(\vec{\ell}) = \Delta + 6\mathcal{L} - \frac{18\beta^2}{\Delta} - \mathcal{L}d^2\ell^2 + \frac{12\beta^2 d^2 \ell^2}{2\Delta} - \frac{\beta^2 d^4 \ell^4}{2\Delta}$$

Uvedemo li oznake

$$\Delta' = \Delta + 6\mathcal{L} - \frac{18\beta^2}{\Delta} ; \quad m^* = - \frac{\hbar^2}{2d^2(\mathcal{L} - \frac{6\beta^2}{\Delta})} \quad \text{I 2.24.}$$

tada možemo zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji pisati u sledećem obliku:

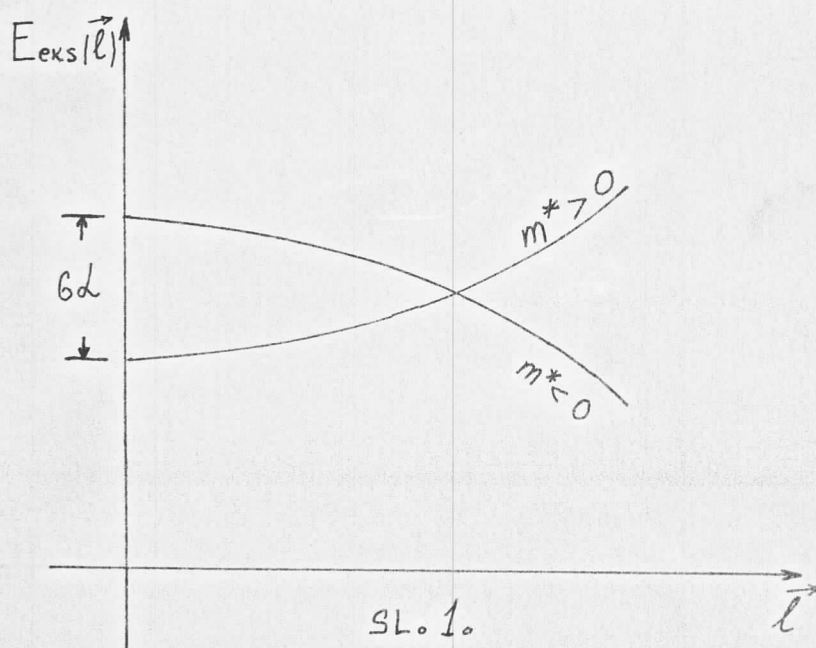
$$E_{\text{eks}}(\vec{l}) = \Delta' + \frac{\hbar^2 l^2}{2m^*}$$

I 2.25.

Efektivna masa m^* , koju smo ovde uveli umesto stvarne mase, zavisi od kristalne strukture tj. konstante rešetke kao i od veličine i znaka međusobne interakcije molekula. Naime vidi se iz ove krajnje relacije za energiju eksitona da se eksiton u oblasti malih talasnih vektora /impulsa/ ponaša kao čestica sa efektivnom masom m^* čiji znak zavisi od matričnog elementa $\mathcal{L}$.

Ovakav slobodan eksiton ima kinetičku energiju oblika: $\frac{\hbar^2 l^2}{2m^*}$. Po klasičnoj optici, ako je matrični element $\mathcal{L} > 0$ tada je efektivna masa m^* eksitona negativna tj. svetlost u kristalu ima negativnu disperziju. Ako je, međutim, $\mathcal{L} < 0$ tada je efektivna masa m^* eksitona pozitivna i tada, koristeći se terminima klasične optike, svetlost u kristalu ima pozitivnu disperziju. To je takozvani kvadratni zakon disperzije.

Grafički zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji prikazuje se na sledeći način:



Ako posmatramo kristal sa njegovim podrešetkama možemo



da eksiton u jednoj podrešetki imaju pozitivnu disperziju, dok eksitoni u drugoj podrešetki imaju negativnu disperziju. Ova pojava da u kristalu sa dve podrešetke imamo dva tipa eksitona tj. dva tipa eksitonskih zona naziva se Davidovljevsko razdvajanje zona. Širina ovog razdvajanja je u stvari Furije lik interakcije između molekula dve različite podrešetke. Na kraju treba reći da eksitoni imaju i "gep" zakon disperzije čiji je fizički smisao energija pobuđivanja izolovanog molekula.

§3. Polaritoni

Do sada smo razmatrali kristal u teoriji eksitona tj. razmatrali smo optičke ekscitacije, naravno elementarne, čiji je karakter definisan samo hamiltonijanom kristala. Da su ovakva razmatranja eksitona idealizovana za optičke ekscitacije kristala prepostavio je Fano 1956. godine, što je i eksperimentom potvrđeno. Naime eksperimentalno je bilo dokazano da se pored zakona disperzije za eksitone pojavljuje još jedan zakon disperzije koji je veoma sličan zakonu disperzije za eksitone. Ovaj zakon disperzije eksitonska teorija nije mogla objasniti. Ovakav problem se mogao rešiti jedino uvođenjem nove kvazičestice. Hopfild 1957. godine daje ideju da umesto eksitona i fotona u kristalu postoje hibridne ekscitacije koje predstavljaju smešu eksitona i transverzalnih fotona. Agranovič 1959. godine daje kompletnu teoriju ovih hibridnih ekscitacija i naziva ih polaritonima. Međutim, ponekad i danas u literaturi fotonski i eksitonski/eksitoni/ sistemi posmatraju se odvojeno a međusobna interakcija se smatra za malu perturbaciju što je pogrešno. Pogrešno je, jer interakcija foton-eksiton ima red veličine kao i energija samih eksitona tj. fotona te ne može da se shvati kao perturbacija. U domenu foton-eksiton rezonance pojavljuje se singularitet u svim fizičkim veličinama koje karakterišu optičke pojave. Postojanje ovih singulariteta mi ne možemo ukloniti. Prilaz problemu optičkih ekscitacija u kristalu zahteva korekciju hamiltonijana. Korekcija hamiltonijana sastoji se u tome da već poznatom hamiltonijanu kristala dodajemo hamiltonijan interakcije eksiton-foton i hamiltonijan polja transverzalnih fotona. Ovo je takozvana polaritonska reprezentacija.

