I N S T I T U T Z A F I Z I K U
PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET
UNIVERZITET U NOVOM SADU

MIRJANIĆ LJ. DRAGOLJUB

SUPERFLUIDNOST OPTIČKIM POBUDJENJEM ZA MULTINIVOSKU EKSITONSKU ŠEMU

(DIPLOMSKI RAD)

NOVI SAD
1977.

Zahvaljujem se dr Bratislavu Tošiću i dr Mariju Škrinjaru na nesebičnoj pomoći i korisnim sugestijama koje su mi pružili prilikom izrade ovog rada.

U Novom Sadu, juna 1977.g

D.Mirjanić

VIII.2. LITERATURA

{1} В.М.Агранович:"Теория экситонов",Изд. "Наука", Москва,(1968).

{2} А.С.Давыдов: "Квантовая механика",Изд. Ф.М., Москва,(1963).

{3} А.С.Давыдов: "Теория молекулярных экситонов", Изд. Ф.М.,Москва,(1968).

{4} D.I.Lalović,B.S.Tošić and R.B.Žakula,Phys.Rew. 178,№ 3.,1472-1479,(1969).

{5} S.D.Stojanović,M.J.Škrinjar and B.S.Tošić: Phys.Letters,59A,5,(1976).

{6} D.V.Kapor,S.D.Stojanović,M.J.Škrinjar and B.S. Tošić: Phys.Stat.Sol.,74,103,(1976).

{7} S.D.Stojanović,J.P.Šetrajčić,M.J.Škrinjar and B.S.Tošić: Phys.Stat.Sol.(b),79,433,(1977).

S A D R Ž A J

U V O D

Cilj ovog rada je ispitivanje mogućnosti egzistencije superfluidnih pobudjenja u sistemu sa više vrsta eksitona koji interaguju sa fononima.

Predpostavlja se da virtuelna razmena fonona može da dovede do takvih medjueksitonskih interakcija koje dovode do stvaranja eksitonskih kaplji (vezivanje u eksitonske konglomerate).

Takodje se smatra da raspad eksitonskih kaplji može da dovede do stvaranja novog tipa pobudjenja koji nisu ni eksitoni ni fononi i koja imaju superfluidne osobine,tj. pozitivan minimum fazne brzine.Ukoliko je ovakav efekat moguć to bi značilo da u sistemu vezanih dipola (takvi su svi kristali u kojima se javljaju eksitoni) postoji prenos energije sa minimumom gubitaka,pa bi ova istraživanja mogla da posluže kao most za prelaz sa fizike kristala na biofiziku,jer je danas jasno da sistemi vezanih dipola i superfluidni prenos leže u osnovi procesa žive materije.

GLAVA I

I.1. FRENKELOVI EKSITONI

Pobudjenja molekula u kristalu,koja nastaju prilikom pada svetlosnog snopa na kristal,prvi su objasnili Frenkel i Pajersl za molekulske kristale,a Vanije i Mot za poluprovodnike.Ova pobudjenja molekula u kristalima,indukovana svetlošću, nazivaju se *eksitoni*.

Eksiton Frenkela je neutralan kompleks elektron - šupljina,ali za razliku od eksitona Vanija-Mota ostaje lokalizovan na samom molekulu.Naravno to ne znači da efekat kolektivizacije ne postoji.Naime,ako se par elektron-šupljina pojavi na jednom molekulu,menja se interakcija sa okolnim molekulima, usled čega dolazi do eksitacija susednih molekula.Taj talas pobudjenja (kvazi čestica) predstavlja Frenkelov eksiton.Ovi su eksitoni kratkog radijusa jer kompleks elektron-šupljina ostaje na samom molekulu.Energija pobudjenja Frenkel-ovih eksitona i eksitona Vanije-Mota je reda veličine eV,što znači da se energetski veoma malo razlikuju.

Kod eksitona Frenkela razlikujemo dva tipa eksitacija i to u zavisnosti od načina nastajanja,a to su:

a. Eksitoni koji nastaju kao rezultat pobudjenja elektronskog podsistema u molekulu i

b. Vibroni,eksitoni koji nastaju kao posledica promene stanja unutrašnjih molekulskih vibracija.

Prvi tip eksitona,koji se naziva još *Kulonovski eksitoni*,ima energiju 3 - 5 eV,dok su energije vibrona niže i iznose oko 0,5 eV.

Kako se kod Kulonovskih eksitona radi o pobudjenju elektrona u molekulu,ceo sistem se može tretirati kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama.Pošto elektron ostaje lokalizovan u molekulu,talasne funkcije elektrona susednih molekula slabo se poklapaju što donosi bitnu matematičku olakšicu,a to je da se pri izračunavanju matričnih elemenata integracije po celom prostoru mogu zameniti integralima po elementarnoj ćeliji u kojoj se molekul nalazi.

U opštem slučaju sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama ima sledeći hamiltonijan

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \qquad 1.1.$$

gde je $H_{\vec{n}}$ - hamiltonijan izolovanog molekula na čvoru $\vec{n}$, a $W_{\vec{n}\vec{m}}$ su operatori dipol-dipolnih interakcija na čvorovima $\vec{n}$ i $\vec{m}$.

Potencijal dipol-dipolne interakcija je dat u obliku:

$$W_{\vec{n}\vec{m}} = e^2 \frac{\vec{r}_{\vec{n}}\vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{n}-\vec{m}|^3} - 3e^2 \frac{[\vec{r}_{\vec{n}}(\vec{n}-\vec{m})]\,[\vec{r}_{\vec{m}}(\vec{n}-\vec{m})]}{|\vec{n} - \vec{m}|^5} \qquad 1.2.$$

gde je e - naelektrisanje elektrona, $\vec{r}_{\vec{n}}$ i $\vec{r}_{\vec{m}}$ - vektori dipola na mestu $\vec{n}$ i $\vec{m}$ i $\vec{n}$ i $\vec{m}$ - vektori položaja molekula.

Dipol-dipolna interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja.Iz datog izraza se vidi da ova interakcija ima dva različita dela.

Prvi,koji se naziva analitički i drugi,koji se naziva neanalitički deo dipol-dipolne interakcije.Prvi deo zavisi samo od intenziteta rastojanja izmedju molekula.Drugi deo, kao i prvi,zavisi od intenziteta rastojanja izmedju molekula, a pored toga zavisi i od uglova koje vektori-dipoli zaklapaju sa vektorima položaja $\vec{n}$ i $\vec{m}$.

U reprezentaciji druge kvantizacije hamiltonijan 1.1. ima oblik

$$H = \sum_{\vec{n}\,f} E_{\vec{n}f}\, a^{+}_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}f} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\,\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_1,f_2,f_3,f_4)\, a^{+}_{\vec{n}f_1}\, a^{+}_{\vec{n}f_2}\, a_{\vec{n}f_3}\, a_{\vec{n}f_4} \qquad 1.3.$$

gde je $E_{\vec{n}f}$ - energija elektronskog pobudjenja molekula u čvoru $\vec{n}$ iz osnovnog stanja u pobudjeno f - to stanje, f_1, f_2, f_3 i f_4 - su kvantni brojevi kojima je odredjeno stanje elektrona u molekulu,a $W_{\vec{n}\vec{m}}(f_1,f_2,f_3,f_4)$ - matični element interakcije.

Hamiltonijan molekulskih kristala dat izrazom 1.3. nije pogodan za opisivanje eksitona.Eksiton nije pobudjen elektron,već kvant pobudjenja molekulskih kristala,što znači da u hamiltonijanu (1.3.) treba Fermi operatore zameniti novim (P^{+},P),tako da ga prilagodimo eksitonima.Da bi uveli nove operatore (P^{+},P) moramo predpostaviti da eksitoni nastaju pri prelazu molekula izmedju dva stanja: osnovnog (o) i nekog pobudjenog (f).Ovakva šema sa dva nivoa se može usvojiti u dva slučaja: ako je upadna svetlost monohromatska ili ukoliko su ostali mogući znatno udaljeni od stanja (f).Uvedimo sada nove operatore umesto Fermi operatora na sledeći način:

$$P^{+}_{\vec{n}} = a^{+}_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}o} \qquad\qquad P_{\vec{n}} = a_{\vec{n}o}\, a_{\vec{n}f}$$

gde je $P^{+}_{\vec{n}}$ - operator kreacije koji kreira kvant pobudjenja (eksiton), tj. predstavlja njegovu kreaciju u stanju (f) a nestanak u stanju (o),a

$P_{\vec{n}}$ - operator anihilacije koji predstavlja nestanak elektrona iz stanja (f),odnosno predstavlja pojavu elektrona u osnovnom stanju (o).

Ovako uredjeni operatori nazivaju se Pauli operatori.Oni predstavljaju"sredinu"izmedju Fermi i Boze operatora, jer se ne pokoravaju ni Fermi,ni Boze komutacionim relacijama. Pauli operatori se pokoravaju sledećim komutacionim relacijama,koje su dobijene iz komutacionih relacija Fermi operatora uz dopunske uslove

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

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P^+_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = 0 \qquad \vec{m} = \vec{n} \qquad 1.4.$$

$$P^2_{\vec{n}} = P^{+2}_{\vec{n}} = 0$$

$$P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = a^+_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}f} = 0 \text{ ili } 1$$

Ako ove komutacione relacije primenimo na jedan čvor rešetke ($\vec{m} = \vec{n}$) Pauli operatori će se ponašati kao Fermi operatori

$$[P_{\vec{n}}, P^+_{\vec{n}}] = 1 - 2P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} \qquad 1.4.'$$

a za različite čvorove rešetke ($\vec{m} \neq \vec{n}$) ponašaće se kao Boze operatori

$$[P_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = 0 \qquad 1.4.''$$

Koristeći Pauli operatore i činjenicu da kristal ima centar inverzije,što se poklapa sa centrom inverzije izolovanog molekula,hamiltonijan (1.3.) ima oblik

$$H = H_0 + H_2 + H_4 \qquad 1.5.$$

$$H_0 = N\left[E_0 + \tfrac{1}{2}W_0(00;00)\right] \qquad W_0 = \sum_{\vec{k}} W_{\vec{k}}(00;00)$$

$$H_2 = \sum_{\vec{n}}\left[\Delta + \sum_{\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f0;0f)\right] P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f0;f0)\, P^+_{\vec{n}}P_{\vec{m}} +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(ff;00)\, P^+_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}$$

$$H_4 = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} \left[W_{\vec{n}\vec{m}}(ff;ff) - 2W_{\vec{n}\vec{m}}(f0;0f) + W_{\vec{n}\vec{m}}(00;00)\right] P^+_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}$$

Osnovna prednost ovoga prelaza je u tome,da smo prelazeći na Pauli operatore,dobar deo interakcije čestica-elektrona ubacili u kvadratni deo hamiltonijana kvazičestice (Paulioni) što drugim rečima znači da smo sistem interagujućih čestica zamenili gasom kvazičestica.

