

UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATICKI FAKULTET

GRUPA: FIZIKA

PEŠTA B. DRAGAN

EKSITONSKE KAPLJE KAO POSLEDICA

EKSITON-FONON INTERAKCIJE I

EKSITONSKA REPULZIJA

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD 1977.

NAJ SRDAČNIJE SE ZAHVALJUJEM Dr. MARIJU ŠKRINJAR
KOJI MI JE PREDLOŽIJO OVU TEMU I RUKOVODIJO NJENOM IZRADOM.

U V O D

Cilj ovog diplomskog rada jeste razmatranje sistema eksitona u interakciji sa fononima u molekulskim kristalima. Po analogiji sa teorijom super-provodnosti, gde elektron-fonon interakcija dovodi do stvaranja kuplerovskih parova, ovdje ćemo razmotriti mogućnost stvaranja eksitonskih kaplji kao posledicu eksiton-fonon interakcije.

U tom cilju izvršit ćemo Frelihovu transformaciju hamiltonijana eksiton plus polje transferzalnih fonona i ispitati ćemo spektar nastalih eksitacija.

Pored toga ispitati ćemo kakav je uticaj Kulonovskog odbijanja među eksitonima na formiranje eksitonskih kaplji.

I E K S I T O N I

Optička pobuđenja koja su indukovana svjetlošću u molekulskim kristalima i kristalima poluprovodnika nazvana su eksitonii.

Eksitonii se javljaju u kristalima kao posledica dipol-dipol interakcije čiji matrični element ima oblik:

$$W_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{e^2}{(\vec{n}-\vec{m})^3} \left\{ \xi_{\vec{n}} \xi_{\vec{m}} - 3 \frac{[\xi_{\vec{n}}(\vec{n}-\vec{m})][\xi_{\vec{m}}(\vec{n}-\vec{m})]}{(\vec{n}-\vec{m})^2} \right\} \quad / \text{I-1} /$$

a- Eksitonii koji se javljaju u poluprovodničkim kristalima predstavljaju neutralan kompleks elektrona u provodnoj i šupljine u valentnoj zoni koji su povezani Kulonovom silom interakcije $/F \sim \frac{e^2}{r^2}/$.

Ovaj neutralni kompleks se "valja" kroz kristal, tako da radijus ovih eksitona dostiže i nekoliko mikrona / eksitonii velikog radijusa /. Usled povišene temperature ili spoljašnjeg el. polja, dolazi do kidanja /dekuplovanja/ kompleksa elektron-šupljina i elektron i šupljina se dalje kreću kroz kristal nezavisno, usled čega dolazi do provođenja električne struje.

Eksitonii koji se javljaju u kristalu poluprovodnika nazivaju se eksitonii Vanija-Mota.

b- Eksitonii koji se javljaju u molekulskim kristalima nazivaju se Frenkelovi eksitonii.

Ovi eksitonii takođe predstavljaju neutralni kompleks elektron-šupljina koji ostaje lokalizovan na samom molekulu. Radijus ovih eksitona je mali, svega nekoliko angstrema. Eksitonii Frenkela mogu nastati na dva načina:



1. Eksiton koji nastaje kao rezultat pobudjenja elektronskog podsistema u molekulu /energija eksitacije je 3-5 e.v./.

Ovaj eksiton se naziva Kulonov eksiton.

2. Vibron, eksiton koji nastaje kao posledica promene stanja unutar molekulskih vibracija /energija eksitacije 0,5ev./.

U daljem radu posmatrat ćemo samo Kulonove eksitone i zvat ćemo ih dalje jednostavno eksitonima.

Optički pobuđen kristal možemo tretirati kao sistem fermiona sa dvočestičnom interakcijom. Lokalizacija eksitona u molekulu dozvoljava nam da integraciju pri izračunavanju matričnog elementa po celom kristalu zamenimo integracijom po elementarnoj ćeliji u kojoj se eksitirani molekul nalazi.

Hamiltonian fermiona sa dvočestičnom interakcijom ima sledeći oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \quad / \text{I-2} /$$

$H_{\vec{n}}$ - Hamiltonian izolovanog molekula na čvoru \vec{n} .

$W_{\vec{n}\vec{m}}$ - Operator dipol-dipol interakcije na čvorovima \vec{n} i \vec{m} .

U reprezentaciji druge kvantizacije ovaj hamiltonian ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}\lambda} E_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda}^+ + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4) a_{\vec{n}\lambda_1}^+ a_{\vec{m}\lambda_2}^+ a_{\vec{m}\lambda_3}^+ a_{\vec{n}\lambda_4}^-$$

$$E_{\vec{n}\lambda} = \int \hat{\varphi}_{\vec{n}}^\lambda H_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}}^\lambda d\tau_{\vec{n}}$$

$$W_{\vec{n}\vec{m}} = \int \hat{\varphi}_{\vec{n}}^{\lambda_1} \hat{\varphi}_{\vec{m}}^{\lambda_2} W_{\vec{n}\vec{m}} \varphi_{\vec{m}}^{\lambda_3} \varphi_{\vec{n}}^{\lambda_4} d\tau_{\vec{n}} d\tau_{\vec{m}}$$

$$H_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}}^\lambda = E_{\vec{n}\lambda} \varphi_{\vec{n}}^\lambda$$

/ I-3 /

a_n^+ i a_n -operatori kreacije i anihilacije elektrona "n"
u kvantnomehaničkom stanju λ .

λ -označava skup kvantnih brojeva u molekulu.

Ψ -svojstvena funkcija hamiltonijana izolovanog molekula.

E_n -energija elektrona u stanju "n".

T_n -zapremina elementarne čelije po kojoj se vrši integracija.
U daljem izlaganju smatrat ćemo da se prilikom interakcije
svetlosti i kristala pobuduje samo jedan elektronski nivo
u molekulu, tako da se elektron može naći u dva stanja:

1. osnovnom /0/

2. pobuđenom /f/

Tada $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ i λ_4 mogu da uzimaju samo dve vrednosti
/0/ i /f/.

Ova aproksimacija je moguća:

1. Ako se pobuđivanje vrši monohromatskom svetlošću.
2. Ako su svi energetski nivoi dosta udaljeni od prvog
pobuđenog nivoa /verovatnoća prelaza za prvo pobudeno
stanje je mnogo veća od verovatnoće prelaza za ostala
pobudena stanja $W/f \sim 1$.

Posle ove aproksimacije eksiton nastaje kada kvant svetlosti
prebaci elektron iz stanja /0/ u stanje /f/, a pošto su
elektroni povezani poljem interakcije W_{nm} , eksitacije se prenose
na susedne molekule i tako nastaje talas pobudjenja,
/eksitonski talas/.

Uvedimo sada operatore:

$P_n^+ = a_{nf}^+ a_{no}^-$ -operator koji prebacuje elektron iz osnovnog
stanja /0/ u pobuđeno stanje /f/ /kreira eksiton/.

$P_{\vec{n}} = a_{\vec{n}f}^{\dagger} a_{\vec{n}f}$ - Operator koji prebacuje elektron iz stanja /f/ u stanje /0/ /anihilira eksiton/.

Ovi operatori ne pokoravaju se ni Fermi ni Boze komutacionim relacijama. Oni predstavljaju sredinu između te dve vrste operatora sa sledećim komutacionim relacijama:

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

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

$$P_{\vec{n}}^2 = P_{\vec{n}}^{+2} = 0$$

$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = a_{\vec{n}f}^{\dagger} a_{\vec{n}f} = 0 \quad i/i: 1$$

Ovako uvedeni operatori $P_{\vec{n}}$ i $P_{\vec{n}}^+$ nazivaju se Paulijevi operatori.

Koristeći komutacione relacije koje važe za ove operatore i metod približne druge kvantizacije /PDK/ koji je predložio Bogoliubov, hamiltonian /I-3/ dobija oblik:

$$\begin{aligned} H = & E_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} [P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}] + \sum_{\vec{n}\vec{m}} J_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \end{aligned} \quad / I-5 /$$

gde je:

$$E_0 = N [E_0 + \frac{1}{2} W_0(0000)] ; \quad W_0(f,f_2f_3f_4) = \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} (f,f_2f_3f_4)$$

$$\Delta = E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}0} - W_0(0000) + \frac{1}{2} W_0(f00f) + \frac{1}{2} W_0(0ff0)$$

$$2I_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{n}\vec{m}} (f0f0) + W_{\vec{n}\vec{m}} (0ff0) \quad / I-6 /$$

$$\beta_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{n}\vec{m}} (ff00) = W_{\vec{n}\vec{m}} (00ff)$$

$$2J_{\vec{n}\vec{m}} = W_{\vec{n}\vec{m}} (ffff) + W_{\vec{n}\vec{m}} (0000) - W_{\vec{n}\vec{m}} (f00f) - W_{\vec{n}\vec{m}} (0ff0)$$

Napomena:

Metod približne druge kvantizacije /PDK/ se sastoji u tome što se hamiltonijan čestica koje jako interaguju /elektron-elektron/ zameni ekvivalentnim hamiltonijanom kvazi čestica koje slabo interaguju /eksiton/. Prelaz se vrši tako što se sume u hamiltonijanu /I-3/ razviju po sledećoj šemi:

	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
I	0	0	0	0
II	f	f	0	0
III	f	0	f	0
IV	f	0	0	f
V	0	f	f	0
VI	0	0	f	f
VII	0	f	0	f
VIII	f	f	f	f

Šema 1.