Uzimajući u obzir navedene korekcije, hamiltonijan ima sada ovakvu formu:

$$H_{TOT} = H_{eks} + H_{fot} + H_{int} + H_{os} \quad [\quad 3.1.$$

gde H_{eks} - predstavlja hamiltonijan eksitona koji je dat u prethodnom paragrafu /formula I2.9./.

Pod hamiltonijanom kristala se podrazumeva zbir eksitonskog hamiltonijana i hamiltonijana osnovnog stanja. Hamiltonijan polja transverzalnih fotona H_{fot} ima sledeći oblik:

$$H_{fot} = \sum_{\vec{e}_j} \hbar c |\vec{e}| \gamma_{\vec{e}_j}^+ \gamma_{\vec{e}_j} \quad [\quad 3.2.$$

gde je: c - brzina svetlosti, $\vec{e}$ - transverzalni vektor svetlosti, γ - označava dve transverzalne grane polarizacije a $\gamma_{\vec{e}_j}^+ \gamma_{\vec{e}_j}$ su operatori anihilacije i kreacije fotona. U hamiltonijanu polja transverzalnih fotona ispušten je član $\frac{1}{2} \sum_{\vec{e}_j} \hbar c |\vec{e}|$ tj. nulta energija oscilovanja elektromagnetnog polja. Dakle kompletnom hamiltonijanu tj. totalnom hamiltonijanu ostaje nepoznat deo hamiltonijana interakcije između fotona i eksitona. Ovaj operator interakcije je vrlo interesantan. Donjega se može doći razmatranjem ponašanja elektrona u elektromagnetnom polju. Do njega možemo doći na ovaj način jer su eksitonska pobuđenja u stvari pobuđenja elektronskog podsistema u posmatranom kristalu, a polje fotona može da se okarakteriše vektorskim potencijalom elektromagnetnog polja. No ovo nalaženje hamiltonijana interakcije između fotona i eksitona izlazi iz okvira ovog diplomskog rada te ovde neće biti razmatrano.

GLAVA II

NELINEARNI EFEKTI U SISTEMU EKSITONA

§1. Kinematički nivoi u sistemu eksitona

U svojim radovima iz teorije magnetizma Dajson je tvrdio da kinematička interakcija eksitona koja je posledica specifičnih komutacionih relacija za spinske operatore, može da dovede do stvaranja dopunskih nivoa u odnosu na spinske talase i to u oblasti malih talasnih dužina. Ova Dajsonova ideja nedavno je proverena i pokazano je da kinematička interakcija spinskih talasa može da stvori nova pobuđenja koja igraju veoma značajnu ulogu u okolini temperature prelaza u feromagnetima. Pošto Frenkelovi eksitoni u kinematici u potpunosti odgovaraju spinskim talasima, logično je pretpostaviti da kinematička interakcija eksitona takođe može da stvori dopunska pobuđenja u odnosu na ona koja su opisana u prvoj glavi diplomskog rada.

Ovde ćemo analizirati osobine tih dopunskih nivoa u sistemu eksitona, koja ćemo u daljem tekstu zvati kinematički nivoi. Poćićemo od hamiltonijana eksitonskog sistema za dvoatomsku eksitonsku šemu, kada su eksitonski operatori Pauli operatori. Ovaj hamiltonijan ima oblik:

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} L_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}}$$

$$L_{\vec{n}\vec{m}} = L_{\vec{m}\vec{n}}; \beta_{\vec{n}\vec{m}} = \beta_{\vec{m}\vec{n}}; L_{\vec{n}\vec{n}} = \beta_{\vec{n}\vec{n}} = 0 \quad \text{II 1.1.}$$

Pauli operatore izrazićemo preko Boze operatora B na sledeći način:

$$P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} - B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \quad \text{II 1.2.}$$

Ako pređemo na Furije likove Pauli i Boze operatora dobićemo na osnovu III.2. sledeće formule:

$$P_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} B_{\vec{q}_2}^{\dagger} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2}$$

II 1.3.

$$P_{\vec{k}}^{\dagger} = B_{\vec{k}}^{\dagger} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} B_{\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2}^{\dagger} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{q}_2}$$

gde su $\vec{k}$ i $\vec{q}$ talasni vektori.

Egzistencija dopunskih nivoa ispitivaćemo analizirajući Grinovu funkciju $\ll P_{\vec{k}}(t) | P_{\vec{k}}^{\dagger}(0) \gg$.

Za funkciju na osnovu opštih pravila Grinove funkcije može se napisati sledeća relacija:

$$i \frac{d}{dt} \ll P_{\vec{k}}(t) | P_{\vec{k}}^{\dagger}(0) \gg = i \mathcal{G}(t) + \ll \Omega_{\vec{k}}(t) | P_{\vec{k}}^{\dagger}(0) \gg$$

$$\mathcal{G} = \langle 1 - 2 P_{\vec{n}}^{\dagger} P_{\vec{n}} \rangle$$

II 1.4.

gde je $\Omega_{\vec{k}}$ Furije lik komutatora operatora $P_{\vec{k}}$ sa hamiltonijanom III.1.

Ako u jednačinu III.4. zamenimo vrednosti $P_{\vec{k}}$ iz III.3. i izvršimo, na bazi Vikove teoreme, dekumplovanje viših bozonskih funkcija Grina, pri čemu sparivanje operatora vršimo i za ista i za različita vremena i zanemarujemo kvadrate eksitonskih koncentracija, onda nam se III.4. svodi na:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1+2C_0}{E - \mathcal{E}_{\vec{k}} + M_{\vec{k}}} - \frac{2(1+4C_0)}{E - \mathcal{E}_{\vec{k}} + M_{\vec{k}}} \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 (E - \mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2} + \beta_{\vec{q}_1, -\vec{q}_2}) G_{\vec{q}_2}(E_2) G_{\vec{q}_1}(E_1) G_{\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2}^{\times} \times (E - E_1 + E_2)$$

II 1.5.