Pauli operatori se dalje mogu zameniti Bozonima po sledećim formulama

$$P_{\vec{n}} = \left(\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu}_{\vec{n}} B^{\nu}_{\vec{n}} \right)^{1/2} B_{\vec{n}}$$

$$P^+_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} \left(\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu}_{\vec{n}} B^{\nu}_{\vec{n}} \right)^{1/2} \qquad 1.6.$$

$$P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = \hat{N}_p = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\,\nu+1}_{\vec{n}} B^{\nu+1}_{\vec{n}}$$

gde je $\hat{N}_p$ operator broja paulijana.

Ako je kristal slabo eksitiran,tj. ako postoji mali broj eksitona Pauli operatore u hamiltonijanu (1.5.) možemo zameniti Boze operatorima,na osnovu sledećih približnih formula

$$P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} \qquad B^+_{\vec{n}} = P^+_{\vec{n}} \qquad P_{\vec{n}} P^+_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}$$

i odbacivanjem članova četvrtog reda,hamiltonijan (1.5.) ima oblik

$$H = \sum_{\vec{n}} \lambda B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} (B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}}) \qquad 1.7.$$

gde je

$$\lambda = \Delta + W_0(f0;0f)$$

$$\alpha_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{n}\vec{m}}(f0;f0)$$

$$\beta_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{n}\vec{m}}(ff;00)$$

Spektar eksitona u harmonijskoj aproksimaciji se može dobiti dijagonalizacijom hamiltonijana (1.7.).

Prvo se izvrši Furije transformacija Boze operatora

$$B^+_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_1} e^{-i\vec{k}_1\vec{n}} \quad ; \quad B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

posle čega hamiltonijan (1.7.) postaje

$$H = \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}} B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} (B^+_{\vec{k}} B^+_{-\vec{k}} + B_{-\vec{k}} B_{\vec{k}}) \qquad 1.9.$$

gde je

$$\gamma_{\vec{k}} = \Delta + \sum_{\vec{\ell}} \alpha_{\vec{\ell}} e^{i\vec{k}\vec{\ell}}$$

$$\beta_{\vec{k}} = \sum_{\vec{\ell}} \beta_{\vec{\ell}} e^{i\vec{k}\vec{\ell}}$$

Nakon (u,v) transformacije

$$B_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b^+_{-\vec{k}} \quad ; \quad B^+_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b^+_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}$$

hamiltonijan (1.9.) dobija oblik

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}(E_{\vec{k}} - \gamma_{\vec{k}}) + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} b^{+}_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \qquad 1.10.$$

gde je

$$E_{\vec{k}} = \left(\gamma^2_{\vec{k}} - \beta^2_{\vec{k}}\right)^{1/2} = \left((\lambda + \alpha_{\vec{k}})^2 - \beta^2_{\vec{k}}\right)^{1/2}$$

Zakon disperzije za eksitone je

$$E_{\vec{k}} = \frac{\partial H}{\partial (b^{+}_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}})} = \left(\gamma^2_{\vec{k}} - \beta^2_{\vec{k}}\right)^{1/2} \qquad 1.11.$$

Imajući u vidu da je $\lambda \gg \beta_{\vec{k}}$ i za male talasne vektore $k_1 a \ll 1$ izraz (1.11.) možemo napisati u konačnom obliku

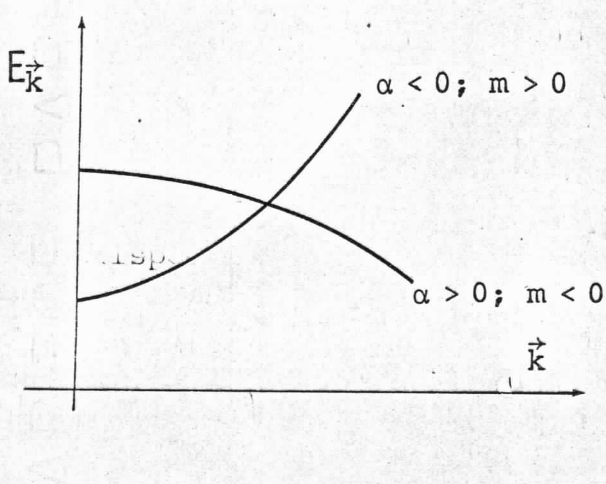
$$E_{\vec{k}} = \lambda + 6\alpha + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad 1.12.$$

gde je

$$m = -\frac{\hbar^2}{2a^2\alpha}$$

efektivna masa eksitona, a α - vrednost interakcije za najbliže susede.

Eksitoni imaju pozitivnu efektivnu masu ako je matrični element interakcije $\alpha < 0$, a negativnu ako je $\alpha > 0$, što se i grafički može predstaviti:



I.2. FONONI

Ako su u kristalu dominantne dvočestične interakcije izmedju njegovih sastavnih delova (atoma ili molekula), tada se ukupna potencijalna energija kristala može izraziti kao

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\,\vec{m}} V\,(\vec{n} - \vec{m}) \qquad 2.1.$$

gde su $\vec{n}$ i $\vec{m}$ vektori čvorova rešetke na apsolutnoj nuli.

Na temperaturama različitim od nule čvorovi rešetke izvode toplotne vibracije, što dovodi do promene veličine $V\,(\vec{n} - \vec{m})$. Može se uzeti da se u proizvoljnom trenutku vremena čvor $(\vec{n})$ nalazi na mestu $(\vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}})$ i čvor $(\vec{m})$ na mestu $(\vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}})$, gde su $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ odgovarajući fononski pomaci u odnosu na ravnotežni položaj čvora $(\vec{n})$, odnosno $(\vec{m})$. Ako još uzmemo da su pomaci $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ mali, potencijalna energija kristala, posle razvijanja u red po malim pomacima i odbacivanjem prvog člana, jer on predstavlja potencijalnu energiju zamrznutog kristala, ima oblik

$$U_f = \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta} \Lambda_{\alpha\beta}\,(\vec{n} - \vec{m})\,(\vec{U}^{\alpha}_{\vec{n}} - \vec{U}^{\alpha}_{\vec{m}})\,(\vec{U}^{\beta}_{\vec{n}} - \vec{U}^{\beta}_{\vec{m}}) \qquad 2.2.$$

gde je

$$\Lambda_{\alpha\beta}\,(\vec{n} - \vec{m}) = \frac{\partial^2\, V(\vec{n} - \vec{m})}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_{\alpha}\,\partial(\vec{n} - \vec{m})_{\beta}} =$$

$$= \Lambda_{\beta\alpha}\,(\vec{n} - \vec{m}) = \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{m} - \vec{n}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{m} - \vec{n})$$

$\alpha, \beta = X, Y, Z$ $\qquad U \equiv u$

Sila na n - ti čvor (tj. njena α komponenta), data je kao negativni izvod potencijalne energije po projekciji, tj.

$$F^{\alpha}_{\vec{n}} = - \sum_{\beta} \Lambda_{\alpha\beta} \sum_{\nu} (\vec{U}^{\beta}_{\vec{n}} + \vec{U}^{\beta}_{\vec{n}+\vec{\nu}}) \qquad 2.3.$$

gde $\vec{\nu}$ spaja najbliže susede za fiksiran atom.

Na osnovi II Njutnovog zakona i predpostavljajući da su komponente pomaka $\vec{U}^{\alpha}_{\vec{n}}$ periodične funkcije prostora i vremena, tj.

$$\vec{U}^{\alpha}_{\vec{n}} = A^{\alpha} e^{i\vec{k}\vec{n} - i\omega_{\vec{k}} t} \qquad 2.4.$$

dobija se homogeni sistem jednačina za odredjivanje komponenti atomskog pomeranja, i da bi taj sistem imao netrivijalna rešenja, determinanta sistema mora biti jednaka nuli. Ta determinanta daje tri dozvoljene frekvence fonona.

Ako posmatramo prostu jednodimenizionu rešetku, dobijamo

$$\omega_{\vec{k}} = 2\sqrt{\frac{\Lambda}{M}}\,\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \qquad 2.5.$$

gde je

$$f_{\vec{k}} = 4\sin^2\frac{ka}{2} \qquad \text{i} \qquad \Lambda \equiv \Lambda_{xx}$$

Za slučaj malih talasnih vektora formula (2.5.) postaje

$$\omega_{\vec{k}} = Ck \qquad C = a\sqrt{\frac{\Lambda}{M}} \qquad 2.6.$$

c - brzina zvuka

Za jednodimenzionalnu rešetku kinetička energija ima oblik

$$T = \frac{M}{2} \sum_{\vec{n}} \dot{\vec{U}}_{\vec{n}}^{2} \qquad 2.7.$$

a potencijalna,na osnovu formule (2.2.),za najbliže susede

$$U_{fon} = \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{n}} (\vec{U}_{\vec{n}+1} - \vec{U}_{\vec{n}})^2 \qquad 2.8.$$

tako da je totalni hamiltonijan sistema

$$H = T + U_{fon} = \frac{M}{2} \sum_{\vec{n}} \dot{\vec{U}}_{\vec{n}}^{2} + \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{n}} (\vec{U}_{\vec{n}+1} - \vec{U}_{\vec{n}})^2 \qquad 2.9.$$

Umesto rešenja tipa (2.4.) uzimamo linearnu kombinaciju

$$U_{\vec{n}} = \sum_{\vec{k}} D_{\vec{k}} (C_{\vec{k}} \cdot e^{i\vec{k}\vec{n}a - i\omega_{\vec{k}} t} + C^{+}_{\vec{k}} \cdot e^{-i\vec{k}\vec{n}a + i\omega_{\vec{k}} t}) \qquad 2.10.$$

Zamenom izraza (2.10.) u (2.9.),hamiltonijan kuplovanih oscilatora,(2.9.) u prostoru rešetke svodimo na hamiltonijan sume nezavisnih oscilatora u prostoru inverzne rešetke (impulsni prostor).

$$H = \sum_{\vec{k}} (C^{+}_{\vec{k}} C_{\vec{k}} + \frac{1}{2}) \hbar\omega_{\vec{k}} \qquad 2.11.$$

gde $\vec{U}_{\vec{n}}$ ima oblik

$$\vec{U}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\,\omega_{\vec{k}}}} \, (C_{\vec{k}} \, e^{i\vec{k}\vec{n}a - i\omega_{\vec{k}} t} + C^{+}_{\vec{k}} \, e^{-i\vec{k}\vec{n}a + i\omega_{\vec{k}} t}) \qquad 2.12.$$

Boze operatori $C_{\vec{k}}$ i $C^{+}_{\vec{k}}$ anihiliraju i kreiraju fonone sa talasnim vektorom $\vec{k}$.