Ako kristal ima centar inverzije, što smo mi i predpostavili, i ako se centar poklapa sa centrom inverzije samog molekula, tada su članovi hamiltonijana proporcionalni sa $W(f000)$ i $W(f\bar{f}0)$ jednaki nuli.

Poslednja dva sabirka u hamiltonijanu /I-5/ se mogu zanemariti, jer u slučaju malog broja eksitona, proces nastanka ili nestanka dva eksitona na različitim mjestima u kristalu je malo verovatan te za ovaj slučaj dobija se hamiltonijan u obliku /Haitler+Londonova aproksimacija/:

$$H = \epsilon_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}} P_{\vec{m}} \quad / I-7 /$$

Koristeći vezu između Pauli i Bože operatora koja je data:

$$P_{\vec{n}} = \left[\sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(1+v)!} B_{\vec{n}}^{+v} B_{\vec{n}}^v \right]^{\frac{1}{2}} B_{\vec{n}}$$

$$P_{\vec{n}}^+ = \left[\sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(1+v)!} B_{\vec{n}}^{+v} B_{\vec{n}}^v \right]^{\frac{1}{2}} B_{\vec{n}}^+$$

$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = N(P)$$

$$N(P) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-2)^v}{(1+v)!} B_{\vec{n}}^{+v} B_{\vec{n}}^{v+1}$$

/ I-8 /

$N(P)$ -operator broja paulijona,

moguće je u hamiltonijanu /I-7/ preći na Boze operatore.

Iz relacije /I-8/ u slučaju malog broja eksitona /slaba eksitacija/, možemo približno pisati:

$$P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} ; P_{\vec{n}}^+ = B_{\vec{n}}^+ ; P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} \quad / I-9 /$$

Ova aproksimacija unosi i izvesnu grešku, ma koliko da je mali broj eksitona. To se može videti iz trećeg člana u izraza /I-8/.

$$\begin{aligned} N(P) &= B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} - B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} = B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} - B_{\vec{n}}^+ (B_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ - 1) B_{\vec{n}} = \\ &= N_{\vec{n}} - N_{\vec{n}} (N_{\vec{n}} - 1) \end{aligned}$$

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

Posle ove aproksimacije hamiltonijan /I-7/ dobija oblik u približnoj drugoj kvantizaciji:

$$H = \epsilon_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} \quad / I-10 /$$

Koristeći Furie-transformaciju

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}} \quad B_{\vec{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ e^{-i \vec{k} \cdot \vec{n}} \quad / I-11 /$$

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

dobija se hamiltonijan /I-10/ u dijagonilizovanom obliku:

$$H = \epsilon_0 + \sum_{\vec{k}} [\Delta + I_{\vec{k}}] B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \quad / \text{I-12} /$$

Iz hamiltonijana /I-12/ dobija se disperzija eksitona u obliku:

$$E(\vec{k}) = \frac{\partial H}{\partial B_{\vec{k}}^+ \partial B_{\vec{k}}} = \frac{\partial}{\partial B_{\vec{k}}^+ \partial B_{\vec{k}}} \left\{ \epsilon_0 + \sum_{\vec{k}} [\Delta + I_{\vec{k}}] B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \right\} \quad / \text{I-13} /$$

$$E(\vec{k}) = \Delta + I_{\vec{k}}$$

Koristeći sledeće aproksimacije:

1. $I_{\vec{k}}$ zavisi samo od analitičkog dela dipol-dipol interakcije.
2. Koristimo samo dipol-dipol interakciju najbliži suseda /dipol-dipol interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja/.
3. Posmatranja se odnose na kristal proste kubne strukture, i za male talasne vektore.

Iz ovih aproksimacija dobija se vrednost za matrični element interakcije $I_{\vec{k}}$ u obliku:

$$I_{\vec{k}} = 2I(\cos(\vec{k}_x \cdot \vec{a}) + \cos(\vec{k}_y \cdot \vec{a}) + \cos(\vec{k}_z \cdot \vec{a})) \quad / \text{I-14} /$$

I - je vrednost matričnog elementa interakcije za najbliže susede.

Za male vrednosti talasnog vektora možemo izraz /I-14/ razviti u red:

$$I_{\vec{k}} = \epsilon I + I \alpha^2 \vec{k}^2 \quad / \text{I-15} /$$

pa je

$$E(\vec{k}) = \Delta + I_{\vec{k}} = \Delta + 6I + I \alpha^2 \vec{k}^2 \quad / \text{I-16} /$$

$$E(\vec{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$$

m^* - efektivna masa eksitona.

Izraz /I-16/ predstavlja energiju čestice mase m^* .

Zaključak koji se nameće posle gornjih aproksimacija je sledeći:

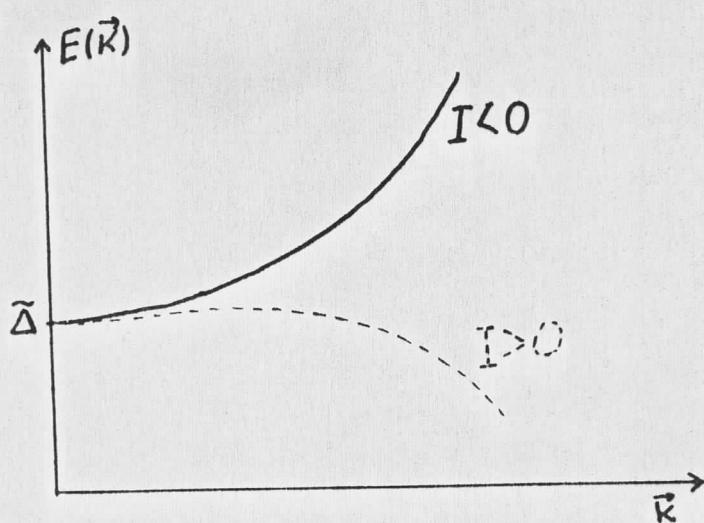
Eksiton se ponaša kao kvazičestice čija je masa:

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2\alpha I} \quad / \text{I-17} /$$

Znak m^* zavisi samo od znaka matričnog elementa interakcije.

Ako je $I < 0$ /u slučaju privlačenja/ m^* je veće od nule.

U ovom slučaju grafik disperzije eksitona je dat na sl. 1.



sl. 1.

II FONONI

U kristalu gde je dominantna dvočestična interakcija potencijalna energija je data u obliku:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad / \text{II-1} /$$

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

Na temperaturi većoj od apsolutne nule vektori čvorova dobijaju određene priraštaje.

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_n \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}_m \quad / \text{II-2} /$$

\vec{u}_n i \vec{u}_m su priraštaji vektora čvorova \vec{n} i \vec{m} zbog povišene temperature.

Priraštaji \vec{u}_n i \vec{u}_m su mali u odnosu na vektore \vec{n} i \vec{m} , tako da potencijalnu energiju kristala možemo razviti u red:

$$\begin{aligned} U = & \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V[(\vec{n} - \vec{m}) + (\vec{u}_n - \vec{u}_m)] = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}, \perp A} (\vec{u}_n^A - \vec{u}_m^A) \frac{\partial}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_A} V(\vec{n} - \vec{m}) + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{m}, \perp B} (\vec{u}_n^A - \vec{u}_m^A)(\vec{u}_n^B - \vec{u}_m^B) \frac{\partial}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_A} \times \\ & \times \frac{\partial}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_B} V(\vec{n} - \vec{m}) \end{aligned} \quad / \text{II-3} /$$

$$\perp, B = X, Y, Z.$$

\vec{u}_n^A i \vec{u}_m^A su projekcije vektora \vec{u}_n i \vec{u}_m na A -osu.

