INSTITUT ZA FIZIKU
PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET
UNIVERZITET U NOVOM SADU

MILIČEVIĆ DJ. SLAVKA

SUPERFLUIDNOST OPTIČKIH POBUDJENJA U KRISTALIMA SA DVE PODREŠETKE

(diplomski rad)

NOVI SAD
1978.

Zahvaljujem se dr.Mariju Škrinjaru na pomoći koju mi je pružio prilikom izrade ovog rada.

S. Miličević

SADRŽAJ

UVOD

Problem superfluidnosti optičkih pobudjenja u molekularnim i poluprovodničkim kristalima (superfluidnost Frenkelovih eksitona i eksitona Vanije-Mota),pobudjuje,poslednjih desetak godina , veliku pažnju,i u naučnoj literaturi pojavili su se mnogobrojni radovi koji tretiraju taj problem (videti [1]).
U posledje vreme taj se problem proširio i na razne biostrukture, kod kojih je eksitonski mehanizam prenošenje energije pobudjenja dominantan.S obzirom da superfluidno kretanje optičkih pobudjenja u suštini znači prenos energije kroz kristal (biostrukturu)bez gubitaka,sasvim je jasan teorijski i praktični značaj tog fenomena.
U ovom radu biće razmatrana mogućnost pojave superfluidnosti optičkih pobudjenja u kristalima sa složenom rešetkom,ito kao posledica eksiton fonon interakcije.Kao što će biti pokazano,eksiton-fonon interakcija može da dovede do efektivne eksiton-eksiton interakcije koja je,u izvesnoj oblasti impulsa privlačna te dovodi do stvaranja eksitonskih konglomerata-kaplji.
U ovom radu posebno će se razmatrati spektar elementarnih eksitacija nastalih raspadom kaplje,i to kod kristala koji sadrže dve molekule u elementarnoj ćeliji.

G L A V A I

I.1. FRENKELOVI EKSITONI

Uposlednje vreme pri proučavanju različitih fizičkih svojstava istala (magnetnih, optičkih,toplotnih itd.) često se koristi pojam kvazi stice,kao kvanta odgovarajućih pobudjenja u kristalu.Eksitoni,kao jedna sta kvazi čestica,javljaju se pri kvantnomehaničkom izučavanju kolektivnih stanja elektrona nastalih optičkim pobudjenjem kristala.
novnu teoriju eksitona formulisao je Frenkel četrdesetih godina ovog veka. je teorija do danas obogaćena velikim brojem otkrića.Eksitoni-optička pobudjenja indukovana svetlošću u molekulskim kristalima i kristalima poluprovodnika, mogu biti podeljeni u nekoliko grupa s obzirom na tip kristala u ne se javljaju.Frenkelovi eksitoni najčešće nastaju u molekulskim kristama i kristalima inertnih gasova,kod kojih su medjumolekularne sile znatno nje od sila medju atomima odnosno elektronima tako da molekuli zadržavaju oje individualne karakteristike.Ovi eksitoni predstavljaju neutralni kompleks eksiton-šupljina koji ostaje lokalizovan na samom molekulu.Radijus ih eksitona je svega nekoliko angstrema.
ugu grupu eksitona predstavljaju eksitoni Vanija-Mota,koji se javljaju u istalu poluprovodnika kao neutralan kompleks elektrona u provodnoj i šupina u valentnoj zoni.Radijus ovih eksitona dostiže vrednost i nekoliko krona.Povišenjem temperature ili pod dejstvom spoljašnjeg električnog pol lazi do kidanja kompleksa elektron-šupljina tako da se elektroni i šuplji dalje kreću nezavisno,usled čega dolazi do provodjenja električne struje poluprovodniku.
razliku od elementarne teorije eksitona koja se bazira na teoriji Hajtle i Londona za ispitivanje sistema sastavljenih od velikog broja istovetni dsistema (atoma,molekula,čestica itd)koristi se metod druge kvantizacije. koordinatnoj reprezentaciji operator energije kristala sa nekoliko moleku u elementarnoj ćeliji ima oblik([1],[2]):

$$\hat{H} = \sum_{n} \hat{H}_{n} + \frac{1}{2} \sum_{n,m}{}' \hat{V}_{nm} \qquad (1.1)$$