Na ovaj način smenom (2.12.) se sistem vezanih oscilatora opisan hamiltonijanom (2.9.), svodi na sumu hamiltonijana nezavisnih oscilatora (2.11.). Zakon disperzije za fonone, tj. zavisnost frekvencije (ω) od talasnog vektora ($\vec{k}$), data je formulom (2.5.). Za slučaj tri dimenzije dozvoljene frekvencije su odredjene determinantom.

U slučaju složene rešetke sa σ molekula-atoma u elementarnoj ćeliji determinanta bi davala 3σ rešenja za dozvoljene frekvencije fonona.

U slučaju proste ćelije sve tri frekvencije dobijene iz determinante teže nuli kada $\vec{k} \to 0$ i takvi fononi nazivaju se akustični.

Kod složene rešetke za tri frekvencije važi isto pravilo $\vec{k} \to 0$, $\omega_{\vec{k}} \to 0$, a za preostale $3\sigma - 3$ frekvencije, frekvencije ne postaju ravne nuli kada $\vec{k} \to 0$ i takvi fononi nazivaju se optički.

Za slučaj proste prostorne rešetke svakoj od tri akustične frekvencije odgovara jedan polarizacioni vektor $\vec{\ell}_j(\vec{k})$, $j = 1,2,3$ i ovi vektori zadovoljavaju uslov

$$\vec{\ell}_{j(\vec{k})} \vec{\ell}_{j'(\vec{k})} = \delta_{jj'} \qquad 2.13.$$

Ova tri vektora odgovaraju trima komponentama zvuka: jednoj longitudinalnoj i dvema transverzalnim.

Hamiltonijan sistema i operator pomaka imaju sledeći izgled

$$H = \sum_{\vec{k}j} (C^+_{\vec{k}j} C_{\vec{k}j} + \tfrac{1}{2})\hbar\,\omega_{\vec{k}j} \qquad 2.14.$$

$$\vec{U}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{k}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{k}j}}} \left(C_{\vec{k}j}\, e^{i\vec{k}\vec{n}a - i\omega_{\vec{k}}t} + C^+_{\vec{k}j}\, e^{-i\vec{k}\vec{n}a + i\omega_{\vec{k}}t} \right) \qquad 2.15.$$

$$j = 1,2,3$$

II.3. EKSITON - FONON INTERAKCIJE

Hamiltonijan eksiton-fonon interakcije u standardnom obliku dobija se na sledeći način. Polazimo od eksitonskog hamiltonijana, kojeg ćemo napisati odmah preko Boze operatora (u Hajtler - London-ovoj aproksimaciji):

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} \qquad 3.1.$$

gde je

Δ - energija eksitacije izolovanog molekula, a

$D_{\vec{n}\vec{m}}$ i $M_{\vec{n}\vec{m}}$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije medju molekulima kristala.

Ovako napisan hamiltonijan važi za slučaj kada se svi molekuli nalaze u svojim ravnotežnim položajima, tj. ne uzimaju se u obzir njihove oscilacije. Oscilovanje molekula oko ravnotežnih položaja matematički ćemo izraziti slično kao kod fonona, tj.

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}} \quad ; \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}} \qquad 3.2.$$

Pomeranje molekula iz ravnotežnih položaja $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ na niskim temperaturama možemo tretirati kao veličine koje su mnogo manje od konstante kristalne rešetke, tako da matrične elemente $D_{\vec{n}-\vec{m}}$ i $M_{\vec{n}-\vec{m}}$ možemo razviti u red po malim pomeranjima molekula, tj. možemo pisati

$$D_{\vec{n}-\vec{m}} \rightarrow D_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{m}-\vec{u}_{\vec{m}}} = D_{\vec{n}-\vec{m}} + (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}} D_{\vec{n}-\vec{m}} + \cdots$$

$$3.3.$$

$$M_{\vec{n}-\vec{m}} \rightarrow M_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{m}-\vec{u}_{\vec{m}}} = M_{\vec{n}-\vec{m}} + (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}} M_{\vec{n}-\vec{m}} + \cdots$$

$U \equiv u$

Ako sada matrične elemente iz (3.3.) vratimo u (3.1.),eksitonski hamiltonijan će dobiti očigledno neke dodatne članove koji upravo i karakterišu eksiton-fonon interakciju. Predjemo li u impulsni prostor,pomoću Furije transformacija

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

$$D_{\vec{n}-\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} D_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

$$M_{\vec{n}-\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} M_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

i pomeranja molekula $\vec{U}_{\vec{n}}$ i $\vec{U}_{\vec{m}}$ izrazimo preko fononskih operatora formulom

$$\vec{U}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{q}\,j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}j}}}\; \vec{I}_{\vec{q}j} \left(b_{-\vec{q}j} + b^{+}_{\vec{q}j}\right) e^{-i\vec{q}\vec{n}} \qquad 3.4.$$

operator eksiton-fonon interakcije,u impulsnoj reprezentaciji, dobija sledeći oblik

$$\tilde{H}_{int} = \frac{i}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}\,j} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\vec{q}j}}} \left\{ D_{\vec{q}} (\vec{q}\vec{\ell}_{\vec{q}j}) + M_{\vec{k}} (\vec{k}\vec{\ell}_{\vec{q}j}) + M_{\vec{k}-\vec{q}} \left[(\vec{k}-\vec{q})\vec{\ell}_{\vec{q}j} \right] \right\} \cdot$$

$$\cdot\, B^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, B_{\vec{k}} \left(b_{-\vec{q}j} + b^{+}_{\vec{q}j}\right) \qquad 3.5.$$

Nova ideja u prilazu eksiton-fonon interakcije sastoji se u tome da hamiltonijan (3.1.) napišemo u sledećem obliku

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} \qquad 3.6.$$

posle transformacije

$$\vec{n} \to \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}} \qquad i \qquad \vec{m} \to \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}}$$

delta funkcija $\delta_{\vec{n}\vec{m}}$ će se razvijati preko molekularnih pomeranja $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$, tj.

$$\delta_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}},\vec{m}+\vec{u}_{\vec{m}}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \exp.\left\{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})\right\} \cong \delta_{\vec{n}\vec{m}} + \frac{i}{N} \sum_{\vec{k}} \vec{k}(\vec{u}_n-\vec{u}_m) \cdot$$

$$\cdot \exp.\left\{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})\right\} \qquad 3.7.$$

i slično

$$D_{\vec{n}-\vec{m}} \to D_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{m}-\vec{u}_{\vec{m}}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} D_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{m}-\vec{u}_{\vec{m}})}$$

$$M_{\vec{n}-\vec{m}} \to M_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{m}-\vec{u}_{\vec{m}}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} M_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{m}-\vec{u}_{\vec{m}})} \qquad 3.8.$$

Zamenom izraza (3.7.) i (3.8.) u formulu (3.1.) dobili bi smo hamiltonijan sistema eksitona i hamiltonijan eksiton-fonon interakcije u kojem su uključeni svi multifononski procesi.Obzirom da na niskim temperaturama anharmonizam nije jako izražen,možemo izrazu (3.8.) eksponencijalne funkcije razviti u red po malim veličinama $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ (fononski pomeraji) i zadržati onu tačnost koja je dovoljna u konkretnom slučaju. Ako posmatramo samo jednofononske procese,kao u hamiltonijanu (3.5.),za hamiltonijan eksiton-fonon interakcije dobijamo sledeći izraz

$$H_{int} = \frac{i}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\vec{q}}}}\,(\vec{q}\vec{\ell}_{\vec{q}})(\Delta + D_o + M_{\vec{k}} + D_{\vec{q}} + M_{(\vec{k}-\vec{q})}) \cdot$$

$$\cdot\; B^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, B_{\vec{k}}\,(b_{-\vec{q}} + b^{+}_{\vec{q}}) \qquad 3.9.$$

Uporedjujući formule (3.9.) sa formulom koja daje standardni prilaz (3.5.),primećujemo da novi prilaz nosi kao bitnu promenu pojavu energije eksitacije izolovanog molekula (Δ) u hamiltonijanu eksiton-fonon interakcije.Time je konstnta eksiton-fonon interakcije povećana za skoro dva reda veličine. Osim toga treba podvući da kod jednofononskih procesa eksitoni interaguju samo sa longitudinalnom fononskom granom,dok u standardnom prilazu postoji (veoma slaba) interakcija i sa transverzalnim granama.Novi prilaz eksiton-fonon interakcije bolje objašnjava pojave u kristalooptici povezane sa interakcijom optičkih pobudjenja i fonona,kao što je pokazano u {6.}.