Kako funkcija $V(\vec{n} - \vec{m})$ mora imati ekstrem izmedu čvorova to je za sve \vec{n}, \vec{m} i A :

$$\frac{\partial}{\partial (\vec{n} - \vec{m})_A} V(\vec{n} - \vec{m}) = 0 \quad / \text{II-4} /$$

Drugi izvod koji figuriše u izrazu /II-3/ označit ćemo sa:

$$\Lambda_{LB}(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_1 \partial(\vec{n}-\vec{m})_2} . \quad / \text{II-5} /$$

Funkcija $\Lambda_{LB}(\vec{n}-\vec{m})$ ima sledeće osobine:

$$\Lambda_{LB}(\vec{n}-\vec{m}) = \Lambda_{BL}(\vec{n}-\vec{m}) = \Lambda_{LB}(\vec{m}-\vec{n}) = \Lambda_{BL}(\vec{m}-\vec{n}) .$$

Ako odbacimo prvi član u izrazu /II-3/ koji predstavlja potencijalnu energiju zamrznutog kristala koja je konstantna, tada potencijalna energija usled povišene temperature ostaje:

$$U_{fm} = \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}, \vec{m} \in LB} \Lambda_{LB}(\vec{n}-\vec{m})(\vec{u}_n - \vec{u}_m)(\vec{u}_n - \vec{u}_m) \quad / \text{II-6} /$$

Koristeći aproksimaciju najbližih suseda gde je \vec{v} vektor koji spaja najbliže susede, i koji ima konstantnu vrednost, dobijamo:

$$\Lambda_{LB}(\vec{n}-\vec{m}) \rightarrow \Lambda_{LB}(v) \equiv \Lambda_{LB} \quad \begin{matrix} \vec{v} = \vec{n} - \vec{m} \\ \vec{m} = \vec{n} + \vec{v} \end{matrix} \quad / \text{II-7} /$$

λ -komponenta sile na n-ti čvor data je:

$$F_n^\lambda = -\frac{\partial U_{fm}}{\partial \vec{u}_n} = -\frac{1}{4} \sum_B \Lambda_{LB} \sum_{\vec{v}} (\vec{u}_n - \vec{u}_m) \quad / \text{II-8} /$$

Na osnovu II Njutnovog zakona možemo pisati:

$$M \ddot{\vec{u}}_n^\lambda = F_n^\lambda = -\frac{1}{4} \sum_B \Lambda_{LB} \sum_{\vec{v}} (\vec{u}_n - \vec{u}_{n+\vec{v}}) \quad / \text{II-9} /$$

M -masa atoma

Uz pretpostavku da je \vec{u}_n^λ periodična funkcija prostora i vremena koja ima oblik:

$$\vec{u}_n^\lambda = A^\lambda e^{i\vec{k}\cdot\vec{n} - iw_\lambda t} \quad / \text{II-10} /$$

Zamenom u relaciju /II-9/ izraza /II-10/ dobijamo sledeći

sistem homogenih jednačina za određivanje komponenata atomskih pomeraja:

$$[\Lambda_{xx} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2] \vec{U}_n^x + \Lambda_{xy} \vec{U}_n^y + \Lambda_{xz} \vec{U}_n^z = 0$$

$$\Lambda_y \vec{U}_n^x + [\Lambda_{yy} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2] \vec{U}_n^y + \Lambda_{yz} \vec{U}_n^z = 0$$

$$\Lambda_z \vec{U}_n^x + \Lambda_{zy} \vec{U}_n^y + [\Lambda_{zz} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2] \vec{U}_n^z = 0$$

gde je

$$f_k = \sum_{\nu} (1 - e^{i \vec{k} \cdot \vec{\nu}})$$

/ II-12 /

Da bi sistem /II-11/ imao netrivialna rešenja za \vec{U}_n^x različito od nule, determinanta sistema /II-11/ mora biti jednaka nuli. Rešenjem determinante sistema dobijaju se tri dozvoljene frekvencije fonona u pravcu tri različite ose /x,y,z/. Ako se ograničimo na jednodimenzionalni kristal sa parametrom rešetke $a=\nu$ tada je:

$$f_k = 1 - e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}} + 1 - e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}} = 4 \sin^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{a}}{2}$$

/ II-13 /

$$\Lambda_{xx} - \frac{M}{f_k} \omega_k^2 = 0 \Rightarrow \omega_k^2 = 2 \sqrt{\frac{\Lambda_{xx}}{M}} \sin \frac{\vec{a} \cdot \vec{k}}{2}$$

Radi kraćeg pisanja uzmimo da je

$$\Lambda_{xx} \equiv \Lambda \Rightarrow \omega_k^2 = 2 \sqrt{\frac{\Lambda}{M}} \sin \frac{\vec{a} \cdot \vec{k}}{2}$$

/ II-14 /

Za male vrednosti talasnog vektora može se uzeti

$$\sin \frac{\vec{a} \cdot \vec{k}}{2} \approx \frac{\vec{a} \cdot \vec{k}}{2} \Rightarrow \omega_k^2 = C \cdot K \quad C = a \sqrt{\frac{\Lambda}{M}}$$

/ II-15 /

Za jednodimenzionalnu rešetku kinetička energija je data izrazom:

$$T = \frac{M}{2} \sum_n \dot{U}_n^2$$

/ II-16 /

a potencijalna energija jednodimenzionalne rešetke na osnovu izraza /II-6/ za najbliže susede ima oblik:

$$U_{fon} = \frac{1}{2} \sum_n (\vec{U}_{n+1} - \vec{U}_n) . \quad / II-17 /$$

Totalni hamiltonijan sistema je

$$H = T + U_{fon} = \frac{M}{2} \sum_n \dot{U}_n^2 + \frac{1}{2} \sum_n (\vec{U}_{n+1} - \vec{U}_n) . \quad / II-18 /$$

Ako umesto \vec{U}_n , koje je dato relacijom /II-10/ uzmemos linearnu kombinaciju

$$U_n = \sum_k D_k (a_k e^{ik \cdot \vec{n} \cdot \vec{a} - i\omega_k t} + a_k^+ e^{-ik \cdot \vec{n} \cdot \vec{a} + i\omega_k t}) \quad / II-19 /$$

$$D_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_k}} \quad / II-20 /$$

koja takođe zadovoljava diferencijalnu jednačinu /II-9/.

Zamenom relacije /II-19/ u hamiltonijan kuplovanih oscilatora /II-18/, ovaj hamiltonijan se svodi na sumu nezavisnih oscilatora u impulsnom prostoru

$$H = \sum_k (a_k^+ a_k + \frac{1}{2}) \hbar \omega_k . \quad / II-21 /$$

Boze operatori $a_{\vec{k}}$ i $a_{\vec{k}}^+$ anihiliraju i kreiraju fonone na talasnem vektoru \vec{k} . Za male vrednosti talasnog vektora disperzija fonona je linearna /II-15/.

Za trodimenzionalni slučaj determinanta sistema /II-11/ daje tri pozitivne dozvoljene frekvencije za $\omega_{\vec{k}}$.

U slučaju složene kristalne rešetke sa 6 molekula /atoma/ u elementarnoj čeliji, determinanta sistema /II-11/ bila bi složenija i davala bi 36 rešenja za dozvoljene frekvencije fonona.

U slučaju proste čelije sve tri frekvencije dobijene rešavanjem determinante sistema /II-11/ teže nuli kad $\vec{k} \rightarrow 0$ i

takvi fononi se nazivaju akustični fononi.

Kod složene rešetke za tri frekvencije važi isto pravilo
 $(\vec{k} \rightarrow 0 \Rightarrow \omega_{\vec{k}} \rightarrow 0)$, a preostale (36-3) frekvencije su razli-

ćite od nule i takvi fononi se nazivaju optički fononi.

Za slučaj proste prostorne rešetke svakoj od tri akustičke frekvencije odgovara jedan polarizacioni vektor $\vec{\ell}_j(\vec{k})$,

$j=1,2,3$ i ovi vektori zadovoljavaju uslov:

$$\vec{\ell}_j(\vec{k}) \cdot \vec{\ell}_i(\vec{k}) = \delta_{ji}. \quad / \text{III-22} /$$

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

Hamiltonijan sistema i operator pomaka za trodimenzionalnu rešetku možemo sada napisati u obliku:

$$H = \sum_{k_j} (a_{k_j}^+ a_{k_j} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{k_j} \quad j=1,2,3 \quad / \text{III-23} /$$

$$\vec{U}_n = \sum_{k_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{k_j}}} (a_{k_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n} - i\omega_{k_j} t} + a_{k_j}^+ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n} + i\omega_{k_j} t}). \quad / \text{III-24} /$$

III E K S I T O N-F O N O N I N T E R A K C I J A

1. Standardni prilaz eksiton-fonon interakcije

Polazimo od eksitonskog hamiltonijana u harmonijskoj aproksimaciji

$$H = \sum_n \Delta_f B_n^\dagger B_n + \sum_{\vec{n} \vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(foof) B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n} \vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f of o) B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{m}}$$

$$W_{\vec{n}\vec{m}}(foof) = D_{\vec{n}\vec{m}} \quad W_{\vec{n}\vec{m}}(f of o) = M_{\vec{n}\vec{m}} \quad / III-1 /$$

$$H = \sum_n \Delta_f B_n^\dagger B_n + \sum_{\vec{n} \vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n} \vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{m}}.$$

Hamiltonian /III-1/ važi za zamrznut kristal /T=0 °K/.

Za T>0 °K molekuli počinju da osciluju oko ravnotežnog položaja što se može predstaviti

$$\vec{r} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_n \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}}$$

\vec{u}_n i $\vec{u}_{\vec{m}}$ predstavljaju pomeraje iz ravnotežnog položaja.

Za niske temperature intenzitet \vec{u}_n i $\vec{u}_{\vec{m}}$ su mnogo manji od konstante rešetke.