U jednačini III.5. upotrebljene su sledeće oznake:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ll B_{\vec{k}}(t) | B_{\vec{k}}(0) \gg e^{-iEt}$$

$$C_0 = \langle B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\vec{q}}}{\theta}} - 1} ; \epsilon_{\vec{k}} = \Delta + \frac{1}{2} \mathcal{L}_{\vec{k}}$$

$$M_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (\mathcal{L}_{\vec{k}} + \mathcal{L}_{\vec{q}} - \beta_0 - \beta_{\vec{k}-\vec{q}}) \langle B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{q}} \rangle$$

$$\mathcal{L}_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{m}} \mathcal{L}_0 \vec{m} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{m}} ; \beta_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{m}} \beta_0 \vec{m} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{m}}$$

II 1.6.

Ako jednačinu III.5. iteriramo uzimajući za nultu aproksimaciju

$$G_{\vec{k}}^{(0)}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - \epsilon_{\vec{k}} + i\delta} = \frac{i}{2\pi} \left\{ \hat{\mathcal{P}} \frac{1}{E - \epsilon_{\vec{k}}} - i\pi \delta(E - \epsilon_{\vec{k}}) \right\} \quad \text{II 1.7.}$$

gde $\hat{\mathcal{P}}$ $\delta \rightarrow +\infty$ označava glavnu vrednost integrala, dobijamo konačno:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1 + 2C_0}{E - \omega_{\vec{k}}} \left\{ 1 + \frac{1}{2N^2} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \left[\rho_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} - i\pi \gamma_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \delta(E - \omega_{\vec{q}_1} + \omega_{\vec{q}_2} - \omega_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{q}_1} + \epsilon_{\vec{q}_2}) \right] \right\}^{-1} ; \omega_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} - M_{\vec{k}} \quad \text{II 1.8.}$$

$$\rho_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} = \frac{E - \epsilon_{\vec{k}} - \mathcal{L}_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{q}_1} + \epsilon_{\vec{q}_2} + \beta_{\vec{q}_1} - \beta_{\vec{q}_2}}{E - \omega_{\vec{q}_1} + \omega_{\vec{q}_2} - \omega_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{q}_1} + \epsilon_{\vec{q}_2}} ; \gamma_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} = [E - \epsilon_{\vec{k}} - \mathcal{L}_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{q}_1} + \epsilon_{\vec{q}_2} + \beta_{\vec{q}_1} - \beta_{\vec{q}_2}]$$

Ako uzmemo približno $\omega_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}}$ onda vidimo da Grinova funkcija III.8. ima pol $E = \Delta + \frac{1}{2} \mathcal{L}_{\vec{k}}$ što je poznati zakon disperzije za eksitone iz prve glave. Ako član u velikoj zagradi analiziramo vidimo da on može da ima dva pola, pri čemu je jedan uslov

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \rho_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} = -2$$

i drugi

$$\sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \gamma_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \delta(E - \epsilon_{\vec{q}_1} + \epsilon_{\vec{q}_2} - \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{q}_1} + \epsilon_{\vec{q}_2}) = 0$$

Uslov III.9. daje nam jedan pol. Pošto je rešavanje ovog uslova

II 1.9.

II 1.10.

matematički neizvodljivo bez upotrebe računara on je rešavan za dva granična slučaja i to za slučaj malih talasnih vektora i za slučaj talasnih vektora bliskih kraju Brillouenove zone.

U oblasti malih talasnih vektora ovaj zakon disperzije glasi:

$$E^{(1)} = E^{(0)} - \frac{\hbar^2 \vec{M}_0^2}{2m} \frac{2(1-\xi)}{5} - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}; E_0 = \Delta + 5\mathcal{L} - 2\mathcal{B} \quad \text{II 1.11.}$$

Dok u oblasti velikih talasnih vektora dobijamo:

$$E^{(1)} = \Delta + 9\mathcal{L} - 6\mathcal{B} + \frac{\hbar^2(28\xi - 36)\vec{M}_0^2}{30m} + \frac{\hbar^2(2\xi - 3)\vec{k}^2}{2m} \quad \text{II 1.12.}$$

Ovde su $\mathcal{L}$ i $\mathcal{B}$ matrični elementi rezonantne interakcije za najbliže susede a $\xi = \frac{\mathcal{B}}{\mathcal{L}}$ i $\vec{M}_0$ -granični vektor Brillouenove zone.

Uslov III.10. može da se reši za sve talasne vektore i daje energiju:

$$E^{(2)} = \Delta - 3\mathcal{L} + 6\mathcal{B} - \xi \left(\frac{\hbar^2 \vec{M}_0^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) \quad \text{II 1.13.}$$

Kao što vidimo kinematički eksitonski nivoi imaju kompleksne zakone disperzije a to znači da im je vreme života konačno tj. da se brzo prigušuju.

Za slučaj malih talasnih vektora Grinova funkcija može se pisati u obliku:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{(E - E_1) \left[\frac{3}{2} \frac{1}{E - \Delta_0} (E - E_2) + i \frac{3}{2} S (E - E_3) \right]} \quad \text{II 1.14.}$$

gde je:

$$E_1 = \Delta_0 + f_1; E_2 = \Delta_0 + f_2; E_3 = \Delta_0 + f_3; \Omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\Delta_0 = \Delta + 3\mathcal{L}; f_1 = -\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}; S = \frac{\pi m}{4\pm^2 \vec{M}_0 \vec{k}} \quad \text{II 1.15.}$$

$$f_2 = -\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \frac{2(1-\xi)}{5} \frac{\hbar^2 \vec{M}_0^2}{2m} + 2(\mathcal{L} - \mathcal{B}); f_3 = -6(\mathcal{L} - \mathcal{B}) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \xi \frac{\hbar^2 \vec{M}_0^2}{2m}$$