de su $n \equiv \{\vec{n},\alpha\}$ $m \equiv (\vec{m},\beta)$-vektori rešetke.U hamiltonijanu (1.1) $\hat{H}_n$ predstavlja amiltonijan izolovanog molekula,a $\hat{V}_{nm}$-hamiltonijan dipol-dipol interakcije izmedju molekula na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$
relaz na reprezentaciju druge kvantizacijeo ostvaruje se izborom nekog otpunog sistema funkcija koje karakterišu stanje podsistema.U našem slučaju možemo izabrati sopstvene funkcije φ_n^f operatora slobodnih molekula $\hat{H}_n$.Stanje kristala karakteriše se brojem N_{nf} koji ukazuje u kom se pobudjenom stanju f nalazi molekul na mestu n.
Pošto se svaki molekul može nalaziti samo u jednom stacionarnom stanju okupacioni brojevi N_{nf} zadovoljavaju uslov

$$\sum_f N_{nf} = 1 \tag{1.2}$$

i uslov

$$\sum_{n,f} N_{nf} = \sigma N \tag{1.3}$$

de je σN -ukupni broj molekula u kristalu koji ima σ-molekula po elementarnoj ćeliji.N_{nf} može imati samo dve vrednosti:oi 1.Ermitski operator N_{nf} može se izraziti pomoću dva neermitska operatora b^+_{nf} i b_{nf} uz pomoć relacije

$$\hat{N}_{nf} = b^+_{nf} b_{nf} \tag{1.4}$$

vi neermitski operatori imaju sledeća svojstva:

$$\begin{aligned} b^+_{nf} |\ldots N_{nf} \ldots \rangle &= (1 - N_{nf}) |\ldots (1 + N_{nf}) \ldots \rangle \\ b_{nf} |\ldots N_{nf} \ldots \rangle &= N_{nf} |\ldots (1 - N_{nf}) \ldots \rangle \end{aligned} \tag{1.5}$$

z relacija (1.5)sledi da je b^+_{nf}-operator kreacije pobudjenog stanja f odnosno kreacije elektrona u stanju),dok je b_{nf}-operator anihilacije lektrona u stanju f.Odatle proizilaze relacije:

$$\begin{aligned} b_{nf} b^+_{nf} + b^+_{nf} b_{nf} &= 1 \\ b_{nf} b_{nf} = b^+_{nf} b^+_{nf} &= 0 \end{aligned} \tag{1.6}$$

čigledno je da operatori b_{nf} i b^{+}_{nf} zadovoljavaju Fermi komutacione relacije
 iste indekse nf, dok za različite indekse komutiraj u. Ako uvedemo opera
ore polja:

$$\hat{\Psi}(\xi) = \sum_{nf} b_{nf}\, \varphi_n^{f}(\xi)$$
$$\hat{\Psi}^{+}(\xi) = \sum_{nf} b^{+}_{nf}\, \varphi_n^{*f}(\xi) \qquad (1.7)$$

ko je ustanoviti pravila prelaska od operatora u koordinatnoj reprezenta
ji na operatore u reprezentaciji druge kvantizacije. Tako naprimer, dobija
:

$$\hat{N} \equiv \int \hat{\Psi}^{+}(\xi)\, \hat{\Psi}(\xi)\, d\xi = \sum_{nf} b^{+}_{nf}\, b_{nf} \qquad (1.8)$$

$$\hat{H}_0 \equiv \int \hat{\Psi}^{+}(\xi) \sum_{n} \hat{H}_n(\xi)\, \hat{\Psi}(\xi)\, d\xi = \sum_{nf} b^{+}_{nf}\, b_{nf}\, \mathcal{E}_f \qquad (1.9)$$

$$\sum_{n} \hat{V}_n(\xi) \rightarrow \hat{V} \equiv \int \hat{\Psi}^{+}(\xi) \sum_{n} \hat{V}_n(\xi)\hat{\Psi}(\xi)\, d\xi = \sum_{nfg} b^{+}_{ng}\, b_{ng} \langle g|\hat{V}_n|f\rangle \qquad (1.10)$$