Zbog oscilacija za T>0 °K matrični elementi u hamiltonijanu /III-1/ se menjaju:

$$D_{\vec{n}\vec{m}} \rightarrow D_{\vec{n}-\vec{m} + \vec{u}_n - \vec{u}_{\vec{m}}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{m} + \vec{u}_n - \vec{u}_{\vec{m}})}$$

$$M_{\vec{n}\vec{m}} \rightarrow M_{\vec{n}-\vec{m} + \vec{u}_n - \vec{u}_{\vec{m}}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_3} M_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{m} + \vec{u}_n - \vec{u}_{\vec{m}})} \quad / III-2 /$$

$$B_{\vec{n}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3}^\dagger e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{n}} \quad B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{n}}.$$

Ako matrične elemente i operatore iz /III-2/ zamenimo u hamiltonijan /III-1/ i eksponencijalne funkcije razvijemo u red po fononskim pomerajima s tačnošću do prvog stepena /jednofononski procesi/, dobijamo:



$$\Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} = \frac{\Delta}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{g}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \sum_{\vec{n}} e^{i \vec{n}(\vec{k} - \vec{g})} = \Delta \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \quad / \text{III-3} /$$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} D_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} D_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3) + i(\vec{u}_n \cdot \vec{k}_3 - \vec{u}_m \cdot \vec{k}_3)} \\ &\simeq \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} D_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{n}} e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3)} \cdot \sum_{\vec{m}} e^{-i \vec{m} \cdot \vec{k}_3} + \quad / \text{III-4} / \\ &+ \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} D_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} (\vec{u}_n - \vec{u}_m) e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3) - i \vec{m} \cdot \vec{k}_3}. \end{aligned}$$

Prvi izraz u /III-4/ ne zavisi od pomeraja \vec{u}_n i \vec{u}_m pa se može pisati:

$$\sum_{\vec{k}} D_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} D_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{n}} e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3)} \sum_{\vec{m}} e^{-i \vec{m} \cdot \vec{k}_3}. \quad / \text{III-5} /$$

U drugom delu izraza /III-4/ umesto \vec{u}_n i \vec{u}_m uzimimo njihove vrednosti date izrazom:

$$\begin{aligned} \vec{u}_n &= \sum_{\vec{g}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_{\vec{g}_j}}} \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j} (\alpha_{\vec{g}_j} + \alpha_{\vec{g}_j}^+) e^{-i \vec{g} \cdot \vec{m}} \\ \vec{u}_m &= \sum_{\vec{g}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_{\vec{g}_j}}} \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j} (\alpha_{\vec{g}_j} + \alpha_{\vec{g}_j}^+) e^{-i \vec{g} \cdot \vec{m}} \end{aligned} \quad / \text{III-6} /$$

tada dalje dobijamo

$$\begin{aligned} &\frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} D_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} (\vec{u}_n - \vec{u}_m) e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3) - i \vec{m} \cdot \vec{k}_3} = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{g}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_{\vec{g}_j}}} \cdot (\vec{k} \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j}) D_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2} (\alpha_{\vec{g}_j} + \alpha_{\vec{g}_j}^+) \times \\ &\times \left[\sum_{\vec{n}} e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{g}_j)} \sum_{\vec{m}} e^{i \vec{m} \cdot \vec{k}_3} - \sum_{\vec{n}} e^{i \vec{n}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3)} \sum_{\vec{m}} e^{-i \vec{m} \cdot (\vec{k}_3 + \vec{g}_j)} \right] = \quad / \text{III-7} / \\ &= i \sum_{\vec{k}, \vec{g}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_{\vec{g}_j}}} D_{\vec{g}_j} (\vec{g} \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j}) B_{\vec{k}-\vec{g}}^+ B_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{g}_j} + \alpha_{\vec{g}_j}^+) \\ &\sum_{\vec{n}, \vec{m}} D_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} \rightarrow \sum_{\vec{k}} D_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} + i \sum_{\vec{k}, \vec{g}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_{\vec{g}_j}}} D_{\vec{g}_j} (\vec{g} \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j}) B_{\vec{k}-\vec{g}}^+ B_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{g}_j} + \alpha_{\vec{g}_j}^+). \end{aligned}$$

Na isti način dobija se:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} M_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} &\rightarrow \sum_{\vec{k}} M_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} + i \sum_{\vec{k}, \vec{g}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_{\vec{g}_j}}} \left\{ (\vec{k} \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j}) M_{\vec{k}} + \right. \\ &\left. + [(\vec{k} - \vec{g}) \cdot \vec{l}_{\vec{g}_j}] M_{\vec{k}-\vec{g}} \right\} B_{\vec{k}-\vec{g}}^+ B_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{g}_j} + \alpha_{\vec{g}_j}^+). \end{aligned} \quad / \text{III-8} /$$

Na osnovu relacija /III-3/, /II-23/, /III-7/ i /III-8/ možemo pisati da je ukupni hamiltonijan eksiton plus fonon:

$$H = H_{\text{eks.}} + H_{\text{fon.}} + H_{\text{int.}} \quad / \text{III-9} /$$

gde je:

$$\begin{aligned} H_{\text{eks.}} &= \sum_{\vec{k}} (\Delta + D_0 + M_k) B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \\ H_{\text{fon.}} &= \sum_{\vec{k}, j} (Q_{\vec{k}j}^+ Q_{\vec{k}j} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{\vec{k}j} \\ H_{\text{int.}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, j} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\vec{k}j}}} \left\{ D_{\vec{q}}(\vec{q} \cdot \vec{e}_{\vec{k}j}) + M_{\vec{k}}(\vec{k} \cdot \vec{e}_{\vec{k}j}) + \right. \\ &\quad \left. + M_{\vec{k}-\vec{q}}[(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{e}_{\vec{k}j}] \right\} B_{\vec{k}-\vec{q}} B_{\vec{q}} (Q_{\vec{k}j} + Q_{\vec{k}j}^+) \end{aligned} \quad / \text{III-10} /$$

Treći član u /III-10/ predstavlja standardni izraz za hamiltonijan eksiton-fonon interakcije u linearnej aproksimaciji po malim pomacima.

2. Novi prilaz eksiton-fonon interakciji

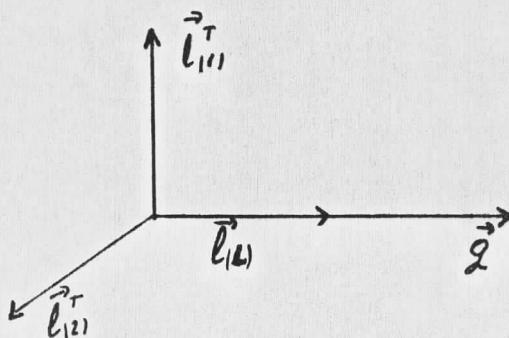
Kod standardnog prilaza eksiton-fonon interakcije, po malim pomerajima razvijali smo u red samo matrične elemente $D_{\vec{n}\vec{m}}$ i $M_{\vec{n}\vec{m}}$ dok u novom prilazu /viđ. 3/ razvijamo i operatore $B_{\vec{n}}^+$ i $B_{\vec{n}}$ do linearnih članova. Tada hamiltonijan /III-1/ posle sledećih transformacija:

$$\begin{aligned} D_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{m}) + i\vec{k}_3(\vec{u}_n - \vec{u}_m)} \\ M_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_3} M_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{m}) + i\vec{k}_3(\vec{u}_n - \vec{u}_m)} \\ B_n^+ \rightarrow B_{\vec{n}+\vec{u}_n}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3}^+ e^{-i\vec{k}_3 \cdot \vec{n} - i\vec{k}_3 \cdot \vec{u}_n} \quad / \text{III-11} / \\ B_m \rightarrow B_{\vec{m}+\vec{u}_m} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3} e^{-i\vec{k}_3 \cdot \vec{m} - i\vec{k}_3 \cdot \vec{u}_m} \end{aligned}$$

dobija oblik:

$$H_{int}^{ef} = \frac{e}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, j} \sqrt{\frac{n}{2m\omega_{kj}}} (\vec{q} \cdot \vec{b}_{kj}) (\Delta + D_0 + D_L + M_k + M_{k-j}) B_{kj} B_{kj} (a_{kj} + a_{kj}^*) / III-12 /$$

Kao što se vidi iz izraza /III-12/ novi prilaz daje daleko jaču eksiton-fonon interakciju jer u njemu figuriše energija izolovanog pobuđenog molekula Δ , koja je mnogo veća od članova D i M . Interakcija postoji samo sa longitudinalnim fononima što se vidi iz člana $(\vec{q} \cdot \vec{b}_{kj})$, dok kod standardnog prilaza interakcija je moguća i sa transferzalnim fononima.



Slika br. 2.

Napomena:

Do istog rezultata za H_{int}^{ef} datim izrazom /III-12/ možemo doći ako umesto razvoja operatora B_n^+ i B_m^- po malim pomacima \vec{u}_n i \vec{u}_m razvijemo δ -potencijal ($U_{nm} = \frac{1}{2} \Delta \delta_{nm}$) koji je takođe funkcija od \vec{u}_n i \vec{u}_m . Tada umesto poslednja dva člana u izrazu /III-11/ koristimo sledeće transformacije:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}} \Delta B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}}^- &\rightarrow \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \Delta \delta_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}^- & / III-13 / \\ \delta_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} & \quad \vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_n \\ & \quad \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{u}_m \end{aligned}$$

gde se δ_{nm} razvija po malim pomacima. Svi razvoji koje smo koristili, idu samo do linearnih članova /jednofononski procesi/.