U slučaju velikih talasnih vektora, Grinova funkcija ima oblik:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{(E-E_1) \left\{ \frac{3}{2} T(E-\tilde{E}_2) + i \frac{3}{2} S(E-E_3) \right\}} \quad \text{II 1.16.}$$

gde je:

$$E_1 = \Delta_0 + f_1; \tilde{E}_2 = \Delta_0 + \tilde{f}_2; E_3 = \Delta_0 + f_3; T = \frac{2m}{\hbar^2 \mu_0^2} \quad \text{II 1.17.}$$

Ako u formuli III.14. pređemo sa energija na frekvence onda možemo pisati

$$G(\mathcal{N}) = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{x}{\mathcal{N}-\mathcal{N}_1} + \frac{y}{\mathcal{N}-\mathcal{N}_I} + \frac{z}{\mathcal{N}-\mathcal{N}_{II}} \right\} \quad \text{II 1.18.}$$

ovde su upotrebljene sledeće oznake:

$$\mathcal{N}_I = \mathcal{N}'_I + i \mathcal{N}''_I; \mathcal{N}'_I = \frac{\mathcal{N}_0 + \mathcal{N}_3}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{A^2+B^2}+A}{2}}; \mathcal{N}''_I = \frac{\mathcal{N}_5}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{A^2+B^2}-A}{2}}$$

$$\mathcal{N}_{II} = \mathcal{N}'_{II} + i \mathcal{N}''_{II}; \mathcal{N}'_{II} = \frac{\mathcal{N}_0 + \mathcal{N}_3}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{A^2+B^2}+A}{2}}; \mathcal{N}''_{II} = \frac{\mathcal{N}_5}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{A^2+B^2}-A}{2}}$$

$$A = (\mathcal{N}_0 - \mathcal{N}_3 - \mathcal{N}_5)(\mathcal{N}_0 - \mathcal{N}_3 + \mathcal{N}_5); B = 4\mathcal{N}_5(\mathcal{N}_0 + \mathcal{N}_3 - \mathcal{N}_2)$$

$$\mathcal{N}_1 = \frac{E_1}{\hbar}; \mathcal{N}_2 = \frac{E_2}{\hbar}; \mathcal{N}_3 = \frac{E_3}{\hbar}; \mathcal{N}_5 = \frac{1}{\hbar S}$$

$$x = \frac{\mathcal{N}_1 P - Q}{(\mathcal{N}_{II} - \mathcal{N}_1)(\mathcal{N}_1 - \mathcal{N}_I)}; y = \frac{\mathcal{N}_I P - Q}{(\mathcal{N}_{II} - \mathcal{N}_I)(\mathcal{N}_I - \mathcal{N}_1)}; z = \frac{\mathcal{N}_{II} P - Q}{(\mathcal{N}_{II} - \mathcal{N}_I)(\mathcal{N}_1 - \mathcal{N}_{II})}$$

$$P = \frac{2i\mathcal{N}_5}{3}; Q = \frac{2i\mathcal{N}_0\mathcal{N}_5}{3}; \mathcal{N} = \frac{E}{\hbar} \quad \text{II 1.19.}$$

Formula III.16. koja važi u oblasti velikih talasnih vektora može se napisati u obliku

$$G_{\vec{k}}(\mathcal{N}) = \frac{i}{2\pi} \frac{\tilde{P}\mathcal{N} + \tilde{Q}}{(\mathcal{N}-\mathcal{N}_1)(\mathcal{N}-\tilde{\mathcal{N}}_I)(\mathcal{N}-\tilde{\mathcal{N}}_{II})} \quad \text{II 1.20.}$$

Ovde su upotrebljene sledeće oznake:

$$\tilde{p} = \frac{2\mathcal{N}_S \mathcal{N}_T (\mathcal{N}_S - i\mathcal{N}_T)}{3(\mathcal{N}_S^2 + \mathcal{N}_T^2)} ; \quad \tilde{Q} = - \frac{2\mathcal{N}_S \mathcal{N}_T (\mathcal{N}_S \tilde{\mathcal{N}}_2 - i\mathcal{N}_T \mathcal{N}_3)}{3(\mathcal{N}_S^2 + \mathcal{N}_T^2)} ; \quad \mathcal{N}_T = \frac{1}{\hbar T}$$

$$\tilde{\mathcal{N}}_I = \frac{\mathcal{N}_S^2 \tilde{\mathcal{N}}_2^2 + \mathcal{N}_T^2 \mathcal{N}_3}{\mathcal{N}_S^2 + \mathcal{N}_T^2} + i \frac{\mathcal{N}_S \mathcal{N}_T |\tilde{\mathcal{N}}_2 - \mathcal{N}_3|}{\mathcal{N}_S^2 + \mathcal{N}_T^2} \equiv \tilde{\mathcal{N}}_I' + i \tilde{\mathcal{N}}_I''$$

$$\tilde{\mathcal{N}}_{II} = \frac{\mathcal{N}_S^2 \tilde{\mathcal{N}}_2^2 + \mathcal{N}_T^2 \mathcal{N}_3}{\mathcal{N}_S^2 + \mathcal{N}_T^2} - i \frac{\mathcal{N}_S \mathcal{N}_T |\tilde{\mathcal{N}}_2 - \mathcal{N}_3|}{\mathcal{N}_S^2 + \mathcal{N}_T^2} \equiv \tilde{\mathcal{N}}_{II}' + i \tilde{\mathcal{N}}_{II}'' \quad \text{II 1.21.}$$

Ako analiziramo formule III.19. i III.21. vidimo da je imaginarni deo učestanosti kinematičkih nivoa reda veličine $\frac{\mathcal{L}}{\hbar}$. Pošto je $\mathcal{L} \sim 10^{-13}$ erg-a izlazi da je vreme života kinematičkih nivoa reda

$$T_0 \sim 10^{-14} \text{ s} \quad \text{II 1.22.}$$

Kao što vidimo dopunski nivoi u odnosu na normalni eksitonski nivo čije vreme života iznosi 10^{-8} s imaju mnogo kraći život, ali zato veoma mnogo mogu da utiču na apsorpcione osobine kristala. Osim toga, pošto je prigušenje reda $\mathcal{L}$ a ovo reda 10^{-13} erg-a izlazi da zbog prisustva kinematičkih nivoa širina apsorpcionih linija u eksitonskom spektru iznosi oko 500 cm^{-1} a to je u punom skladu sa poznatim eksperimentalnim rezultatima.