$$\sum_{n,m} \hat{U}_{nm} \rightarrow \hat{U} \equiv \int \hat{\Psi}^{+}(\xi)\hat{\Psi}^{+}(\xi') \sum_{nm} \hat{U}_{nm}\, \hat{\Psi}(\xi')\hat{\Psi}(\xi)\, d\xi' d\xi =$$
$$= \sum_{nmfgf'g'} b^{+}_{nf'}\, b^{+}_{mg'}\, b_{mg}\, b_{nf} \langle f'g'|\hat{U}_{nm}|gf\rangle \qquad (1.11)$$

ristеći relacije (1.9)i (1.11)operator energije (1.1) u drugoj kvantizaci
staje:

$$\hat{H} = \sum \mathcal{E}_f\, b^{+}_{nf} b_{nf} + \frac{1}{2} \sum b^{+}_{nf'}\, b^{+}_{mg'}\, b_{mg}\, b_{nf} \langle f'g'|\hat{V}_{nm}|fg\rangle \quad (1.12)$$

e su f, g, f', g', kvanti brojevi koji karakterišu sva stacionarna stanja
lekula. Pri maloj koncentraciji pobudjenja u kristalu u hamiltonijanu
.12) možemo(zameniti) zanemariti matrične elemente interakcije izmedju pob
h molekula, tj. $\langle ff|\hat{V}_{nm}|ff\rangle \approx 0$ za $f \neq 0$, te ćemo zadržati samo matrične el
nte interakcije izmedju nepobudjenih, i pobudjenih. i nepobudjenih.
 matrični elementi imaju sledeći oblik:
 Ako se molekuli nalaze u osnovnom stanju njihova interakcija se karak
riše matričnim elementom oblika

interakcija izmedju pobudjenog i nepobudjenog molekula karakteriše se tričnim elementom oblika $\langle 0f | \hat{V}_{nm} | 0f \rangle$
matrični elementi oblika $\langle 0f|\hat{V}_{nm}|f0\rangle = M^{f}_{nm}$ karakterišu prelaz pobudjenja sa dnog na drugi molekul.
matrični elementi oblika $\langle 00 | \hat{V}_{nm} | ff \rangle = \langle ff | \hat{V}_{nm} | 00 \rangle$
ji karakterišu kreaciju ili anihilaciju pobudjenja na dvema molekulama.
i ovim aproksimacijama, relacija (1.2) se svodi na sledeći oblik:

$$\hat{N}_{no} = 1 - \hat{N}_{nf} \tag{1.13}$$

operator energije (1.12), pri učešću samo linearnih članova postaje:

$$\hat{H} = \mathcal{E}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + H_3 \tag{1.14}$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{n} \Delta_f \hat{N}_{nf} \tag{1.15}$$

$$H_2 = \sum_{nm} M^{f}_{nm} b^{+}_{no} b^{+}_{mf} b_{mo} b_{nf} \tag{1.16}$$

$$H_3 = \frac{1}{2} \sum_{nm} M^{f}_{nm} (b^{+}_{no} b^{+}_{mo} b_{mf} b_{nf} + b^{+}_{nf} b^{+}_{mf} b_{mo} b_{no}) \tag{1.17}$$

$$\mathcal{E}_0 = N\sigma\varepsilon_0 + \frac{1}{2} \sum_{nm} \langle 00 | \hat{V}_{nm} | 00 \rangle \tag{1.18}$$

vedimo sada operatore:

$$P_{nf} = b^{+}_{no} b_{nf} \qquad P^{+}_{nf} = b^{+}_{nf} b_{no} \tag{1.19}$$

oji zadovoljavaju komutacione relacije

$$P^{+}_{nf} P_{nf} = \hat{N}_{nf} \qquad P_{nf} P^{+}_{nf} + P^{+}_{nf} P_{nf} = 1$$
$$P_{nf} P^{+}_{nf} = 1 - \hat{N}_{nf} \qquad P_{nf} P^{+}_{nf} - P^{+}_{nf} P_{nf} = 1 - 2\hat{N}_{nf} \tag{1.20}$$

li opštije:

$$[P_{nf}, P^{+}_{mf'}] = (1 - 2P^{+}_{nf} P_{nf}) \delta_{nm} \delta_{ff'}$$
$$[P_{nf}, P_{mf'}] = [P^{+}_{mf}, P^{+}_{mf'}] = 0 \qquad P^{2}_{nf} = P^{+2}_{nf} = 0 \tag{1.21}$$

su tzv. Paulievi operatori,koji kreiraju odnosno anihiliraju optička po djenja - eksitone u kristalu.Vidimo da za isti čvor rešetke zadovoljavaju rmi komutacione relacije,dok za različite čvorove zadovoljavaju Boze ko tacione relacije.