II GLAVA

IV.1. EKSITON - FONON INTERAKCIJA ZA SLUČAJ MULTINIVOSKE EKSITONSKE ŠEME

Eksitonski hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji za multinivosku elektronsku šemu ima oblik

$$H_e = \sum_{\vec{n}s} \Delta_s B^+_{s\vec{n}} B_{s\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ss'} W_{ss'}(\vec{n}-\vec{m}) B^+_{s\vec{n}} B_{s'\vec{m}} \qquad 4.1.$$

gde je: Δ_s - energija pobudjenja izolovanog molekula, $s = 1,2,3 \cdots F$ (F - nivo)

$W_{ss'}(\vec{n}-\vec{m})$ - matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije

Usled oscilovanja molekula oko ravnotežnih položaja imamo

$$\vec{n} \to \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}} \qquad \vec{m} \to \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}}$$

Pomeranje molekula iz ravnotežnih položaja $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ na niskim temperaturama možemo tretirati kao veličine koje su mnogo manje od konstante kristalne rešetke, tako da $\delta(\vec{n}-\vec{m})$ možemo razviti u red po malim pomeranjima molekula, tj.

$$\delta(\vec{n}-\vec{m}) \to \delta(\vec{n}-\vec{m}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \exp\{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m}+\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})\} \cong$$

$$\cong \delta(\vec{n}-\vec{m}) + \frac{i}{N} \sum_{\vec{k}} \vec{k}(\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}}) \exp\{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})\} \qquad 4.2.$$

Predjemo li u impulsni prostor pomoću Furije transformacija

$$B_{s\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{s\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

$$W_{ss'}(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} W_{ss'}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} \qquad 4.3.$$

i pomeranja molekula $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ izrazimo preko fononskih operatora formulom

$$\vec{u}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{q}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNC_j q}}\; \vec{\ell}_{j\vec{q}}\, (b_{j-\vec{q}} + b^{+}_{j\vec{q}})\, e^{-i\vec{n}\vec{q}} \qquad 4.4.$$

Operator eksiton-fonon interakcije za slučaj multinivovske eksitonske šeme,u impulsnoj reprezentaciji,dobija sledeći oblik

$$H = H_e + H_{int} \qquad 4.5.$$

gde je

$$H_e = \sum_{\vec{k}ss'} \Phi_{ss'}(\vec{k})\, B^{+}_{s\vec{k}} B_{s'\vec{k}} \qquad 4.6.$$

$$\Phi_{ss'}(\vec{k}) = \Delta_s\, \delta_{ss'} + \frac{1}{2} W_{ss'}(\vec{k})$$

$$H_{int} \equiv H_{ef} = \sum_{\vec{k}\vec{q}s} i\, \Delta_s \sqrt{\frac{\hbar}{2MNvq}}\, (\vec{q}\vec{\ell}_{\vec{q}})\, B^{+}_{s,\vec{k}-\vec{q}}\, B_{s,\vec{k}}\, (b_{-\vec{q}} + b^{+}_{\vec{q}}) \qquad 4.7.$$

Sada prelazimo na dijagonalizaciju hamiltonijana (4.6.) i pri tome koristimo sledeće kanonske transformacije

$$B_{s\vec{k}} = \sum_{\mu} \Theta_{s\mu}(\vec{k})\, C_{\mu\vec{k}}$$

$$B_{s'\vec{k}'} = \sum_{\mu'} \Theta^*_{s'\mu'}(\vec{k})\, C^+_{\mu'\vec{k}'} \qquad 4.8.$$

$$\mu = 1,2,3,\cdots F$$

gde su Boze operatori $(B_{s\vec{k}}, B^+_{s'\vec{k}'})$ izraženi preko novih Boze operatora $(C_{\mu\vec{k}}, C^+_{\mu'\vec{k}'})$, a funkcije $\Theta_{s\mu}(\vec{k})$ i $\Theta^*_{s\mu}(\vec{k})$ zadovoljavaju sledeće relacije ortogonalnosti:

$$\sum_{s=1}^{F} \Theta_{s\mu}(\vec{k})\, \Theta^*_{s\mu}(\vec{k}) = \delta_{\mu\mu'}$$

$$\sum_{\mu=1}^{F} \Theta_{s\mu}(\vec{k})\, \Theta^*_{s'\mu}(\vec{k}) = \delta_{ss'} \qquad 4.9.$$

Dijagonalizovani hamiltonijan (4.6.) dobija sledeći oblik

$$H_e = \sum_{\mu\vec{k}} E_{\mu}(\vec{k})\, C^+_{\mu\vec{k}}\, C_{\mu\vec{k}} \qquad 4.10.$$

$$\mu = 1,2,3,\cdots F$$

Korišćenjem eksitonskog hamoltonijana za multinivovsku eksitonsku šemu i Heisenberg-ovu jednačinu kretanja, dobijamo sistem jednačina za odredjivanje energija $E_{\mu}(\vec{k})$

$$E_{\mu}(\vec{k})\Theta_{s\mu}(\vec{k}) - \sum_{s'=1}^{F} \Phi_{ss'}(\vec{k})\, \Theta_{s'\mu}(\vec{k}) = 0 \qquad 4.11.$$

$$s = 1,2,3,\cdots,F$$

$$\mu = 1,2,3,\cdots,F$$

Rešenje ovog sistema sa s=1,2 (tri nivoa,osnovni i dva pobudjena) su:

$$E_1(\vec{k}) = \frac{\Phi_{11}(\vec{k}) + \Phi_{22}(\vec{k})}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Phi_{11}(\vec{k}) - \Phi_{22}(\vec{k})}{2}\right)^2 + \Phi_{12}(\vec{k})\Phi_{21}(\vec{k})}$$

$$E_2(\vec{k}) = \frac{\Phi_{11}(\vec{k}) + \Phi_{22}(\vec{k})}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Phi_{11}(\vec{k}) - \Phi_{22}(\vec{k})}{2}\right)^2 + \Phi_{12}(\vec{k})\Phi_{21}(\vec{k})} \tag{4.12.}$$

gde je

$$\Phi_{11}(\vec{k}) = \Delta_1 + \frac{1}{2} W_{11}(\vec{k}) \qquad \Phi_{12}(\vec{k}) = \frac{1}{2} W_{12}(\vec{k})$$

$$\Phi_{21}(\vec{k}) = \frac{1}{2} W_{21}(\vec{k}) \qquad \Phi_{22}(\vec{k}) = \Delta_2 + \frac{1}{2} W_{22}(\vec{k}) \tag{4.13.}$$

a Δ_1 i Δ_2 su energije pobudjenja izolovanog molekula u kristalu,a $W_{ss'}$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije medju molekulima kristala.

V.1. UNITARNA TRANSFORMACIJA HAMILTONIJANA SISTEMA EKSITONI PLUS FONONI

Hamiltonijan koji sadrži eksitonski deo,fononski deo i deo usled interakcije,ima sledeći oblik

$$H = H_e + H_f + H_{ef} \tag{5.1.}$$

gde je

$$H_e = \sum_{\mu\vec{k}} E_\mu(\vec{k})\; C^+_{\mu\vec{k}}\, C_{\mu\vec{k}} \tag{5.2.}$$

$$H_f = \sum_{\vec{k}} E_f(\vec{k})\, b^+_{\vec{k}}\; b_{\vec{k}} \tag{5.3.}$$

$$H_{ef} = \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{q}} \Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})\; C^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}\, C_{\nu\vec{k}}\,(b_{-\vec{q}} + b^+_{\vec{q}}) \tag{5.4.}$$

$$\Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{s=1}^{F} (\vec{q}\vec{\ell}_{\vec{q}}) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\nu q}}\; \Theta^*_{s\mu}(\vec{k}-\vec{q})\; \Theta_{s\nu}(\vec{k})\; \Delta_s$$

gde je

$E_f(\vec{k}) = \hbar\nu|\vec{k}|$ - energija longitudinalnih fonona

M - masa jona

ν - brzina zvuka u kristalu

$C_{\mu\vec{k}}$ i $b_{\vec{q}}$ - su eksitonski ,odnosno fononski operatori

Obzirom da je hamiltonijan (5.1.) po svojoj strukturi sličan hamiltonijanu sistema elektrona plus polje mehaničkih oscilacija u provodnicima,izvršićemo unitarnu transformaciju operatora (5.1.) analogno Frelihovoj transformaciji hamiltonijana u teoriji superprovodljivosti.Novi hamiltonijan H_{eq} izražava se preko starog hamiltonijana H,unitarnom transformacijom oblika:

$$H_{eq} = e^{-S} H e^{S} \cong H + [S,H] + \frac{1}{2}[S,[S,H]] \qquad 5.5.$$

gde je

$$S = S_1 - S_1^+ \qquad S^+ = - S \quad \text{- antiermitski operator.}$$

S_1 ćemo uzeti u obliku:

$$S_1 = \sum_{ij\vec{\alpha}\vec{\beta}} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})\, C^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\, C_{j,\vec{\alpha}}\, b_{-\vec{\beta}} \qquad 5.6.$$

$$S_1^+ = \sum_{ij\vec{\alpha}\vec{\beta}} X^*_{ji}(\vec{\alpha}-\vec{\beta},-\vec{\beta})\, C^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\, C_{j,\vec{\alpha}}\, b^+_{\vec{\beta}} \qquad 5.7.$$

gde je

$$-\vec{\beta} \rightarrow \vec{\beta}' \qquad i \qquad \vec{\alpha} + \vec{\beta} \rightarrow \vec{\alpha}'$$

Funkcije X_{ij} odredjujemo tako što u hamiltonijanu H_{eq} odbacujemo članove proporcionalne prvom stepenu interakcije.