IV FRELIHOVA TRANSFORMACIJA
EKSION-FONONSKOG POLJA

Kompletan hamiltonijan sistema eksitona i polja mehaničkih oscilacija može se napisati u obliku:

$$H = \sum_{\vec{k}} \lambda(\vec{k}) \cdot B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \beta(\vec{k}) b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{k}} \gamma(\vec{q}, \vec{k}) B_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} B_{\vec{k}} (b_{-\vec{q}} + b_{\vec{q}}^{\dagger}) \quad / \text{IV-1} /$$

$$\lambda(\vec{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad \beta(\vec{k}) = \hbar c \vec{k}$$

$$\gamma(\vec{q}, \vec{k}) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2mcg}} (\vec{q} \cdot \vec{e}_g) (\Delta + D_0 + D_g + M_k + M_{k-q})$$

M - masa jona

a - konstanta kristalne rešetke

c - brzina zvuka

m = $\frac{\hbar^2}{2a^2 M}$ - efektivna masa kvazičestice /eksitona/

B i **b** - su eksitonski i fononski operatori

M = **I** - interakcija **M_R** za najbliže susede.

Frelih je pokazao da elektron-fonon interakcija dovodi do efektivne elektron-elektron interakcije koja je privlačna.

Kao rezultat ovog privlačenja dobijaju se kuperovi parovi koji mogu da se kreću bez trenja kroz kristal. Ovo kretanje nanelektrisani čestica bez trenja poznato je pod imenom superprovodljivost. Sličan način provestćemo i za eksiton-fonon interakciju.

Koristeći unitarnu transformaciju Freliha prećićemo sa hamiltonijana **H** → **H_{eg}**.

$$H_{eg} = e^{-is} H e^{is} \approx H - i[S, H] - \frac{1}{2}[S, [S, H]] + \dots \quad / \text{IV-2} /$$

$$S = \sum_{\vec{q}, \vec{g}} W(\vec{q}, \vec{g}) B_{\vec{q}-\vec{g}}^{\dagger} B_{\vec{q}} (b_{-\vec{g}} + b_{\vec{g}}^{\dagger}) \quad / \text{IV-3} /$$

Nepoznatu funkciju $W(\vec{q}\vec{k})$ odredićemo iz uslova da u izrazu /IV-2/ nestanu članovi linearni po eksiton-fonon interakciji. Tada za funkciju $W(\vec{q}\vec{k})$ dobijamo:

$$W(\vec{q}\vec{k}) = \frac{i}{\sqrt{N}} \frac{\Gamma(\vec{k}\vec{g})}{\lambda(\vec{k}) - \lambda(\vec{k}-\vec{g}) - \beta(\vec{g})} \quad / \text{IV-4} /$$

Tada hamiltonijan $H_{\vec{q}\vec{k}}$ postaje:

$$H_{\vec{q}\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \left[\Delta + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \sum_{\vec{g}} \frac{\Gamma(\vec{q}\vec{k})^2}{\lambda(\vec{k}) - \lambda(\vec{k}-\vec{g}) - \beta(\vec{g})} \right] B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} + \\ + \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4}} \frac{\beta(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) \Gamma(\vec{k}_1; \vec{k}_1 - \vec{k}_3) \Gamma(\vec{k}_2; \vec{k}_3 - \vec{k}_1)}{[\lambda(\vec{k}_1) - \lambda(\vec{k}_3)]^2 - \beta^2(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^+ B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_4, \vec{k}_1, \vec{k}_3, \vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \quad / \text{IV-5} /$$

Iz poslednjeg člana /IV-5/ se vidi da eksiton-fonon interakcija koriguje harmonijski spektar eksitona za član

$$\sum_{\vec{g}} \frac{|\Gamma(\vec{k}\vec{g})|^2}{\lambda(\vec{k}) - \lambda(\vec{k}-\vec{g}) - \beta(\vec{g})} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \quad / \text{IV-6} /$$

i dovodi do efektivne eksiton-eksiton interakcije date izrazom:

$$\sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4}} \frac{\beta(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) \Gamma(\vec{k}_1; \vec{k}_1 - \vec{k}_3) \Gamma(\vec{k}_2; \vec{k}_3 - \vec{k}_1)}{[\lambda(\vec{k}_1) - \lambda(\vec{k}_3)]^2 - \beta^2(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)} B_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_4, \vec{k}_1, \vec{k}_3, \vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \quad / \text{IV-7} /$$

Rezultati dati izrazima /IV-4/, /IV-5/, /IV-6/ i /IV-7/ su dobijeni usrednjavanjem po fononskom vakumu, pa su sve korekcije eksitonskog spektra rezultat spontane emisije fonona. Spontana emisija fonona je rezultat rasejanja eksitona na molekulima kristalne rešetke. Eksiton može da izgubi energiju koja se manifestuje kao stvaranje jednog kvanta mehaničkih oscilacija /fonona/.

Spontana emisija fonona je moguća kada u incijalnom stanju imamo jedan eksiton sa impulsom \vec{k} , dok u finalnom stanju imamo jedan fonon sa impulsom \vec{q} i jedan eksiton sa impulsom $\vec{k} - \vec{q}$.

Ovakav prelaz je moguć samo ako je energija incijalnog stanja jednaka energiji finalnog stanja, što se može napisati:

$$\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{q})^2 + \hbar c \vec{q} \cdot \vec{e}$$

/ IV-8 /

$$\vec{q} = 2\vec{k} \cos \theta - \frac{2mc}{\hbar} \vec{e}.$$

Ako uvedemo brzinu eksitona \vec{v} tada izraz /IV-8/ možemo pisati:

$$\vec{q} = \frac{2m}{\hbar} (\vec{v} \cos \theta - \vec{c}) \quad \vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}.$$

/ IV-9 /

Kako je $\vec{q} > 0$ to na osnovu izraza /IV-9/ za spontanu emisiju fonona mora biti ispunjen uslov:

$$\vec{v} \cos \theta - \vec{c} > 0$$

/ IV-10 /

a to znači da ugao između pravca kretanja eksitona i fonona mora biti u intervalu:

$$0 \leq \theta \leq \arccos \frac{c}{v}.$$

/ IV-11 /

Iz izraza /IV-11/ sledi da je spontana emisija moguća samo ako je brzina eksitona veća od brzine zvuka ($v > c$).

Ako sada potražimo oblik spektra eksitona u uslovima boze kondenzacije, na taj način što ćemo hamiltonijan /IV-5/ razviti na delove koji odgovaraju impulušu nula i impulušu različitom od nule po šemi 2. /metod Bogoliubova/, dolazimo do sledećeg spektra za eksitone:

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{S_{\vec{k}}^2 - T_{\vec{k}}^2}$$

/ IV-12 /

gde je:

$$S_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{m}{\hbar MC} \cdot \frac{(\Delta + D_0 + D_{\vec{q}} + M_{\vec{q}} + M_{\vec{k}-\vec{q}})^2}{\vec{q} - 2\vec{k}(\cos \theta - \frac{c}{\hbar} m)} +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{N_0}{N} \frac{4m^2}{M\hbar^2} \frac{(\Delta + D_0 + D_{\vec{k}} + M_{\vec{k}} + M_0)^2}{k^2 - (\frac{2mc}{\hbar})^2} + \\
 & + \frac{N_0}{N} \left\{ \frac{(\Delta + 2D_0 + 2M_0)^2}{Mc^2} - \right. \\
 & \left. - \frac{(\Delta + 2D_0 + 2M_0)(\Delta + 2D_0 + 2M_{\vec{k}})}{Mc^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{m^2c^2}{2\hbar} \cdot \frac{1}{\frac{m^2c^2}{\hbar} - k^2} \right] \right\}
 \end{aligned} \quad / \text{IV-13} /$$

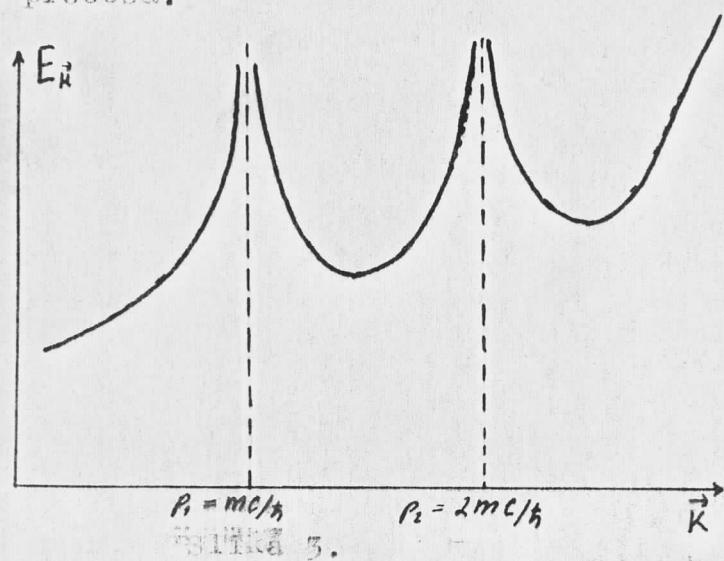
$$T_k = \frac{N_0}{N} \frac{4m^2}{M\hbar^2} \frac{(\Delta + D_0 + D_{\vec{k}} + M_0 + M_{\vec{k}})^2}{k^2 - (\frac{2mc}{\hbar})^2} \quad / \text{IV-14} /$$

Grafički prikaz spektra dat izrazom /IV-12/, dat je na sl. 3.