zražen preko Pauli operatora,operator energije (1.14)dobija oblik:

$$H_1 = \sum_n \Delta_f P^+_{nf} P_{nf} \tag{1.22}$$

$$H_2 = \sum_{nm} M^f_{nm} P^+_{mf} P_{nf} \tag{1.23}$$

$$H_3 = \frac{1}{2} \sum_{nm} M^f_{nm} \left(P^+_{mf} P^+_{nf} + P_{mf} P_{nf} \right) \tag{1.24}$$

i malim koncentracijama eksitona $\left(\langle N_{nf} \rangle \equiv \langle P^+_{nf} P_{nf} \rangle \ll 1 \right)$ auli operatore možemo zameniti Boze operatorima tj.
$P_{nf} \approx B_{nf}$; $P^+_{nf} \approx B^+_{nf}$,i ako zanemarimo H_3 (aproksimacija Hajtler-Londona),do ijamo sledeći oblik hamiltonijana:

$$\Delta \hat{H} = \hat{H} - \mathcal{E}_0 = \sum_n \Delta_f B^+_{nf} B_{nf} + \sum_{n,m} M^f_{nm} B^+_{mf} B_{nf} \tag{1.25}$$

RISTALI SA NEKOLIKO MOLEKULA U ELEMENTARNOJ ĆELIJI

(jedan pobudjen nivo)

Ako kristal sadrži σ molekula u elementarnoj ćeliji onda se in eksi n i m odredjuju izrazima:

$$n \equiv (\vec{n}, \alpha) \qquad m \equiv (\vec{m}, \beta)$$

de su $\vec{n}$ i $\vec{m}$ vektori koji karakterišu položaj elementarne ćelije a α i β arakterišu položaj i orijentaciju molekula u elementarnoj ćeliji.

$$\alpha, \beta = 1, 2, 3 \ldots\ldots \sigma$$

ijagonalizacija operatora (indeks „f" smo ispustili jer posmatramo samo edan pobudjeni nivo molekula):

$$\hat{H} = \sum_{n\alpha} \Delta_\alpha B^+_{\vec{n}\alpha} B_{\vec{n}\alpha} + \sum_{\vec{n}\alpha\, \vec{m}\beta} M_{\vec{n}\alpha \vec{m}\beta} B^+_{\vec{m}\beta} B_{\vec{n}\alpha} \tag{1.26}$$

ide u dve etape. Prvo prelazimo u impulsni prostor Furije transformaciom:

$$B_{\vec{n}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} A_\alpha(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{R}_{\vec{n}\alpha}} \tag{1.27}$$

Operatori $A_\alpha(\vec{k})$ zadovoljavaju Boze komutacione relacije:

$$[A_\alpha(\vec{k}), A^+_{\alpha'}(\vec{k}')] = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

Zamenom (1.27)u (1.26) dobijamo:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\vec{k}\vec{k}'} \Delta_\alpha A^+_\alpha(\vec{k}) A_\alpha(\vec{k}') \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{R}_{\vec{n}\alpha}(\vec{k}-\vec{k}')} +$$

$$+ \sum_{\alpha\vec{k}\beta\vec{k}'} A^+_\beta(\vec{k}') A_\alpha(\vec{k}) \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta} e^{i\vec{k}\vec{R}_{\vec{n}\alpha}} e^{i\vec{k}'\vec{R}_{\vec{m}\beta}}$$

gde je

$$M_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} L_{\alpha\beta}(q) e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\vec{m}\beta} - \vec{R}_{\vec{n}\alpha})}$$