§2. Opšta formula za tenzor dielektrične konstante

Ako u elektromagnetnom polju nema spoljašnjih naelektrisanja, a postoje spoljašnje struje, onda možemo posmatrati sledeći par aktuelnih Maksvelovih jednačina:

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{B}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \\ \text{rot } \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{aligned} \quad \text{II 2.1.}$$

Osim toga materijalna jednačina sredine glasi:

$$\vec{D}_{\alpha}(\vec{r}, t) = \int d^3 \vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' \epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') E_{\beta}(\vec{r}', t') \quad \text{II 2.2.}$$

/ponovljeni indeks označava sumiranje po tom indeksu/

Ako pređemo na Furije komponente

$$\vec{M}(\vec{r}, t) = \int d\omega d^3 \vec{k} \vec{M}(\omega, \vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t} \quad \text{II 2.3.}$$

Jednačine II2.1. i II2.2. možemo zameniti

$$\vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \vec{D}(\vec{k}, \omega) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega)$$

$$\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \vec{B}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 2.4.}$$

$$\vec{D}_{\alpha}(\vec{k}, \omega) = \epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \vec{E}_{\beta}(\vec{k}, \omega)$$

Kombinujući jednačine II2.4. dobijamo:

$$\vec{E}_{\alpha}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi\omega i}{c^2} \Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) \vec{j}_{\beta}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 2.5.}$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) = K_{\alpha} K_{\beta} - K^2 \delta_{\alpha\beta} - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$$

U ovim jednačinama $\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ je tenzor dielektrične konstante.

Ako skalarni potencijal $\varphi(\vec{r}, t) = 0$ onda je

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad \text{II 2.6.}$$

pa je :

$$\hat{E}_\omega(\vec{k}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \hat{A}_\omega(\vec{k}, \omega)$$

Tako nalazimo:

$$\hat{A}_\omega(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \Delta_{\omega B}^{-1}(\vec{k}, \omega) f_B^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 2.7.}$$

Fenomenološka veličina $\hat{A}_\omega(\vec{k}, \omega)$ jednaka je statističkoj srednjoj vrednosti operatora $\hat{A}_\omega^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega)$ ako je energetsko polje perturbovano spoljašnjim strujama. Interakcija sa spoljašnjim strujama data je sa:

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{c} \int d^3\vec{r}' \hat{A}_B(\vec{r}', t') f_B^{\text{ext}}(\vec{r}', t') \quad \text{II 2.8.}$$

Na osnovu ovoga je:

$$\langle \hat{A}_\omega^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \rangle = \hat{S}^{-1}(t) \langle \hat{A}_\omega(\vec{r}, t) \rangle \hat{S}(t)$$

$$\hat{S}(t) = \hat{T} e^{i\hbar^{-1} \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}_{\text{int}}(t')}$$

II 2.9.

Ovde simbol $\langle \dots \rangle$ označava špur statističke matrice, a $\hat{A}_\omega(\vec{r}, t)$ predstavlja vektorski potencijal kada su spoljašnje struje odsutne i $\hat{S}(t)$ je S-matrica. Operator $\hat{T}$ je Dajsonov hronološki operator.

Ako izvršimo razvoj $\hat{S}$ -matrice linearnu po interakciji, onda je

$$\hat{S}^{\pm 1}(t) = 1 \pm \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}_{\text{int}}(t') \quad \text{II 2.10.}$$

Ako ovo zamenimo u II 2.9. onda, pošto je $\langle \hat{A}_\omega(\vec{r}, t) \rangle = 0$ dobijamo:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_\alpha^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \hat{T} [\hat{A}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{H}_{\text{int}}(t')] \rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar C} \int_{-\infty}^t dt' d^3\vec{r}' f_B^{\text{ext}}(\vec{r}, t') \langle \hat{T} [\hat{A}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{A}_B(\vec{r}', t')] \rangle \\ &\quad \text{II 2.11.} \end{aligned}$$

U homogenoj sredini kada nema spoljašnjih polja zavisnih od vremena $\langle \hat{T} [\hat{A}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{A}_B(\vec{r}', t')] \rangle$ ne zavisi od $\vec{r}, \vec{r}', t$ i t' pojedinačno već od razlike $\vec{r} - \vec{r}'$ i $t - t'$. Zato ćemo uvesti oznaku

$$\langle \hat{T} [\hat{A}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{A}_B(\vec{r}', t')] \rangle = \Gamma_{\alpha B}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') \quad \text{II 2.12.}$$

Izvršimo Furije transformacije:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha B}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') &= \int d^3\vec{k} d\omega \Gamma_{\alpha B}(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}') - i\omega(t - t')} \\ f_B^{\text{ext}}(\vec{r}', t') &= \int d^3\vec{q} d\Omega f_B^{\text{ext}}(\vec{q}, \Omega) e^{i\vec{q}\vec{r}' - i\Omega t'} \\ &\quad \text{II 2.13.} \end{aligned}$$

Zamenom II2.13. u II2.11. nalazimo:

$$\langle \hat{A}^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \rangle = \frac{(2\pi)^3}{\hbar C} \int d^3\vec{k} d\omega d\Omega e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t} \Gamma_{\alpha B}(\vec{k}, \omega) f_B^{\text{ext}}(\vec{k}, \Omega) \int_{-\infty}^t dt' e^{it'(\omega - \Omega)} \quad \text{II 2.14.}$$

Integral na desnoj strani jednačine rešava se tako što veličinu $\omega - \Omega$ dodamo malu vrednost $-i\delta$ pri čemu $\delta \rightarrow +0$.