I	k_1	k_2	k_3	k_4
II	k_1	k_2	0	0
III	k_1	0	k_3	0
IV	k_1	0	0	k_4
V	0	k_1	k_3	0
VI	0	k_2	0	k_4
VII	0	0	k_3	k_4
VIII	0	0	0	0

Šema 2.

Sa slike 3. vidimo da spektar eksitona ima singularitet u okolini impulsa \vec{p}_1 i \vec{p}_2 , što znači da se u okolini ovih vrednosti impulsa eksiton ne kondenzuju već dolazi do nekih drugih procesa.



V O B R A Z O V A N J E E K S I T O N S K I H
K A P L J I

Videli smo u prethodnom delu da u okolini impulsa eksitona $P = \frac{mc}{\hbar}$ i $P = \frac{2mc}{\hbar}$ ne dolazi do kondenzacije eksitona, već se javlja neki drugi konkurentni proces.

Konkurentni proces u okolini ovih impulsa predložio je V. M. Agranović /videti 1./. On je predpostavio da se eksiton sa suprotnim impulsima toliko približe jedan drugome da ostaju vezani u tzv. eksitonske kaplje.

Da bismo ispitali spektar eksitonskih kaplji podimo od hamiltonijana efektivne eksiton-eksiton interakcije:

$$H = \sum_{\vec{k}} \left[\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{m\Delta}{\hbar^2 mc} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\vec{q}^2 - 2(\vec{k} \cos \theta - \frac{mc}{\hbar})} \right] B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} + \\ + \frac{2m^2}{\hbar^2 M} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \frac{1}{(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)^2 + (\frac{2mc}{\hbar})^2} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^+ B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} . \quad / V-1 /$$

Obrazovanje eksitonskih kaplji je moguće samo između eksitona sa suprotno orijentisanim impulsima /videti 4/. Zato ćemo iz hamiltonijana /V-1/ izdvojiti samo onaj deo koji odgovara interakciji eksitona sa suprotno orijentisanim impulsima. Tada efektivni hamiltonijan ima oblik:

$$H_{ef.} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{g}} Y_{\vec{k}-\vec{g}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^+ B_{-\vec{g}} B_{\vec{g}} \quad / V-2 /$$

gde je:

$$X_{\vec{k}} = \Delta + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \frac{m\Delta^2}{\hbar^2 MCN} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\vec{q}^2 - 2(\vec{k} \cos \theta - \frac{mc}{\hbar})} \quad / V-3 /$$

$$Y_{\vec{k}-\vec{g}} = \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2 M} \frac{1}{(\vec{k} - \vec{g})^2 - \vec{k}_0^2} ; \quad k_0 = \frac{2mc}{\hbar} . \quad / V-4 /$$

Precicemo sa operatorm $B_{\vec{g}}$ na nove boza operatorne $b_{\vec{k}}$ kanoničnom transformacijom:

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

/ V-5 /

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

Izdvajajući sve kvadratne članove po operatoru $b_{\vec{k}}$, dobijamo sledeći spektar za eksitacije koje možemo smatrati eksiton-skim kapljama:

$$\mathcal{E}_{k_{\text{opt}}} = \sqrt{X_{\vec{k}}^2 - \phi_{\vec{k}}^2} .$$

/ V-6 /

Funkcija $\phi_{\vec{k}}$ se određuje z i sledеće singularne jednačine:

$$\phi_{\vec{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\phi_{\vec{q}} \cdot y_{\vec{k}-\vec{q}}}{\sqrt{X_{\vec{q}}^2 - \phi_{\vec{q}}^2}} = 0$$

/ V-7 /

$\phi_{\vec{k}}$ -energija veze eksitonske kaplje.

Jednačinu /V-7/ rešit ćemo uz sledeće aproksimacije:

a. Kako je $\Delta \approx 5 \text{ eV}$. znatno veće od ostalih članova

u izrazu /V-3/, to se može uzeti da je $\Delta \approx X_{\vec{k}}$.

b. U vezi sa aproksimacijom a. možemo uzeti da je

$$X(\vec{q}) \gg \phi(\vec{q}) \quad \sqrt{X_{\vec{q}}^2 - \phi_{\vec{q}}^2} \simeq X_{\vec{q}} = \Delta .$$

c. Prelazeći u izrazu /V-7/ sa sume na integral cije

će granice biti $\frac{\pi}{a} \leq \vec{q} \leq \frac{\pi}{a}$, gde je $\vec{q} = x, y, z$, integra-

cija će se vršiti uz aproksimaciju $\frac{\pi}{a} \approx \infty$, tj. po

beskonačnom impulsnom prostoru.

Posle ovih aproksimacija jednačina /V-7/ ima oblik:

$$\phi_{\vec{k}} + A \int d\vec{q} \frac{\phi_{\vec{q}}}{(q - k)^2 - k^2} = 0$$

/ V-8 /

$$A = \frac{2m^2 \Delta}{\hbar M} \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} .$$

/ V-9 /

Koristeći sledeće Furije-transformacije:

$$\phi_{\vec{K}} = \int d^3 p \cdot \phi_{\vec{p}} e^{i \vec{K} \cdot \vec{p}} ; \quad \frac{1}{(\vec{p}^2 - K_0^2)} = \int d^3 p \Psi_{\vec{p}} e^{i \vec{K} \cdot (\vec{p} - \vec{q})} / V-10 /$$

$$\phi_{\vec{p}} = (\frac{1}{2\pi})^3 \int d^3 k \cdot \phi_{\vec{k}} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{p}} ; \quad \Psi_{\vec{p}} = (\frac{1}{2\pi})^3 \int d^3 q \frac{1}{q^2 - K_0^2} e^{-i \vec{q} \cdot \vec{p}}$$

jednačina /V-8/ dobija oblik:

$$\int d^3 p \hat{\phi}_{\vec{p}} e^{i \vec{K} \cdot \vec{p}} - A \int d^3 p d^3 R \hat{\phi}_{\vec{p}} \cdot \Psi_{\vec{R}} e^{-i \vec{K} \cdot \vec{R}} \int d^3 R e^{i \vec{R}(\vec{K} + \vec{q})} = 0$$

$$\int d^3 p \phi_{\vec{p}} e^{i \vec{K} \cdot \vec{p}} - (2\pi)^3 A \int d^3 p \Psi_{\vec{p}} \phi_{\vec{p}} e^{i \vec{K} \cdot \vec{p}} = 0$$

Ako poslednju jednačinu proširimo sa $e^{-i \vec{K} \cdot \vec{r}}$ i integralimo po $d^3 R$ koristeći pri tom relaciju:

$$\int d^3 R e^{i \vec{R}(\vec{p} - \vec{r})} = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{r})$$

dobijamo konačno algebarsku jednačinu:

$$[1 - (2\pi)^3 A \Psi_{\vec{r}}] \phi_{\vec{r}} = 0 . / V-11 /$$

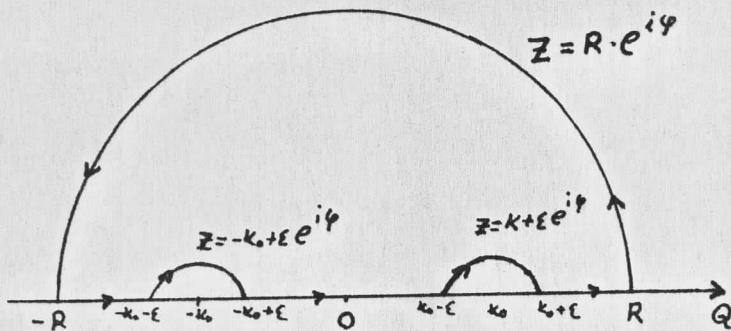
Pre nego što nastavimo dalju analizu jednačine /V-11/ potražimo funkciju $\Psi_{\vec{r}}$ koja na osnovu relacije /V-10/ ima oblik:

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{r}} &= (\frac{1}{2\pi})^3 \int d^3 q \frac{1}{q^2 - K_0^2} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= (\frac{1}{2\pi})^3 \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^\pi \sin\theta \int_0^\pi d\theta \frac{Q^2}{Q^2 - K_0^2} e^{i a r \cos\theta} \\ &= (\frac{1}{2\pi})^2 \int_0^\pi \frac{Q^2 d^3 Q}{Q^2 - K_0^2} \int_0^\pi d\theta e^{i a r x} \quad x = \cos\theta \\ &= (\frac{1}{2\pi})^2 \frac{1}{r} \int_0^\pi \frac{\theta \sin(\theta r)}{Q^2 - K_0^2} d^3 Q = (\frac{1}{2\pi})^2 \frac{1}{r} \cdot J(r) . \end{aligned}$$