Iz uslova $H_{ef} = H^*_{ef}$ sledi da je

$$\Omega^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}) = \Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) \qquad 5.8.$$

Za komutator $[S,H]$ koji figuriše u hamiltonijanu H_{eq} (5.5.) koristićemo sledeći oblik,koji je daleko pogodniji za izračunavanje $[S,H]$

$$[S,H] = [S_1,H] - [S_1^+,H] = [S_1,H] + [S_1,H]^+ \qquad 5.9.$$

Prema tome,dovoljno je potražiti komutator $[S_1,H]$,a

$$[S_1,H] = [S_1,H_e] + [S_1,H_f] + [S_1,H_{fe}] \qquad 5,10.$$

Nakon kraćeg komutiranja dobija se

$$[S_1,H_e] = \sum_{ij\vec{\alpha}\vec{\beta}\mu\vec{k}} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})\, E_\mu(\vec{k})\,[C^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\, C_{j,\vec{\alpha}} b_{-\vec{\beta}},\, C^+_{\mu\vec{k}}\, C_{\mu\vec{k}}] =$$

$$= \sum_{ij\vec{\alpha}\vec{\beta}} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})\,[E_j(\vec{\alpha}) - E_i(\vec{\alpha}-\vec{\beta})]\, C^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\, C_{j,\vec{\alpha}}\, b_{-\vec{\beta}} \qquad 5.11.$$

Fononski komutator dobija oblik

$$[S_1,H_f] = \sum_{ij\vec{\alpha}\vec{\beta}} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta}) E_f(\vec{\beta})\, C^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\, C_{j,\vec{\alpha}} b_{-\vec{\beta}} \qquad 5.12.$$

gde je

$$E_f(\vec{k}) = E_f(-\vec{k}) \quad - \text{ parna funkcija.}$$

Pošto ćemo ekvivalentni hamiltonijan H_{eq} (5.5.) usrednjiti po fononskom vakuumu,tj.

$$\tilde{H} = \langle 0_f\, | H_{eq} |\, 0_f \rangle$$

što znači da uzimamo u obzir samo spontanu emisiju fonona,pa pri nalaženju komutatora $[S_1,H_{ef}]$ možemo odbaciti one članove koji sadrže proizvod dva fononska operatora.

U skladu sa tim dobijamo:

$$[S_1,H_{ef}] \cong \sum_{ij\vec{\alpha}\vec{\beta}} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})\, \Omega_{j,\nu}(\vec{\alpha}-\vec{\beta},-\vec{\beta})\, C^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\, C_{\nu,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} +$$

$$+\sum_{\substack{ij\mu\nu\\ \vec{\alpha}\vec{\beta}\vec{k}}} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})\ \Omega_{\mu\nu}(\vec{k},-\vec{\beta})\ C^{+}_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}\ C^{+}_{\mu,\vec{k}+\vec{\beta}}\ C_{j,\vec{\alpha}}\ C_{\nu,\vec{k}} \tag{5.13.}$$

Sada možemo formirati kompletan komutator $[S,H]$ (5.9.),s tim što ćemo odbaciti članove oblika $C^{+}C$ (oni daju popravku na energiju $E_{\mu}(\vec{k})$ koju ćemo zanemariti).

$$[S,H] = [S_{1},H] + [S_{1},H]^{+} = \sum_{\mu\nu\vec{q}\vec{k}} X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})\Big(E_{\nu}(\vec{k})-E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})+$$

$$+ E_{f}(\vec{q})\Big) C^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}\ C_{\nu,\vec{k}}\ b_{-\vec{q}} + \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{q}} X^{*}_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})\Big(E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q}) - E_{\nu}(\vec{k}) +$$

$$+ E_{f}(\vec{q})\Big) C^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}\ C_{\nu,\vec{k}}\ b^{+}_{\vec{q}} + \sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\\ \vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}} \Big\{ X_{\mu_1\mu_3}(\vec{k}_3,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\ \Omega_{\mu_2\mu_4}\ \cdot$$

$$\cdot\ (\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3,\vec{k}_1-\vec{k}_3) + X^{*}_{\mu_4\mu_2}(\vec{k}_2,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\ \Omega^{*}_{\mu_3\mu_1}(\vec{k}_1,\vec{k}_1-\vec{k}_3)\Big\} C^{+}_{\mu_1,\vec{k}_1}\ \cdot$$

$$C^{+}_{\mu_2,\vec{k}_2}\ C_{\mu_3,\vec{k}_3}\ C_{\mu_4,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \tag{5.14.}$$

Da bi dobili ekvivalentni hamiltonijan H_{eq} (5.5.) trebamo naći i komutator

$$[S,[S,H]] = [S_{1},[S,H]] + [S_{1},[S,H]]^{+} \tag{5.15.}$$

Pri nalaženju komutatora (5.15.) treba imati u vidu da se ekvivalentni hamiltonijan usrednjava po fononskom vakuumu ,tako da ne treba tražiti sve komutatore.

Ekvivalentni hamiltonijan (5.5.) dobija konačan oblik:

$$H_{eq} = \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{q}} \Big\{ E_\mu(\vec{k}) C^+_{\mu,\vec{k}} C_{\mu\vec{k}} + E_f(\vec{k})\, b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \Big[\Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) -$$

$$X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})\Big]\Big(E_\nu(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) + E_f(\vec{q})\Big) C^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} C_{\nu\vec{k}}\, b_{-\vec{q}} + \Big[\Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) -$$

$$X^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})\Big]\Big(E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) - E_\nu(\vec{k}) + E_f(\vec{q})\Big) C^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} C_{\nu,\vec{k}}\, b^+_{\vec{q}} \Big\} -$$

$$- \sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\\ \vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}} \Big\{ X_{\mu_1\mu_2}(\vec{k}_3,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\, \Omega_{\mu_2\mu_4}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3,\vec{k}_1-\vec{k}_3) + X^*_{\mu_4\mu_2} \cdot$$

$$\cdot (\vec{k}_2,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\, \Omega^*_{\mu_3\mu_1}(\vec{k}_1,\vec{k}_1-\vec{k}_3)\Big\} C^+_{\mu_1,\vec{k}_1} C^+_{\mu_2,\vec{k}_2} C_{\mu_3,\vec{k}_3} C_{\mu_4,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} +$$

$$+ \sum_{\nu\mu\vec{k}\vec{q}} X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})\, X^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})\Big(E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) - E_\nu(\vec{k}) + E_f(\vec{k})\Big) C^+_{\mu,\vec{k}+\vec{q}} \cdot$$

$$\cdot\; C^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}\, C_{\nu,\vec{q}}\, C_{\nu,-\vec{q}} \qquad 5.16.$$

Da bi odredili funkcije $X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})$ treba eliminisati članove uz $C_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} C_{\nu,\vec{k}} b^+_{\vec{q}}$ i $C_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} C_{\nu,\vec{k}} b_{-\vec{q}}$

Eliminacija daje:

$$X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{\Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})}{E_\nu(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) + E_f(\vec{q})}$$

5.17.

$$X^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}) = \frac{\Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})}{E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) - E_\nu(\vec{k}) + E_f(\vec{q})}$$

Ta dva uslova su ekvivalentna,tj.

$$\chi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \chi^{*}_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}) \qquad 5.18.$$

Ako $\chi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})$,odredjeno gornjom jednačinom (5.17.), vratimo u (5.16.) i dobijeni hamiltonijan usrednjimo po fononskom vakuumu,(posmatramo samo spontanu emisiju fonona),dobijamo sledeći izraz

$$\langle 0_f | H_{eq} | 0_f \rangle = \sum_{\mu\vec{k}} E_\mu(\vec{k})\, C^{+}_{\mu\vec{k}}\, C_{\mu\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\\ \mu_1\mu_2\mu_3\mu_4}} \Omega_{\mu_1\mu_3}(\vec{k}_3,\vec{k}_3-\vec{k}_1)$$

$$\cdot\, \Omega^{*}_{\mu_4\mu_2} \left\{ \frac{1}{E_{\mu_1}(\vec{k}_1) - E_{\mu_3}(\vec{k}_3) - E_f(\vec{k}_3-\vec{k}_1)} - \frac{1}{E_{\mu_2}(\vec{k}_2) - E_{\mu_4}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3) + E_f(\vec{k}_4-\vec{k}_3)} \right\} C^{+}_{\mu_1\vec{k}_1}\, C^{+}_{\mu_2\vec{k}_2}\, C_{\mu_3\vec{k}_3}\, C_{\mu_4\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3}$$

Iz drugog člana gornje formule,koji predstavlja efektivnu eksiton-eksiton interakciju,izdvojićemo samo onaj deo koji dovodi do stvaranja eksitonskih kaplji,tj. do slepljivanja dva eksitona sa suprotnim impulsima (slično kao u teoriji superprovodljivosti).Može se pokazati da je u izvesnom intervalu impulsa ta interakcija privlačna,te može doći do stvaranja eksitonskih kaplji.U tom cilju iz gornje formule izdvojićemo članove za koje je

$$\mu_1 = \mu_2 = \mu \qquad \mu_3 = \mu_4 = \nu \qquad \vec{k}_1 = -\vec{k} \qquad \vec{k}_2 = \vec{k}$$

$$\vec{k}_3 = \vec{q} \qquad \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 = -\vec{q}$$

tako da za redukovanu vrednost hamiltonijana dobijamo sledeći izraz:

$$\tilde{H} = \langle 0_f | H_{eq} | 0_f \rangle = \sum_{\mu\vec{k}} E_\mu(\vec{k}) C^+_{\mu,\vec{k}} C_{\mu,\vec{k}} + \sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{q}} J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) \cdot$$

$$\cdot\ C^+_{\mu,\vec{k}} C^+_{\mu,-\vec{k}} C_{\nu,-\vec{q}} \cdot C_{\nu,\vec{q}} \qquad 5.19.$$

gde je

$$J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{E_f(\vec{k}+\vec{q})\ \Omega^*_{\nu\mu}(\vec{k},\vec{k}+\vec{q})\ \Omega_{\nu\mu}(\vec{q},\vec{k}+\vec{q})}{[E_\mu(\vec{k}) - E_\nu(\vec{q})]^2 - E_f^2(\vec{k}+\vec{q})} \qquad 5.20.$$

VI.1. SPEKTAR EKSITACIJA NASTALIH RASPADOM KAPLJE

Hamiltonijan (5.19.) dijagonalizovaćemo kanoničnom transformacijom koju je dao Bogoljubov, tako što ćemo sa Boze operatora $C^+_{\mu,\vec{k}}$ i $C_{\mu,\vec{k}}$ preći na nove Boze operatore $a^+_{\mu,\vec{k}}$ i $a_{\mu,\vec{k}}$