Tada imamo:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t dt' e^{it'(\omega - \Omega)} &\rightarrow \int_{-\infty}^t dt' e^{it'(\omega - \Omega - i\delta)} = \frac{e^{it'(\omega - \Omega - i\delta)} \Big|_{-\infty}^t}{i(\omega - \Omega - i\delta)} = \\ &= \frac{e^{it'(\omega - \Omega)}}{i(\omega - \Omega - i\delta)} \quad \text{II 2.15.} \end{aligned}$$

Tada je:

$$\langle \hat{A}_L^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \rangle = \frac{(2\pi)^3}{\hbar C} \int d^3\vec{k} d\Omega d\omega e^{i\vec{k}\vec{r} - i\Omega t} \frac{\Gamma_{LB}(\vec{k}, \omega) f_B^{\text{ext}}(\vec{k}, \Omega)}{\omega - \Omega - i\delta}$$

II 2.16.

Uzmimo sada

$$\langle \hat{A}_L^{\text{ext}}(\vec{r}, t) \rangle = \int d^3\vec{k} d\Omega e^{i\vec{k}\vec{r} - i\Omega t} \langle \hat{A}_L^{\text{ext}}(\vec{k}, \Omega) \rangle \quad \text{II 2.17.}$$

pa se II2.16. svodi na:

$$\langle \hat{A}_L^{\text{ext}}(\vec{k}, \Omega) \rangle = \frac{(2\pi)^3}{\hbar C} \int d\omega \frac{\Gamma_{LB}(\vec{k}, \omega)}{\omega - \Omega - i\delta} f_B^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 2.18.}$$

Pošto je:

$$\Gamma_{LB}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = \langle \hat{T} [\hat{A}_L(\vec{r}, t) \hat{A}_B(\vec{r}', t') - \hat{A}_B(\vec{r}', t') \hat{A}_L(\vec{r}, t)] \rangle$$

i ako na ovu jednačinu primenimo s leva operator $\frac{1}{C^2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'}$, onda ćemo na osnovu II2.6. dobiti novu funkciju koja će biti izražena preko komponente jačine električnog polja. Ovakvu funkciju je neophodno uvesti jer ona ne zavisi od kalibracije potencijala tj. kako se to kaže ona je gradijentno invarijantna.

$$\begin{aligned} \frac{1}{C^2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} \Gamma_{LB}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') &= \langle \hat{T} [\hat{E}_L(\vec{r}, t) \hat{E}_B(\vec{r}', t') - \hat{E}_B(\vec{r}', t') \hat{E}_L(\vec{r}, t)] \rangle = \\ &= G_{LB}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = \int d^3\vec{k} d\omega G_{LB}(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}') - i\omega(t - t')} \end{aligned}$$

II 2.19.

S druge strane je:

$$\begin{aligned} \frac{1}{C^2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} \Gamma_{LB}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') &= \frac{1}{C^2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} \int d^3\vec{k} d\omega \Gamma_{LB}(\vec{k}, \omega) \times \\ &\times e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}') - i\omega(t - t')} \\ &= \int d^3\vec{k} d\omega \frac{\omega^2}{C^2} \Gamma_{LB}(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}') - i\omega(t - t')} \end{aligned}$$

Pa sledi:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \frac{C^2}{\omega^2} G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 2.20.}$$

Prema tome imamo da je:

$$\langle \hat{A}_{\alpha}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \rangle = \frac{(2\pi)^3 C}{\hbar} \int d\Omega \frac{G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \Omega)}{\Omega - \omega - i\delta} \frac{1}{\Omega^2} f_{\beta}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 2.21.}$$

Pošto smo rekli da je:

$$\hat{A}_{\alpha}(\vec{k}, \omega) = \langle \hat{A}_{\alpha}^{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \rangle \quad \text{II 2.22.}$$

Zamenom II2.7. i II2.21. u II2.22. nalazimo konačno:

$$\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) = \frac{2\pi^2 C^2}{\hbar} \int d\Omega \frac{G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \Omega)}{\Omega^2 (\Omega - \omega - i\delta)} \quad \text{II 2.23.}$$

Pošto veličina $\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega)$ sadrži u sebi tenzor dielektrične konstante $\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ jednačinom II2.23. smo dobili vezu između tenzora dielektrične konstante i Grinove funkcije elektromagnetnog polja $G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$. Grinova funkcija $G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ može se izraziti preko eksitonskih funkcija Grina o kojima je bilo reči u prethodnom paragrafu.

Komponente jačine električnog polja mogu se izraziti preko eksitonskih operatora $B_{\vec{k}}(t)$ i $B_{\vec{k}}^{\dagger}(t)$.

$$\begin{aligned} \hat{E}_{\alpha}(\vec{r}, t) &= \sum_{\vec{k}} \hat{S}_{\alpha}(\vec{k}) [B_{\vec{k}}(t) + B_{-\vec{k}}^{\dagger}(t)] e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ \hat{E}_{\beta}(\vec{r}', t') &= \sum_{\vec{q}} \hat{S}_{\beta}(\vec{q}) [B_{-\vec{q}}(t') + B_{\vec{q}}^{\dagger}(t')] e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \quad \text{II 2.24.} \end{aligned}$$

Pošto za Grinovu funkciju važi zakon održanja impulsa i one su parne funkcije od impulsa možemo pisati na osnovu relacija II2.24. i II2.19. da je:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = \sum_{\vec{k}} \hat{S}_{\alpha}(\vec{k}) \hat{S}_{\beta}(\vec{k}) \langle \hat{T} [B_{\vec{k}}(t) B_{\vec{k}}^{\dagger}(t') - B_{\vec{k}}^{\dagger}(t') B_{\vec{k}}(t) + B_{-\vec{k}}^{\dagger}(t) B_{-\vec{k}}(t') - B_{-\vec{k}}(t') B_{-\vec{k}}^{\dagger}(t)] \rangle e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad \text{II 2.25.}$$