Pošto je

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} e^{i(\vec{q}-\vec{k}')\vec{R}_{m\beta}} e^{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{R}_{\vec{n}\alpha}} = \delta_{\vec{q}\vec{k}} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

hamiltonijan dobija sledeći oblik:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\vec{k}} \Delta_\alpha A^+_\alpha(\vec{k}) A_\alpha(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}\alpha\beta} L_{\alpha\beta}(\vec{k}) A^+_\beta(\vec{k}) A_\alpha(\vec{k}) \tag{1.28}$$

uz uslov:

$$\Delta_\alpha \gg L_{\alpha\beta}(\vec{k}) \qquad\qquad L_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \sum_{\vec{m}} M_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta} e^{i\vec{k}(\vec{R}_{\vec{n}\alpha} - \vec{R}_{\vec{m}\beta})}$$

odnosno energija pobudjenja molekula mnogo je veća od matričnih elemenata dipol-dipol interakcije.

Drugi korak pri dijagonalizaciji hamiltonijana jeste da u impulsnompro- storu hamiltonijan (1.28)dijagonalizujemo smenom:

$$A_\alpha(\vec{k}) = \sum_{\mu=1}^{\sigma} U_{\alpha\mu}(\vec{k}) B_\mu(\vec{k}) \tag{1.29}$$

Novi hamiltonijan dobija oblik:

$$\hat{H}=\sum_{K\alpha\mu_1\mu_2}\Delta_\alpha U^*_{\alpha\mu_1}(\vec{K})U_{\alpha\mu_2}(\vec{K})B^+_{\mu_1}(\vec{K})B_{\mu_2}(\vec{K})+ \tag{1.30}$$

$$+\sum_{K\alpha\beta\mu_1\mu_2}L_{\alpha\beta}(\vec{K})U_{\beta\mu_1}(\vec{K})U_{\alpha\mu_2}(\vec{K})B^+_{\mu_1}(\vec{K})B_{\mu_2}(\vec{K})=\sum_{\mu_1\vec{K}}E_\mu(\vec{K})B^+_{\mu_1}(\vec{K})B_{\mu_1}(\vec{K})$$

Iz komutacionih relacija sledi

$$[A_\alpha(\vec{K})A^+_\beta(\vec{K})]=\delta_{\alpha\beta}=\sum_{\mu_1\mu_2}U_{\alpha\mu_1}U^*_{\beta\mu_2}[B_{\mu_1}(\vec{K})B_{\mu_2}(\vec{K})]=\sum_{\mu}U^*_{\beta\mu}U_{\alpha\mu}$$

odnosno

$$\sum_\mu U^*_{\beta\mu}U_{\alpha\mu}=\delta_{\alpha\beta} \tag{1.31}$$

Inverzna transformacija od $B_\mu(\vec{K})$ na $A_\alpha(\vec{K})$ dobija se iz (1.29)ako jednačin pomnožimo sa $U^*_{\alpha\mu'}(\vec{K})$ i saberemo po α. tj.

$$\sum_\alpha U^*_{\alpha\mu'}(\vec{K})A_\alpha(\vec{K})=\sum_\mu B_\mu(\vec{K})\sum_\alpha U^*_{\alpha\mu'}U_{\alpha\mu} \tag{1.32}$$

Iz (1.32)sledi,da u slučaju kada je

$$\sum_\alpha U^+_{\alpha\mu'}U_{\alpha\mu}=\delta_{\mu\mu'} \tag{1.33}$$

dobijamo

$$B_\mu(\vec{K})=\sum_\alpha U^*_{\alpha\mu}(\vec{K})A_\alpha(\vec{K}) \tag{1.34}$$

Sda ćemo potražiti jednačine za odredjivanje funkcija $U_{\alpha\beta}(\vec{K})$ i energije $E_\mu(\vec{K})$ .Imajući u vidu da je

$$B_\mu(\vec{K},t)=B_\mu(\vec{K})e^{-iEt} \qquad B^+_\mu(\vec{K},t)=B^+_\mu(\vec{K})e^{-iEt}$$

i koristeći Hajzenbergove jednačina kretanja,dobijamo:

$$i\frac{dB_\mu(\vec{K},t)}{dt}=EB_\mu(\vec{K})e^{-iEt}=[B_\kappa,H]$$

$$EB_\mu(\vec{K})=[B_\mu(\vec{K}),H] \qquad H=\sum_{\alpha\beta K}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{K})A^+_\beta(\vec{K})A_\alpha(\vec{K})$$

$$B_\mu(\vec{K})=\sum_{\alpha'}U^*_{\alpha'\mu}A_{\alpha'}(\vec{K})$$

$$\sum_{\alpha'}U^+_{\alpha'\mu}\sum_{\alpha\beta\vec{K}}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{K})[A_{\alpha'}(\vec{K})A^+_\beta(\vec{K})A_\alpha(\vec{K})]=$$

$$= \sum_{\alpha\beta k} U^{*}_{\beta\mu}(\vec{k})\,\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,A_{\alpha}(\vec{k})$$

$$E\sum_{\alpha'} U^{+}_{\alpha'\mu}A_{\alpha'}(\vec{k}) = \sum_{\alpha\beta k} U^{+}_{\beta\mu}\,\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,A_{\alpha}(\vec{k})$$

$$\sum_{\alpha k} A_{\alpha}(\vec{k})\left[E U^{+}_{\alpha\mu} - \sum_{\beta}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,U^{+}_{\beta\mu}(\vec{k})\right] = 0$$

$$E_{\mu}(\vec{k})\,U^{*}_{\alpha\mu} = \sum_{\beta}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,U^{+}_{\beta\mu}(\vec{k}) \qquad (1.35)$$

Ako dobijeni izraz (1.35)zamenimo u levu stranu jednačine (1.3o)dobijamo:

$$H = \sum_{k\alpha\mu\nu} U_{\alpha\nu}(\vec{k})\,B^{+}_{\mu}(\vec{k})\,B_{\nu}(\vec{k})\sum_{\beta}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,U^{+}_{\beta\mu}(\vec{k}) =$$

$$= \sum_{\nu\mu k} E_{\mu}(\vec{k})\,B^{+}_{\mu}(\vec{k})\,B_{\nu}(\vec{k})\sum U_{\alpha\nu}(\vec{k})\,U^{+}_{\alpha\mu}(\vec{k}) = \sum_{\mu k} E_{\mu}(\vec{k})\,B^{+}_{\mu}(\vec{k})\,B_{\mu}(\vec{k})$$

tj.dijagonalizovani hamiltonijan.Energiju možemo odrediti iz (1.35)ako jednačinu pomnožimo sa $U_{\alpha\mu}(\vec{k})$ i sumiramo po α

$$E_{\mu}(\vec{k})\sum_{\alpha} U_{\alpha\mu}(\vec{k})\,U^{*}_{\alpha\mu}(\vec{k}) = \sum_{\alpha\beta}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,U_{\alpha\mu}(\vec{k})\,U^{+}_{\beta\mu}(\vec{k})$$

odnosno

$$E_{\mu}(\vec{k}) = \sum_{\alpha\beta}\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{k})\,U_{\alpha\mu}(\vec{k})\,U^{+}_{\beta\mu}(\vec{k}) \qquad (1.36)$$

$$H = \sum_{\mu,\vec{k}} E_{\mu}(\vec{k})\,B^{+}_{\mu}(\vec{k})\,B_{\mu}(\vec{k}) \qquad (1.37)$$

pošto smo odredili energije $E_{\mu}(\vec{k})$,pomoću sistema jednačina (1.35)možemo odrediti i funkcije $U_{\alpha\beta}(\vec{k})$.

I.2. FONONI

Kvanti pobudjenja oscilovanja oscilatora nazivaju se fononi. Ispitivaćemo male oscilacije atoma oko njihovih ravnotežnih položaja u kristalu. Elementarna ćelija kristala sadrži σ atoma i odredjena je trima nekomplamarnim baznim vektorima $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.
Radi jednostavnosti uvodimo ciklične granične uslove s periodama $N_1 a_1$, $N_2 a_2$ i $N_3 a_3$ tako da $N=N_1N_2N_3$ označava broj elementarnih ćelija u kristalu a $N\sigma$ broj atoma (molekula, jona). Energija malih oscilacija atoma u harmonijskoj aproksimaciji ima oblik:

$$H_{KL} = \frac{1}{2}\sum_{n\alpha x}\left[M_\alpha(\dot{\xi}^x_{n\alpha})^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{n'\alpha'x'\\ n\alpha x}} \lambda^{xx'}_{\alpha\alpha'}(\vec{n}-\vec{n}')\xi^x_{n\alpha}\,\xi^{x'}_{n'\alpha'}\right] \tag{2.1}$$

gde je $\xi^x_{n\alpha}$ -komponenta pomeranja atoma $\vec{n}\alpha$ iz ravnotežnog položaja duž x-ose (x=1,2,3)