Za rešenje integrala $J(k_0 r)$ koristit ćemo u kompleksnoj ravni sledeći integral:

$$\oint \frac{z \cdot e^{irz}}{z^2 - K_0^2} dz \quad |r| > 0 .$$

Ako izaberemo konturu u kompleksnoj ravni koja je data na sl. 4.:



Slika 4.

dobijamo:

$$J(k_0 r) = \frac{\pi}{2} \cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) . \quad / V-12 /$$

Znajući integral $J(k_0 r)$ možemo pisati za funkciju $\Psi_{-\vec{r}}$:

$$\Psi_{-\vec{r}} = \frac{\cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r})}{4\pi r} . \quad / V-13 /$$

Imajući u vidu relaciju /V-13/, jednačina /V-11/ dobija oblik:

$$\left[1 - \lambda \frac{\cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r})}{r} \right] \phi_{\vec{r}} = 0 \quad / V-14 /$$

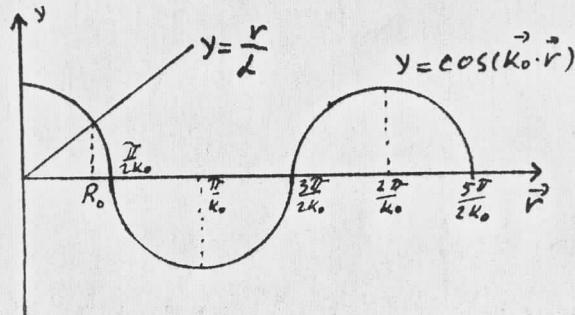
gde je

$$\lambda = \frac{m^2 V \Delta}{2\pi \hbar^2 M} . \quad / V-15 /$$

Dozvoljene vrednosti za \vec{r} , za koje je $\phi_{\vec{r}} \neq 0$ dobijamo iz relacije:

$$1 - \lambda \frac{\cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r})}{r} = 0 \Rightarrow \cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) = \frac{r}{\lambda} \quad / V-16 /$$

Iz uslova $\vec{r} > 0$ transcendentna jednačina /V-16/ ima samo jedno rešenje /slika 5./.



Slika 5.

Rešenje se nalazi u intervalu:

$$0 < R_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega}) < \frac{\pi}{2R_0}. \quad / V-17 /$$

Jednačina /V-14/ sada dobija oblik:

$$[r - R_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega})] \tilde{\phi}_r = 0 \quad / V-18 /$$

gde je:

$$\tilde{\phi}_r = \delta[r - R_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega})] \equiv \delta(r - R_0). \quad / V-19 /$$

Funkcija $\tilde{\phi}_r \equiv \phi_r$ zavisi samo od intenziteta, pa funkcija $\phi_{\vec{K}}$ sada može da se napiše /izračuna/

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{K}} &= \int d^3 r \phi_r e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty dr \cdot r \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}) \phi_r \\ &= \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty dr \cdot r \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}) \delta(r - R_0) \end{aligned}$$

$$\phi_{\vec{K}} = \frac{4\pi R_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega}) \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega}))}{K}. \quad / V-20 /$$

Iz jednačine /V-20/ možemo zaključiti:

a. U intervalu $0 \leq \vec{K} \leq \frac{\pi}{R_0}$ energija veze $\phi_{\vec{K}}$ je pozitivna što znači da se kaplje nemogu obrazovati.

Takođe se vidi da kad $\vec{K} \rightarrow 0 \Rightarrow \phi_{\vec{K}} \rightarrow 4\pi R_0^2$.

b. U intervalu $\frac{\pi}{R_0} \leq \vec{K} \leq \frac{2\pi}{R_0}$ energija veze $\phi_{\vec{K}}$ je negativna, pa je moguće obrazovanje eksitonski kaplji.

c. Ekstremne vrednosti energije veze $\phi_{\vec{K}}$ dobiju se iz transcendentne jednačine:

$$\operatorname{tg}[\vec{k} \cdot \vec{R}_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega})] \simeq \vec{k} \cdot \vec{R}_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega}). \quad / V-21 /$$

Na osnovu jednačine /V-15/ možemo proceniti red veličine:

$$R_0(\vec{k} \cdot \vec{\omega}) \simeq \frac{\pi}{2k} = \frac{\pi \hbar}{4m \nu} \simeq 10^{-6} \text{ cm}. \quad / V-22 /$$

Kako je $\phi_{\vec{K}}$ rešenje homogene jednačine /V-7/, ono nije jednoznačno određeno, već do neke proizvoljne multiplikacione konstante.

tivne konstante, pa funkcija data relacijom /V-20/ se može pisati:

$$\phi_k = C \frac{\sin(kr)}{k} \quad r_0 = R_0(k_0 L) \approx 10^{-6} \text{ cm}. \quad / \text{V-23} /$$

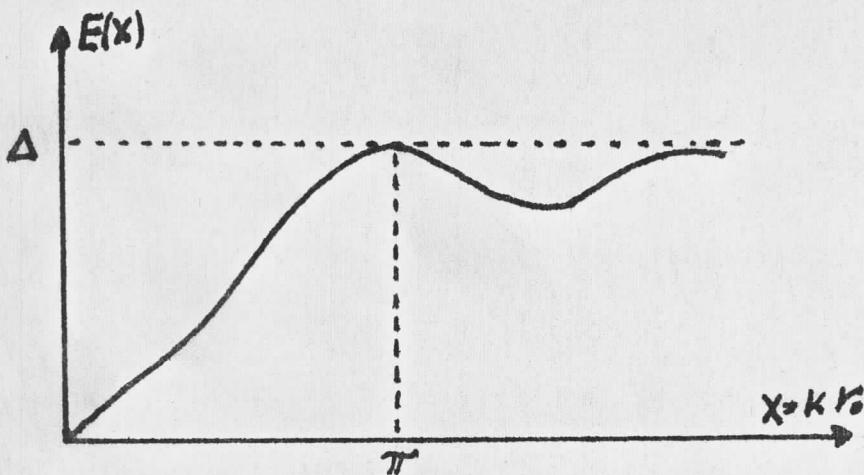
Spektar eksitonских kapljii u našoj aproksimaciji dat je:

$$E = \sqrt{\Delta^2 - C^2 \frac{\sin^2(kr)}{k^2}} \quad / \text{V-24} /$$

Konstanta C se određuje iz uslova da energija kaplje budu nula kada je $\vec{K}=0$ / $\vec{k}=0 \Rightarrow E_k=0$ /. Ovaj uslov odgovara i minimumu slobodne energije $E_s=0$, a mi radimo samo na niskim temperaturama gde je $F=U-TS \approx U$ /F-slobodna energija/, i poklapa se sa unutrašnjom energijom /U/ koja je minimalna kada je $E(0)=0$. Zamenom konstante C u izraz /V-24/ dobijamo:

$$E(0)=0 \Rightarrow C = \frac{\Delta}{r_0} \Rightarrow E(x) = \Delta \sqrt{1 - \left(\frac{\sin x}{x}\right)^2} \quad x = kr_0 \quad / \text{V-25} /$$

Grafički prikaz spektra eksitonских kapljii koji je dat izrazom /V-25/, dat je na slici 6. Sa grafika se vidi da kad $K \rightarrow 0$ energetski spektar ima linearnu zavisnost, tj. javlja se superfluidnost kapljii.



Slika 6.

VI E K S I T O N S K E K A P L J E I
R E P U L Z I J A E K S I T O N A

S obzirom da među eksitonima pored privlačenja postoje i kulanovska repulzija, koja je eksitonskom hamiltonijanu data preko dela koji sadrži δ -potencijal /odbijanje na δ -potencijalu/, postavlja se pitanje kako ta repulzija utiče na obrazovanje eksitonskih kaplji. Ovaj problem bit će razmotren u ovoj glavi.

Sobzirom da je δ -potencijal mnogo veći od ostalih članova u eksitonskom hamiltonijanu, to ćemo posmatrati samo deo hamiltonijana koji potiče od ovog potencijala, tj.

$$H_S = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \Delta \delta_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}}^{\dagger} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} . \quad / VI-1 /$$

Umesto δ -potencijala posmatrat ćemo realniji oblik npr.