Po definiciji dvovremenskih funkcija Grina imamo

$$\langle \hat{T} [B_{\vec{k}}(t) B_{\vec{k}}^{\dagger}(t') - B_{\vec{k}}^{\dagger}(t') B_{\vec{k}}(t)] \rangle = \langle\langle B_{\vec{k}}(t) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(t') \rangle\rangle \quad \text{II 2.26.}$$

$$\langle \hat{T} [B_{-\vec{k}}^{\dagger}(t) B_{-\vec{k}}(t') - B_{-\vec{k}}(t') B_{-\vec{k}}^{\dagger}(t)] \rangle = \langle\langle B_{-\vec{k}}^{\dagger}(t) | B_{-\vec{k}}(t') \rangle\rangle$$

Ako pređemo na Furije komponente

$$\langle\langle B_{\vec{k}}(t) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(t') \rangle\rangle = \int d\omega \langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle e^{i\omega(t-t')}$$

$$\langle\langle B_{\vec{k}}^{\dagger}(t) | B_{\vec{k}}(t') \rangle\rangle = \int d\omega \langle\langle B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) | B_{\vec{k}}(\omega) \rangle\rangle e^{i\omega(t-t')} =$$

$$= \int d\omega \langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle e^{-i\omega(t-t')}$$

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}'; t-t') = \sum_{\vec{k}} \int d\omega G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}') - i\omega(t-t')} \quad \text{II 2.27.}$$

Konačno dobijamo:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \hat{S}_{\alpha}(\vec{k}) \hat{S}_{\beta}(\vec{k}) \{ \langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle + \langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle \} \quad \text{II 2.28.}$$

Zamenom II2.20. u II2.23. dobijamo:

$$\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega) = \frac{2\pi^2 C^2}{\hbar} \int d\mathcal{N} \frac{\hat{S}_{\alpha}(\vec{k}) \hat{S}_{\beta}(\vec{k}) \{ \langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle + \langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle \}}{\mathcal{N}^2 (\mathcal{N} - \omega - i\delta)} \quad \text{II 2.29.}$$

Poslednji dobijeni izraz predstavlja vezu između makroskopske veličine $\Delta_{\alpha\beta}^{-1}(\vec{k}, \omega)$ koja u sebi sadrži tenzor dielektrične konstante $\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ i makroskopskih veličina kao što su eksitonske funkcije Grina $\langle\langle B_{\vec{k}}(\omega) | B_{\vec{k}}^{\dagger}(\omega) \rangle\rangle$.

.Na ovaj način mi smo u stanju da teorijski objasnimo ponašanje dielektrične konstante, jer eksitonske funkcije Grina opisuju mikrooptičke procese u sistemu a ovi se opet mogu definisati na bazi mikroteorijskih kvantnomehaničkih rasuđivanja.

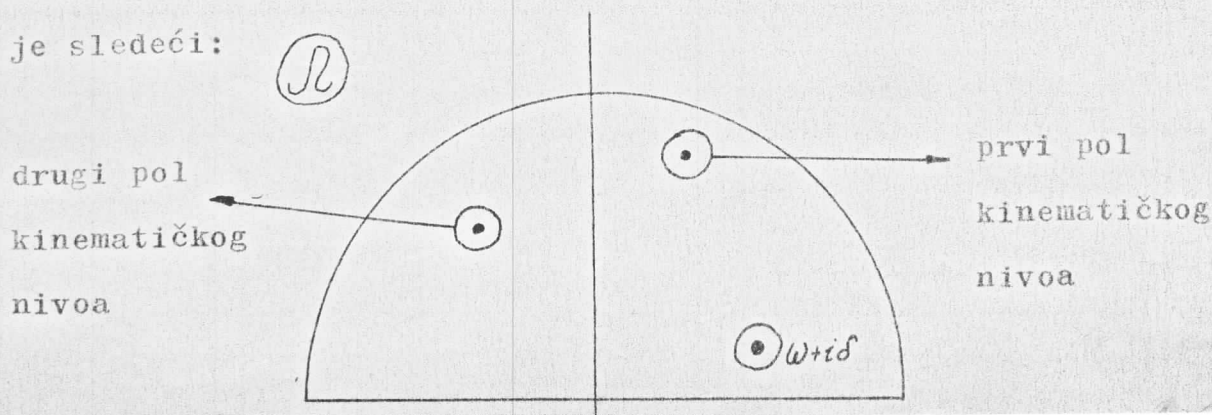
§3. Kinematički nivoi i tenzor dielektrične konstante

Na osnovu formula iz prvog paragrafa druge glave gde su date eksitonske Grinove funkcije $\langle\langle B_{\vec{k}}(t) | B_{\vec{k}}^+(t') \rangle\rangle_{\mathcal{N}}$ i formule II2.29. može se naći tenzor dielektrične konstante. Karakteristike ovog tenzora bitno zavise od karakteristika kinematičkih pobuđenja. Analiza tenzora dielektrične konstante na osnovu izraza dobijenih u prvom i u drugom paragrafu ove glave veoma je glomazna, mada elementarna, pa detalje računa nećemo navoditi. Navešćemo samo neka karakteristična uprošćenja koja su bila korišćena pri dobijanju završnih rezultata. Pre svega smatralo se da je prostorna disperzija u sistemu slaba pa je u tenzoru $\hat{\Delta}_{\mathcal{L}\mathcal{B}}^{-1}(\vec{k}, \omega)$ zanemaren deo koji zavisi od talasnih vektora $\vec{k}$. Osim toga pretpostavljamo da u sistemu postoji slaba anizotropija pa je uzeto da je tenzor $\hat{\Delta}_{\mathcal{L}\mathcal{B}}^{-1}(\vec{k}, \omega)$ dijagonalan. Ove pretpostavke vode na:

$$\hat{\Delta}_{\mathcal{L}\mathcal{B}}^{-1}(\vec{k}, \omega) \longrightarrow -\frac{\omega^2}{c^2} \hat{C}_{\mathcal{L}\mathcal{B}}(\vec{k}, \omega) \hat{\mathcal{S}}_{\mathcal{L}\mathcal{B}} \quad \text{ i } \quad \text{II 3.1.}$$

$$\hat{\mathcal{S}}_{\mathcal{L}}(\vec{k}) \hat{\mathcal{S}}_{\mathcal{B}}(\vec{k}) = \hat{\mathcal{S}}^2(\vec{k}) = \hat{\mathcal{S}}_{\mathcal{L}\mathcal{B}}$$