Oblik ove transformacije je sledeći:

$$C^+_{\mu,\vec{k}} = u_\mu(\vec{k})\, a_{\mu,\vec{k}} + v_\mu(\vec{k})\, a^+_{\mu,-\vec{k}}$$

$$C^+_{\mu,\vec{k}} = u_\mu(\vec{k})\, a^+_{\mu,\vec{k}} + v_\mu(\vec{k})\, a_{\mu,-\vec{k}} \qquad 6.1.$$

Funkcije $u_\mu(\vec{k})$ i $v_\mu(\vec{k})$ su realne i parne i zbog kanoničnosti transformacije (6.1.) moraju zadovoljavati uslov

$$u^2_\mu(\vec{k}) - v^2_\mu(\vec{k}) = 1 \qquad 6.2.$$

Ako u hamiltonijanu (5.19.) operatore $C^+_{\mu,\vec{k}}$ i $C_{\mu,\vec{k}}$ zamenimo novim, $a^+_{\mu,\vec{k}}$ i $a_{\mu,\vec{k}}$, pomoću transformacija (6.1.) i zadržimo se samo na kvadratnim članovima po operatorima $a^+_{\mu,\vec{k}}$ i $a_{\mu,\vec{k}}$, a zatim kada kod tako dobijenog hamiltonijana nedijagonalni deo izjednačimo sa nulom, da bi odredili funkcije $u_\mu(\vec{k})$ i $v_\mu(\vec{k})$, dobijamo uslov

$$2u_\mu(\vec{k})\, v_\mu(\vec{k})\, E_\mu(\vec{k}) = -\Psi_\mu(\vec{k})\left[u^2_\mu(\vec{k}) + v^2_\mu(\vec{k})\right] \qquad 6.3.$$

gde je

$$\Psi_\mu(\vec{k}) = 2 \sum_{\nu\vec{q}} J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})\, u_\nu(\vec{k})\, v_\nu(\vec{q}) \qquad 6.4.$$

Iz uslova kanoničnosti (6.2.) i (6.3.) dobijamo za funkcije $u_\mu(\vec{k})$ i $v_\mu(\vec{k})$ sledeće izraze

$$u_\mu^2(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{E_\mu(\vec{k})}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Psi_\mu^2(\vec{k})}}\right\}$$

$$v_\mu^2(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left\{-1 + \frac{E_\mu(\vec{k})}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Psi_\mu^2(\vec{k})}}\right\} \qquad 6.5.$$

Odavde sledi:

$$u_\mu^2(\vec{k}) + v_\mu^2(\vec{k}) = \frac{E_\mu(\vec{k})}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Psi_\mu^2(\vec{k})}}$$

$$u_\mu(\vec{k})\, v_\mu(\vec{k}) = -\frac{1}{2}\, \frac{E_\mu(\vec{k})}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Psi_\mu^2(\vec{k})}} \qquad 6.6.$$

Zamenom izraza (6.5.) i (6.6.) u

$$\tilde{H} = \sum_{\mu\vec{k}} \left\{ E_\mu(\vec{k})\left(u_\mu^2(\vec{k}) + v_\mu^2(\vec{k})\right) + 2\,\Psi_\mu(\vec{k})\, u_\mu(\vec{k})\, v_\mu(\vec{k})\right\} \cdot$$

$$\cdot\, a^+_{\mu,\vec{k}}\, a_{\mu,\vec{k}} + \sum_{\mu\vec{k}} \left\{ E_\mu(\vec{k})\, v_\mu^2(\vec{k}) + \Psi_\mu(\vec{k})\, u_\mu(\vec{k})\, v_\mu(\vec{k}) \right\} \qquad 6.7.$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\vec{k}} \left\{ \sqrt{E^2_\mu(\vec{k}) - \Psi^2_\mu(\vec{k})} - E_\mu(\vec{k}) \right\} + \sum_{\mu\vec{k}} \sqrt{E^2_\mu(\vec{k}) - \Psi^2_\mu(\vec{k})}\, a^+_{\mu,\vec{k}} a_{\mu,\vec{k}} \qquad 6.8.$$

gde je

$$\Psi_\mu(\vec{k}) + \sum_{\nu\vec{q}} \frac{J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})}{\sqrt{E^2_\nu(\vec{q}) - \Psi^2_\nu(\vec{q})}} \Psi_\nu(\vec{q}) = 0 \qquad 6.9.$$

$$\nu,\mu = 1,2,3,\cdot\cdot,F$$

sistem integralnih jednačina.

Sada prelazimo na rešavanje sistema integralnih jednačina (6.9.).Kao prvo treba odrediti funkciju $J_{\mu\nu}(k,q)$ (5.20.) Na osnovu sledećih aproksimacija:

$$\Theta(\vec{k}) \cong \Theta(0)$$

$$\Omega^*_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})\ \Omega_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) \cong \frac{1}{N} \frac{\hbar|\vec{k}+\vec{q}|}{2\,M\,v} G_{\mu\nu}$$

$$G_{\mu\nu} = \sum_{ss'}^{F} \Delta_s \Delta_{s'} \Theta_{s\mu}(0) \Theta_{s'\mu}(0)\ \Theta_{s\nu}(0) \Theta_{s'\nu}(0) \qquad 6.10.$$

$$E_\mu(\vec{k}) = E_\mu(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mu} \quad ; \quad \frac{\partial m_\mu}{\partial \mu} = 0$$

jednačina (5.20.) dobija oblik:

$$J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{2m\, G_{\mu\nu}}{NM\hbar^2} \cdot \frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2 - k_0^2 + \frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2} \cdot \frac{k^2-q^2}{(\vec{k}+\vec{q})^2} + \left(\frac{2m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2(\vec{k}+\vec{q})}\right)^2} \qquad 6.11.$$

gde je

$$k_0 = \frac{2mv}{\hbar} \quad ; \quad \Delta_{\mu\nu} = E_\mu(0) - E_\nu(0) \;;\; \Delta_{\mu\mu} = 0$$

$$\mu,\nu = 1,2,3,\cdots\cdots,F$$

Sledeći korak je zamena sa srednjim vrednostima po svim impulsima sledećih izraza:

$$\frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2}\,\frac{k^2-q^2}{(\vec{k}+\vec{q})^2} \longrightarrow \frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{N^2\hbar^2}\sum_{\vec{k}\vec{q}}\frac{k^2-q^2}{(\vec{k}+\vec{q})^2} = \tilde{Q}_{\mu\nu} \tag{6.12.}$$

$$\left(\frac{2m\,\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2\,(\vec{k}+\vec{q})}\right)^2 \longrightarrow \left(\frac{2m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}\vec{q}}\frac{1}{(\vec{k}+\vec{q})^2} = \tilde{P}_{\mu\nu} \tag{6.13.}$$

Da bi našli $\tilde{Q}_{\mu\nu}$ i $\tilde{P}_{\mu\nu}$ prelazimo sa sume na integral po pravilu

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \frac{V}{N(2\pi)^3}\int d^3k \quad ; \quad \frac{V}{N} = a^3$$

Koristimo sledeću aproksimaciju:

$$\frac{\mu_0 + q}{\mu_0 - q} = 1 + \frac{2q}{\mu_0 - q} \simeq 1 + \frac{2q}{\mu_0}$$

gde je μ_0 granični impuls.

Nakon integracije dobijamo da je:

$$\tilde{Q}_{\mu\nu} \cong -\frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{35\hbar^2} = -Q^2_{\mu\nu} \tag{6.14.}$$

$$\tilde{P}_{\mu\nu} \cong \frac{21}{10}\left(\frac{\Delta_{\mu\nu}}{\frac{\hbar^2\mu_0^2}{2m}}\right)^2 \mu_0^2 = P^2_{\mu\nu} \tag{6.15.}$$

Veza izmedju graničnog impulsa μ_0 i konstante kristalne rešetke je

$$\mu_0^3 = \frac{6\pi^2}{a^3}$$

Zamenom izraza (6.14.) i (6.15.) u (6.11.) dobijamo konačno:

$$J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{N}\,\frac{2m^2 G_{\mu\nu}}{\hbar^2 M}\,\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q}) - (\vec{k}_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2)} \qquad 6.16.$$

Pri analizi sistema integralnih jednačina (6.9.) ostao je član

$$\left[E_\nu^2(\vec{q}) - \Psi_\nu^2(\vec{q})\right]^{-1/2}$$

za koji važi sledeća aproksimacija

$$\frac{1}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{q}) - \Psi_\mu^2(\vec{q})}} \simeq \frac{1}{E_\mu(\vec{q})} \simeq \frac{1}{E_\mu(0)} \qquad 6.17.$$

Izraze (6.16.) i (6.17.) zamenimo u (6.9.) tako da dobijemo:

$$\Psi_\nu(\vec{k}) + \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}\nu} \frac{2m^2}{\hbar^2 M}\,\frac{G_{\mu\nu}}{E_\nu(0)}\,\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2 - (\vec{k}_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2)}\,\Psi_\nu(\vec{q}) = 0 \qquad 6.18.$$

$$\nu,\mu = 1,2,3\cdots,F$$

Nakon izvršenog prelaza sa sume na integral po pravilu:

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3q$$

(po celom prostoru)

dobijamo sistem integralnih jednačina

$$\Psi_\mu(\vec{k}) + \frac{2m^2 V}{(2\pi)^3\hbar^2 M}\sum_{\nu=1}^{F}\frac{G_{\mu\nu}}{E_\mu(0)}\int d^3q\,\frac{\Psi_\nu(\vec{q})}{(\vec{k}-\vec{q}) - (k_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2)} = 0 \qquad 6.19.$$

$$\mu,\nu = 1,2,3,\cdots,F$$

U izrazu (6.19.) izvršićemo sledeće Furije transformacije:

$$\Psi_\mu(\vec{k}) = \int d^3\vec{r}\;\Psi_\mu(\vec{r})\,e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\Psi_\mu(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k}\;\Psi_\mu(\vec{k})\,e^{-i\vec{k}\vec{r}} \qquad 6.20.$$

$$\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2 - (k_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2)} = \int d^3\vec{r}\;Y_{\mu\nu}(\vec{r})\,e^{i\vec{r}(\vec{k}-\vec{q})}$$

$$Y_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{\lambda}\;e^{-i\vec{r}\vec{\lambda}}\,\frac{1}{\lambda^2 - (k_0^2 + P_{\mu\nu}^2 - Q_{\mu\nu}^2)}$$