Gausov potencijal,

$$V(\vec{n} - \vec{m}) = V_0 e^{-\frac{(\vec{n} - \vec{m})}{2r^2}} \quad / VI-2 /$$

i sferno-simetričnu barijeru /tj. sistem eksitona aproksimiramo gasom tvrdih sfera/:

$$V(\vec{n} - \vec{m}) = \begin{cases} V_0 & \text{za } |\vec{n} - \vec{m}| = r \leq R \\ 0 & \text{za } |\vec{n} - \vec{m}| = r > R \end{cases} \quad / VI-3 /$$

Tada hamiltonijan /VI-1/ možemo pisati u obliku:

$$H_S = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}}^{\dagger} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \quad / VI-4 /$$

Prelaskom u impulsni prostor H_S možemo pisati:

$$H_S = \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} V(k_1, -k_3) B_{k_1}^{\dagger} B_{k_2}^{\dagger} B_{k_3} B_{k_4} \delta_{(k_1 + k_2 - k_3 - k_4)} \quad / VI-5 /$$

Kako je za obrazovanje eksitonskih kaplji:

$$\vec{K}_1 = -\vec{K}_2 = \vec{K} ; \quad \vec{K}_3 = -\vec{K}_4 = \vec{L}$$

dobijamo:

$$H_S^{\text{ef}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} V(\vec{k}-\vec{q}) B_{\vec{k}}^+ B_{-\vec{k}}^+ B_{\vec{q}}^- B_{-\vec{q}}^- . \quad / \text{VI-6} /$$

Prelaskom sa sume na integral, za jediničnu zapreminu ($V=1$),

dobijamo:

$$H_S^{\text{ef}} = \int d^3 \vec{q} d^3 \vec{k} V(\vec{k}-\vec{q}) B_{\vec{k}}^+ B_{-\vec{k}}^+ B_{\vec{q}}^- B_{-\vec{q}}^- \quad / \text{VI-7} /$$

gde je $V(\vec{k}-\vec{q})$ sada dat izrazom za Gausov potencijal:

$$V(\vec{k}-\vec{q}) = (2\pi)^{\frac{3}{2}} r_0^2 V_0 e^{-\frac{1}{2}(\vec{k}-\vec{q})^2/r_0^2} \quad r_0 = a \quad / \text{VI-8} /$$

i za sfernu barijeru:

$$V(\vec{k}-\vec{q}) = \frac{4\pi}{(\vec{k}-\vec{q})^2} \left[\frac{\sin((\vec{k}-\vec{q}):r_0)}{(\vec{k}-\vec{q})} - r_0 \cos((\vec{k}-\vec{q}):r_0) \right]. \quad / \text{VI-9} /$$

Energetski operator koji odgovara hamiltonijanu:

$$\tilde{H} = H_S + H \quad / \text{VI-10} /$$

gde je H dato izrazom /V-1/, data je

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{x_{\vec{k}}^2 - \phi_{\vec{k}}^2} \quad / \text{VI-11} /$$

Funkciju $\phi_{\vec{k}}$ određujemo iz sledeće integralne jednačine:

$$\phi_{\vec{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\phi_{\vec{q}} y_{\vec{k}-\vec{q}}}{\sqrt{x_{\vec{k}}^2 - \phi_{\vec{q}}^2}} = 0$$

$$x_{\vec{k}} \approx \Delta \quad / \text{VI-12} /$$

$$y_{\vec{k}-\vec{q}} = \frac{2m^2 \Delta^2}{\hbar M} \frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2 - \vec{k}_0^2} + V(\vec{k}-\vec{q})$$

Prelazeći sa sume na integral, jednačina /VI-12/ dobija

oblik:

$$\phi_{\vec{k}} + A \int d^3 \vec{q} \phi_{\vec{q}} \left[\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2 - \vec{k}_0^2} + \frac{\hbar M}{2m^2 \Delta^2} V(\vec{k}-\vec{q}) \right] = 0 \quad / \text{VI-13} /$$

gde je:

$$A = \frac{2m^2\Delta}{\hbar^2 M} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3$$

/ VI-14 /

Koristeći Furijeve transformacije:

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}} &= \int d^3 p \tilde{\phi}_{\vec{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{p}} & ; V(\vec{k} - \vec{p}) &= \int V_r e^{i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{r}} d^3 r \\ \tilde{\phi}_{\vec{p}} &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d^3 k \phi_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{p}} & ; \frac{1}{(\vec{k} - \vec{p})^2 - k_0^2} &= \int d^3 k \psi_{\vec{k}} e^{i\vec{k}^2 (\vec{k} \cdot \vec{p})} \end{aligned} \quad / VI-15 /$$

dobijamo za funkciju $\tilde{\phi}_{\vec{p}}$ sledeću jednačinu:

$$\tilde{\phi}_{\vec{p}} \left\{ 1 + A(2\pi)^3 [\psi_{\vec{p}} + \frac{\hbar^2 M}{2m\Delta} V_{\vec{p}}] \right\} = 0$$

/ VI-16 /

gde je:

$$\psi_{\vec{p}} = \frac{\cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r})}{4\pi r}$$

/ VI-17 /

Relacija /VI-17/ dobija se analogno relaciji /V-13/.

Smenom:

$$A(2\pi)^3 = \Lambda = \frac{2m^2\Delta}{\hbar^2 M} \simeq 10^{-11} \text{ cm}$$

/ VI-18 /

dolazimo do relacije za koju je $\tilde{\phi}_{\vec{p}} \neq 0$:

$$1 - \Lambda \frac{\cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r})}{4\pi r} + \frac{V_{\vec{p}}}{\Delta} = 0$$

/ VI-19 /

Za različite vrednosti potencijala $V_{\vec{p}}$, jednačina /VI-19/ ima različita rešenja.

Ako za $V_{\vec{p}}$ uzmemos Gausov potencijal

$$V(\vec{r} - \vec{m}) = V_{\vec{p}} = 2\Delta e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}} \quad r_0 = a$$

/ VI-20 /

tada jednačina /VI-19/ ima oko 10^{12} rešenja. Rešenj koje odgovara minimalnoj vrednosti za \vec{r} dato je relacijom:

$$\cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) = -\frac{4\pi}{\Lambda} r \left(1 - e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}} \right)$$

/ VI-21 /

$$\approx -\frac{4\pi r}{\Lambda} \quad \text{jer je } e^{-\frac{r^2}{2r_0^2}} \sim e^{-10^6} \ll 1.$$

Kako je

$$r_0 \approx \frac{\pi}{2k_0} \sim 10^{-5} \text{ cm}$$

/ VI-22 /

to u ovom slučaju potencijal V_r ne utiče na obrazovanje eksizonskih kaplji, jer se kaplje obrazuju na rastojanju koje je zнатно veće od konstante rešetke a ($r_0 \gg a$), dok odbijanje između dva eksitona vlada na rastojanju $r \leq a$. Isti rezultat se dobije i u slučaju sferne barijere.

Prema tome možemo zaključiti da repulzija među eksitonima nema nikakvog uticaja na formiranje eksitonskih kaplji.

Z A K L J U Č A K

U prvom delu rada data je ukratko teorija Frenkelovih eksitona, fonona i eksiton-fonon interakcije.

Frelihovom transformacijom hamiltonijana, eksiton plus fononsko polje pokazano je da eksiton-fonon interakcija dovodi do efektivne eksiton-eksiton interakcije, koja je u nekim oblastima talasnog vektora privlačna te dovodi do stvaranja eksitonskih kaplji.

U drugom delu rada dobijen je spektar eksitacija koje nastaju raspadanjem eksitonskih kaplji i pokazano je da je taj spektar super-fluidan tj. poseduje fononski deo za male impulse, i rotonski deo sličan kao u teoriji tečnog helijuma.

Ovaj rezultat je svakako interesantan, jer super-fluidnost u sistemu optičkih pobuđenja, u suštini znači prenos energije eksitacije kroz kristal bez gubitaka, što može biti korisno i u praktičnoj primeni.

Na kraju je pokazano da kulonovsko odbijanje među eksitonima nema nikakvog uticaja na stvaranje eksitonskih kaplji.

Treba napomenuti da je u ovom radu posmatrana tzv. dvonivovska eksitonska šema, tj. uzeto je da se pobuduje samo jedan energetski nivo u molekulu, i svakako bi bilo interesantno proširiti ovo razmatranje i na slučaj više nivovske energetske šeme.



L I T E R A T U R A

1. V. M. Agranovič: TEORIJA EKSITONA, Moskva 1968.
2. A. S. Davidov: KVANTOVAYA MEHANIKA, Moskva 1973.
3. D. V. Kapor, S. D. Stojanović, M. J. Škrinjar, and B. S. Tošić: PHYS. STAT. SOL. /b/ 74, 103 /1976/.
4. S. D. Stojanović, J. P. Šetrajčić, M. J. Škrinjar, and B. S. Tošić: PHYS. STAT. SOL. /b/ 79, 433 /1977/.
5. L. D. Landau i E. M. Lifšic: KVANTNA MEHANIKA, prevod Beograd 1973.
6. V. M. Agranovič, B. S. Tošić: ŽETF 53, 149, /1967/.
7. N. N. Bogoljubov: J. PHYS. 9, 23, /1947/.
8. V. M. Agranovič: ŽETF 37, 430. /1959/.
9. J. J. Hofield, D. G. Thomas: J. PHYS. CHEM. SOL. 12, 276, /1960/.
10. J. J. Hofield: PHYS. REV. 112, 1555, /1958/.
11. U. Fano: PHYS. REV. 103, 1202, /1956/.



S A D R Ž A J

UVOD	1
EKSITONI	2
FONONI	10
EKSITON-FONON INTERAKCIJA	15
FRELIHOVA TRANSFORMACIJA	19
OBRAZOVANJE EKSITONSKI KAPLJI	23
EKSITONSKE KAPLJE I REPULZIJA EKSITONA	29
ZAKLJUČAK	33
LITERATURA	34
SADRŽAJ	35