Pošto u formuli II2.29. u imeniocu imamo faktor $-\delta$, prilikom integracije, konturu smo zatvorili u gornjoj poluravni da bi njome bili obuhvaćeni svi polovi. Ovde je postojao "slabi pol" koji odgovara običnom eksitonskom nivou i par polova koji su davali kinematički nivoi. Oblik konture u kompleksnoj $\mathcal{N}$ ravni je sledeći:



Ovakva kontura je korištena i u slučaju velikih i u slučaju malih talasnih vektora. Ispostavilo se da tenzor dielektrične konstante ima realni deo $\tilde{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ i imaginarni deo $\mathcal{H}(\vec{k}, \omega)$. Imaginarni deo predstavlja koeficijent apsorpcije svetlosti. Znači:

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \tilde{\epsilon}(\vec{k}, \omega) + i \mathcal{H}(\vec{k}, \omega) \quad \text{II 3.2.}$$

Uz ove napomene i apsorpcije u oblasti malih talasnih vektora dobili smo:

$$\tilde{\epsilon}(\vec{k}, \omega) = \frac{3\hbar}{8\pi^2 S^2(\vec{k}) \Omega_0} (\omega^2 - \Omega_0^2) \quad \text{II 3.3.}$$

Dok je koeficijent apsorpcije dobijen u obliku:

$$\mathcal{H}(\vec{k}, \omega) = \frac{3\hbar \phi}{8 S^2(\vec{k}) \Omega_0^2} \left(\frac{|\Omega_0 - \omega|}{\pi \Omega_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{\Omega_0 - \omega}{\Omega_0}} \quad \text{II 3.4.}$$

gde je:

$$\phi = \frac{\sqrt{2\Omega_s \Omega_0}}{2} \quad \text{II 3.5.}$$

Kao što vidimo koeficijent apsorpcije ima gausijansku formu po argumentu $\Omega_0 - \omega$ i predstavlja u neku ruku analog Urbah-ovog pravila na apsolutnoj nuli.

U slučaju velikih talasnih vektora dobijeno je:

$$\tilde{\epsilon}(\vec{k}, \omega) = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{\pi S^2(\vec{k})} \frac{\Omega_0^2 \mathcal{V}_{23}}{\Omega_s} \frac{\omega^2 - \Omega_0^2}{\omega^3} \quad \text{II 3.6.}$$

$$\mathcal{H}(\vec{k}, \omega) = -\tilde{\epsilon}(\vec{k}, \omega) = -\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{\pi S^2(\vec{k})} \frac{\Omega_0^2 \mathcal{V}_{23}}{\Omega_s} \frac{\omega^2 - \Omega_0^2}{\omega^3} \quad \text{II 3.7.}$$

gde je:

$$\mathcal{V}_{23} = \frac{\tilde{\Omega}_2 - \Omega_3}{2} \quad \text{II 3.8.}$$

Kao što vidimo u slučaju velikih talasnih vektora apsorpcija je istog reda veličine kao i realni deo dielektrične konstante što se može objasniti velikim prigušenjem kinematičkih nivoa.

ZAKLJUČAK

Rezultati diplomskog rada mogu se rezimirati na sledeći način:

a/Kinematička interakcija Frenkelovih eksitona dovodi do pojave dopunskog kinematičkog nivoa.

b/Ovaj nivo ima bitno različito ponašanje u oblasti ekstremno malih i u oblasti ekstremno velikih talasnih vektora.

c/Vreme života kinematičkog nivoa iznosi oko 10^{-14} s pa prema tome on mnogo kraće egzistira u sistemu nego normalni eksiton čije je vreme života oko 10^8 s.

d/Prisustvo kinematičkih nivoa može se objasniti do sada teorijski nedovoljno objašnjeno širenje linija, koje iznosi oko 500cm^{-1} . Ova veličina koju smo našli računom najčešće se susreće u eksperimentima.

e/U oblasti malih talasnih vektora dielektrična konstanta /tako ćemo zvati realni deo tenzora dielektrične konstante/ i koeficijenta apsorpcije svetlosti se bitno razlikuje i po veličini i po zavisnosti od ω .

Treba napomenuti da koeficijent apsorpcije ima gausijansku formu i predstavlja analog Urbahovog pravila za ekstremno visoke temperature.

f/U oblasti velikih talasnih vektora, zbog jake apsorpcije dielektrična konstanta i koeficijent apsorpcije su jednaki po veličini i suprotni po znaku.

Na kraju treba napomenuti da je ovde analizirana samo dvonivotska eksitonska šema i pri malim koncentracijama eksitona. Generalisanje ovih rezultata na multinivotske šeme i na visoke

koncentracije svakako je dalo još interesantniji teorijski materijal, možda objasnilo do sada nedovoljno objašnjene fenomene u kristalnoj optici.

LITERATURA

- 1) С.В. Тябликов: „Методы квантовой теории магнетизма“, „Наука“, Москва, 1965. год.
- 2) В.М. Агронович: „Теория экситонов“, „Наука“, Москва, 1968. год.
- 3) F.J. DYSON: Phys. Rev. 102, 1217 (1956)
- 4) F.J. DYSON: Phys. Rev. 102, 1230 (1956)
- 5) А.С. Давыдов: „Теория молекулярных экситонов“, „Наука“, Москва, 1968. год.