Sistem integralnih jednačina (6.19.) posle Furije transformacije (6.20.),dobija oblik.

$$\Psi_\mu(\vec{r}) + D\sum_{\nu=1}^{F}\frac{G_{\mu\nu}}{E_\nu(0)}Y_{\mu\nu}(\vec{r})\Psi_\nu(\vec{r}) = 0 \qquad 6.21.$$

$$\mu = 1,2,3,\cdots,F$$

gde je

$$D = \frac{2m^2V}{\hbar^2 M}$$

Izraz (6.21.) predstavlja homogen sistem algebarskih jednačina. Da bi ovaj homogen sistem algebarskih jednačina imao netrivijalna rešenja, determinanta sistema mora da je jednaka nuli, tj. determinanta

$$\begin{vmatrix} 1 + D\dfrac{G_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(\vec{r}) & D\dfrac{G_{12}}{E_2(0)}Y_{12}(\vec{r}) & \cdots\cdots & D\dfrac{G_{1F}}{E_F(0)}Y_{1F}(\vec{r}) \\ D\dfrac{G_{21}}{E_1(0)}Y_{21}(\vec{r}) & 1 + D\dfrac{G_{22}}{E_2(0)}Y_{22}(\vec{r}) & \cdots\cdots & D\dfrac{G_{2}}{E_F(0)}Y_{2F}(\vec{r}) \\ D\dfrac{G_{F_1}}{E_1(0)}Y_{F_1}(\vec{r}) & D\dfrac{G_{F}}{E_2(0)}Y_{F_2}(\vec{r}) & \cdots & 1 + D\dfrac{G_{FF}}{E_F(0)}Y_{FF}(\vec{r}) \end{vmatrix} = 0 \qquad 6.22.$$

Pošto će u ovom radu biti posmatran samo slučaj tronivoske eksitonske šeme, (jedan osnovni i dva pobudjena), F treba da ima vrednosti 1 i 2.

Jednačine koje odgovaraju tom slučaju su:

$$\left[1 + D\frac{G_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(\vec{r})\right]\Psi_1(\vec{r}) + D\frac{G_{12}}{E_2(0)}Y_{12}(\vec{r})\,\Psi_2(\vec{r}) = 0$$

$$D\frac{G_{21}}{E_1(0)}Y_{21}(\vec{r})\,\Psi_1(\vec{r}) + \left[1 + D\frac{G_{22}}{E_2(0)}Y_{22}(\vec{r})\right]\Psi_2(\vec{r}) = 0 \qquad 6.23.$$

Obzirom da je jedno rešenje gornjeg sistema homogenih jednačina proizvoljno, predpostavićemo da se ono može napisati u obliku:

$$\Psi_1(\vec{r}) = C_1 \delta(r - R) \tag{6.24.}$$

gde je C_1 proizvoljna konstanta i $|r| = R$

Drugo rešenje ima sledeći oblik:

$$\Psi_2(\vec{r}) = - C_1 \, \delta(r-R) \frac{E_2(0)}{D G_{12} Y_{12}(\vec{r})} \left[1 + D \frac{G_{11}}{E_1(0)} Y_{11}(\vec{r}) \right] \tag{6.25.}$$

Sada potražimo Furije transformaciju izraza (6.24.) i (6.25.)

$$\Psi_1(\vec{k}) = \int d^3\vec{r} \, C_1 \delta(r-R) \, e^{i\vec{k}\vec{r}} = C \frac{\sin RK}{RK} \tag{6.26.}$$

gde konstanta C ima vrednost

$$C = 4\pi R^2 C_1$$

$$\Psi_2(\vec{k}) = - C \frac{E_2(0) \left[1 + \frac{D G_{11}}{E_1(0)} Y_{11}(R) \right]}{D G_{12} Y_{12}(R)} \frac{\sin RK}{RK} \tag{6.27.}$$

VII.1. EKSITONSKE KAPLJE ZA TRONIVOSKU EKSITONSKU ŠEMU

Obzirom na jednačine (6.8.) i činjenicu da razmatramo tronivosku eksitonsku šemu imamo dve vrednosti za disperziju:

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = \sqrt{E_1^2(\vec{k}) - \Psi_1^2(\vec{k})}$$

$$\varepsilon_2(\vec{k}) = \sqrt{E_2^2(\vec{k}) - \Psi_2^2(\vec{k})} \qquad 7.1.$$

Korišćenjem jednačina (6.26.) i (6.27.), kao i aproksimaciju

$$E_1(\vec{k}) \simeq E_1(0) \quad \text{i} \quad E_2(\vec{k}) \simeq E_2(0)$$

izrazi (7.1.) dobijaju oblik:

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = \sqrt{E_1^2(0) - C^2\left(\frac{\sin KR}{KR}\right)^2}$$

$$\varepsilon_2(\vec{k}) = \sqrt{E_2^2(0) - E_2^2(0)\,C^2 \frac{\left[1 + \frac{DG_{11}}{E_1(0)} Y_{11}(R)\right]^2}{D^2 G_{12}^2\, Y_{12}(R)} \frac{\sin^2 KR}{K^2R^2}} \qquad 7.2.$$

Konstanta C se odredi iz uslova da u oblasti malih talasnih vektora $(\vec{k})$ $\varepsilon_1(\vec{k})_{k\simeq 0}$ bude linearno, tj. linearni zakon disperzije

$$C = E_1(0) \qquad 7.3.$$

Konačni oblici izraza za disperziju su:

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = E_1(0)\sqrt{1 - \frac{\sin^2 KR}{K^2R^2}} \qquad 7.4.$$

$$\varepsilon_2(\vec{k}) = E_2(0)\sqrt{1 - \left\{\frac{E_1(0)\left[1 + \frac{D G_{11} Y_{11}(R)}{E_1(0)}\right]^2}{D\, G_{12}\, Y_{12}(R)}\right\}\left(\frac{\sin KR}{KR}\right)^2} \qquad 7.5.$$

Sada dolazi analiza izraza (7.4.) i (7.5.).
Pošto je za male vrednosti k

$$\frac{\sin KR}{K\,R} \simeq 1 - \frac{1}{3} R^2K^2$$

$$\frac{\sin^2 KR}{K^2R^2} \simeq 1 - \frac{2}{3} R^2K^2 \qquad 7.6.$$

a to znači da za male vrednosti k imamo:

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = \hbar\, u\, k \qquad 7.7.$$

gde je

$$u = \sqrt{\frac{2}{3}}\, \frac{R\, E_1(0)}{\hbar}$$

brzina eksitacija.

Spektar za $\varepsilon_2(\vec{k})$ nije definisan za sve vrednosti k, što se vidi iz (7.5.), već samo za one vrednosti za koje je:

$$\frac{\sin^2 RK}{R^2K^2} \leq \frac{D^2 G_{12}^2 Y_{12}^2(R)}{\left(E_1(0) + D\, G_{11} Y_{11}(R)\right)^2} \qquad 7.8.$$

Kao što vidimo, fundamentalnu ulogu u karakteru i mogućnostima rešenja igraju funkcije $Y_{\mu\nu}(\vec{r})$. Analiziraćemo njihov oblik, pošto se odredjuju iz jednačine (6.20.).

Tu postoje dve mogućnosti

$$\begin{aligned} &a. \quad k_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2 > 0 \\ &b. \quad k_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2 < 0 \end{aligned} \qquad 7.8'.$$

Uvodimo oznaku:

$$|k_0^2 + Q_{\mu\nu}^2 - P_{\mu\nu}^2| = \Pi_{\mu\nu}^2 \qquad 7.9.$$

pa je u slučaju

$$a. \quad Y_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{\lambda}\ \frac{e^{-i\vec{\lambda}\vec{r}}}{\lambda^2 - \Pi_{\mu\nu}^2} \qquad 7.10.$$

dok u slučaju

$$b. \quad Y_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{\lambda}\ \frac{e^{-i\vec{\lambda}\vec{r}}}{\lambda^2 + \Pi_{\mu\nu}^2} \qquad 7.11.$$

Razmotrimo slučaj a., tj. jednačinu 7.10.

$$Y_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{\lambda}\ \frac{e^{-i\vec{\lambda}\vec{r}}}{\lambda^2 - \Pi_{\mu\nu}^2} = \frac{1}{2\pi^2 r}\, J_a$$

gde je

$$J_a = \int_0^\infty d\lambda\ \frac{\lambda \sin r\lambda}{\lambda^2 - \Pi_{\mu\nu}^2} \qquad 7.12.$$

Nakon razmatranja konturnog integrala

$$\oint_L dz\ \frac{z\, e^{irz}}{z^2 - \Pi_{\mu\nu}^2} = 0 \qquad 7.13.$$

dobijamo vrednost za integral J_a (7.12.)

$$J_a = \frac{\pi}{2} \cos \Pi_{\mu\nu} r \qquad 7.14.$$

Znači u slučaju

a. $$Y^{(a)}_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{\cos \Pi_{\mu\nu} r}{4\pi r}$$

7.15.

b. $$Y^{(a)}_{\mu\mu}(\vec{r}) = \frac{\cos k_0 r}{4\pi r}$$

Razmotrimo sada slučaj b.,tj. jednačinu (7.11.):

$$Y_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{\lambda}\, \frac{e^{-i\vec{\lambda}\vec{r}}}{\lambda^2 + \Pi^2_{\mu\nu}} = \frac{1}{2\pi^2 r} J_b \qquad 7.16.$$

gde je

$$J_b = \int_0^\infty \frac{\lambda \sin r\lambda}{\lambda^2 + \Pi^2_{\mu\nu}}\, d\lambda \qquad 7.17.$$

Razmatrajmo konturni integral:

$$\oint_L dz\, \frac{z\, e^{irz}}{z^2 + \Pi^2_{\mu\nu}} = 2\pi i\, R_{es}' \frac{z\, e^{irz}}{z^2 + \Pi^2_{\mu\nu}} \qquad 7.18.$$

gde je $z = i\Pi_{\mu\nu}$

Nakon integriranja po konturama za integral J_b(7.17.) dobijamo

$$J_b = \frac{\pi}{2} e^{-\Pi_{\mu\nu} r} \qquad 7.19.$$

Znači,u slučaju b.

$$\Upsilon^{(b)}_{\mu\nu}(\vec{r}) = \frac{e^{-\Pi_{\mu\nu} r}}{4\pi r}$$

$$\Upsilon^{(b)}_{\mu\mu}(\vec{r}) = \frac{\cos k_0 r}{4\pi r} \qquad 7.20.$$

Sada prelazimo na procenu nekih veličina za tronivosku elektronsku šemu.

Posmatrajmo jednačinu (4.12.) koja glasi:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = \frac{\Phi_{11} + \Phi_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Phi_{11} - \Phi_{22}}{2}\right)^2 \Phi_{12}\,\Phi_{21}} \qquad 7.21.$$

gde su funkcije Φ_{11}, Φ_{12}, Φ_{21}, Φ_{22} date relacijama (4.13.)

Za rešenje jednačine (7.21.) imamo dva uslova:

$$1^* \quad \left(\frac{\Phi_{11} - \Phi_{22}}{2}\right)^2 >> \Phi_{12}\,\Phi_{21}$$

$$2^* \quad \left(\frac{\Phi_{11} - \Phi_{22}}{2}\right)^2 << \Phi_{12}\,\Phi_{21} \qquad 7.22.$$

U slučaju (1*) imamo da je :

$$E_1(\vec{k}) = E_1(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}$$

$$E_2(\vec{k}) = E_2(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \qquad 7.23.$$

gde je:

$$E_1(0) = \Delta_1 - 3|W_1| \qquad E_2(0) = \Delta_2 - 3|W_2| \qquad 7.24.$$

m_1 i m_2 su efektivne eksitonske mase koje zadovoljavaju jednačinu:

$$m = \frac{m_1 + m_2}{2} \simeq \frac{\hbar^2(|W_1 + W_2|)}{2a^2|W_1||W_2|} \qquad 7.25.$$

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ - energija eksitona u aproksimaciji efektivne mase

Pri izvodjenju formule (7.24.) i (7.25.) korišćene su sledeće relacije:

$$W_{12} = W \; ; \quad W_{11} = W_1 \; ; \quad W_{22} = W_2$$

$$W_{11} = -|W_1| \; ; \quad W_{22} = -|W_2| \qquad 7.26.$$

radi dobijanja pozitivne eksitonske mase.

Za ovaj uslov treba još da nadjemo funkciju $G_{\mu\nu}$ definisanu jednačinom (6.10.), koja figuriše u jednačini (7.5.). Za ovaj slučaj imamo sledeće vrednosti:

$$G_{11} = \Delta_2^2 \; ; \quad G_{12} = G_{21} = W^2 \; ; \quad G_{22} = \Delta_1^2 \qquad 7.27.$$

pri čemu su korišćene relacije:

$$\Theta_{11}(0) = \frac{W}{\Delta_2 - \Delta_1} \; ; \quad \Theta_{22}(0) = -\frac{W}{\Delta_2 - \Delta_1}$$

$$\Theta_{12} = \Theta_{21} = 1 - \frac{1}{2}\frac{W^2}{(\Delta_2 - \Delta_1)^2} \qquad 7.28.$$

kao i relacije date jednakostima (7.26.).

Razmotrimo sada slučaj (2*), gde dobijamo da je

$$E_1(\vec{k}) = E_1(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}$$
$$E_2(\vec{k}) = E_2(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \qquad 7.29.$$

Za $E_1(0)$ i $E_2(0)$ važe relacije (7.24.), dok za m_1 i m_2 sledeće

$$m_1 = \frac{\hbar^2}{a^2(|W_1|+|W_2|-2W)}$$
$$m_2 = \frac{\hbar^2}{a^2(|W_1|+|W_2|+2W)} \qquad 7.30.$$

za $(|W_1|+|W_2|) >> W$ važi

$$m = \frac{\hbar^2}{a^2(|W_1|+|W_2|)} \qquad 7.31.$$

gde je $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ - energija eksitona u aproksimaciji efektivne mase

m_1 i m_2 - efektivne eksitonske mase

W_1, W_2, W - matrični elementi operatora dipol-dipol interakcije za najbliže susede.

Na osnovu relacija (7.28.), za funkciju $G_{\mu\nu}$ (6.10.) u ovom slučaju dobijamo

$$G_{11} = G_{22} = \left(\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2}\right)^2 \qquad 7.32.$$

$$G_{12} = G_{21} = \left(\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2}\right)^2 \qquad 7.32.$$

Pošto imamo sve veličine koje figurišu u relacijama za energetski spektar (7.4.) i (7.5.) možemo preći na odredjivanje njihovih vrednosti:

slučaj a.

$$\begin{aligned} E_2(0) &= 4{,}73\cdot 10^{-12}\ (\mathrm{erg}) \\ E_1(0) &= 5{,}92\cdot 10^{-12}\ (\mathrm{erg}) \\ D &= 2\cdot 10^{22}\ (\mathrm{cm}) \\ G_{11} &= 24{,}7\cdot 10^{-24}(\mathrm{erg}^2) \\ G_{12} &= 0{,}01\cdot 10^{-24}(\mathrm{erg}^2) \\ Y_{11} &= 1{,}01\cdot 10^{+4} \\ Y_{12} &= 0{,}31\cdot 10^{-106} \\ R &= 7{,}85398\cdot 10^{-6}\ (\mathrm{cm}) \\ k &= \{0, 10^8\} \end{aligned} \qquad 7.33.$$

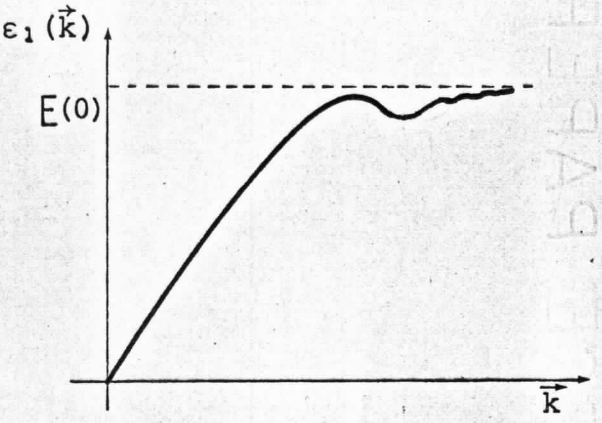
slučaj b.

$$\begin{aligned} E_2(0) &= 4{,}215\cdot 10^{-12}(\mathrm{erg}) \\ E_1(0) &= 4{,}815\cdot 10^{-12}(\mathrm{erg}) \\ D &= 2\cdot 10^{22}\ (\mathrm{cm}) \\ G_{11} &= 23{,}77\cdot 10^{-24}(\mathrm{erg}^2) \\ G_{12} &= 1{,}01\cdot 10^{-24}(\mathrm{erg}^2) \\ Y_{11} &= 1{,}01\cdot 10^{+4} \\ Y_{12} &= 1{,}444\cdot 10^{-48} \\ R &= 7{,}85398\cdot 10^{-6}(\mathrm{cm}) \\ k &= \{0, 10^8\} \end{aligned} \qquad 7.34.$$

Lako je videti da energetski spektar (7.4.) $\varepsilon_1(\vec{k}) \sim E_1(0)$ zadovoljava uslov superfluidnosti

$$\min \frac{\varepsilon_1(\vec{p})}{p} <> 0$$

što se grafički može predstaviti (sl. 2.).



slika 2.

Energetski spektar (7.5.) $\varepsilon_2(\vec{k}) \sim \sqrt{-\infty}$ ne ispunjava uslov superfluidnosti. Rešenje za energiju je imaginarno, što znači da se ta grana prigušuje.

VIII.1. ZAKLJUČAK

U GLAVI I rada izloženi su u osnovnim crtama Frenkelovi eksitoni,fononi i eksiton-fonon interakcija (standardni i novi prilaz)

U GLAVI II analizirana je mogućnost superfluidnosti optičkim pobudjenjem za multinivosku eksitonsku šemu uslovljenu eksiton-fonon interakcijom.

Konkretno je razmatrana tronivoska eksitonska šema (jedan osnovni i dva pobudjena nivoa).

Rezultate možemo rezimirati ukratko na sledeći način:

Efektivna eksiton-eksiton interakcija koja je posledica virtuelne razmene fonona dovodi do stvaranja eksitonskih kaplji.

Spektar jedne grane optičkih pobudjenja koji nastaje dezintegracijom eksitonske kaplje je superfluidan,jer poseduje fononski deo za male impulse i rotonski minimum,dok se druga grana u potpunosti prigušuje.

Ovaj efekat je vrlo interesantan kako u fizici čvrstog stanja,tako i za biofiziku,obzirom da smo posmatrali sistem sa dipol-dipol interakcijom koji je dominantan u biološkim sistemima.

VIII.2. LITERATURA

{1} В.М.Агранович:"Теория экситонов",Изд. "Наука", Москва,(1968).

{2} А.С.Давыдов: "Квантовая механика",Изд. Ф.М., Москва,(1963).

{3} А.С.Давыдов: "Теория молекулярных экситонов", Изд. Ф.М.,Москва,(1968).

{4} D.I.Lalović,B.S.Tošić and R.B.Žakula,Phys.Rew. 178,№ 3.,1472-1479,(1969).

{5} S.D.Stojanović,M.J.Škrinjar and B.S.Tošić: Phys.Letters,59A,5,(1976).

{6} D.V.Kapor,S.D.Stojanović,M.J.Škrinjar and B.S. Tošić: Phys.Stat.Sol.,74,103,(1976).

{7} S.D.Stojanović,J.P.Šetrajčić,M.J.Škrinjar and B.S.Tošić: Phys.Stat.Sol.(b),79,433,(1977).