M_α -masa atoma

$\lambda^{xx'}_{\alpha\alpha'}$ -koeficijenti koji zavise samo od razlike $(\vec{n}-\vec{n}')$ (VIDETI [3])

Ako u (2.1) izvršimo kanoničku transformaciju na sistem novih koordinata

$$A_{\vec{k}}\, e^x_\alpha(\vec{k}) \equiv q^x_{\vec{k}\alpha} \qquad \xi^x_{\vec{n}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{NM_\alpha}}\sum_k e^x_\alpha(\vec{k})A_{\vec{k}}\,e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{2.2}$$

$(\alpha = 1,2,3\ldots\sigma)$ $(x=1,2,3)$

dobijamo:

$$H_{KL} = \frac{1}{2}\sum_{k\alpha} e^x_\alpha(\vec{k})e^x_\alpha(-\vec{k})\dot{A}_{\vec{k}}\dot{A}_{-\vec{k}} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{k\alpha\beta x x'} D^{xx'}_{\alpha\beta}(\vec{k})e^x_\alpha(\vec{k})e^{x'}_\beta(\vec{k})A_{\vec{k}}A_{-\vec{k}} \tag{2.3}$$

gde je

$$D^{xx'}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = D^{x'x\,*}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \frac{1}{M_\alpha}\sum_{\vec{n}}\lambda^{xx'}_{\alpha\beta}(\vec{n})\,e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

Koristeći hamiltonovu funkciju (2.3)možemo pronaći Lagranžovu funkciju sitema L=K-U,i Lagranževe jednačine za generalisane koordinate $q^{x}_{\vec{k}\alpha}=e^{x}_{\alpha}A_{\vec{k}}$ dobijaju oblik:

$$e^{x}_{\alpha}(\vec{k})\ddot{A}_{\vec{k}}+\sum_{x'\beta}D^{xx'}_{\alpha\beta}(\vec{k})e^{x'}_{\beta}(\vec{k})A_{\vec{k}}=0 \qquad (2.4)$$

$x=1,2,3 \qquad \alpha=1,2,\dots\sigma$

Rešenja gornjeg sistema jednačina možemo tražiti u obliku

$$A_{\vec{k}}=A_{\vec{k}}(0)e^{i\Omega(\vec{k})t}$$

Tada je

$$\ddot{A}_{\vec{k}}=-\Omega^2(\vec{k})A_{\vec{k}}$$

Zamenivši u (2.4)dobijamo sledeći sistem od 3σ jednačina za odredjivan nepoznatih funkcija $e^{x}_{\alpha}(\vec{k})$ i $\Omega(\vec{k})$

$$\Omega^2(\vec{k})e^{x}_{\alpha}(\vec{k})-\sum_{x'\beta}D^{xx'}_{\alpha\beta}(\vec{k})e^{x'}_{\beta}(\vec{k})=0 \qquad (2.5)$$

Sistem jednačina (2.5)imaće netrivijalna rešenja ako je determinanta sist ma jednaka nuli,tj.

$$\det|\Omega^2(\vec{k})\delta_{\alpha\beta}\delta_{xx'}-D^{xx'}_{\alpha\beta}(\vec{k})|=0 \qquad (2.6)$$

s obzirom da je matrica $D^{xx'}_{\alpha\beta}$ ermitska,jednačine (2.6)nam daje 3σ realnih rešenja $\Omega^2_s(\vec{k})$ $(s=1,2\dots3\sigma)$ i 3σ vektora $\vec{e}_{\alpha s}(\vec{k})$,sa komponentama $e^{x}_{\alpha s}(\vec{k})$,koji su medjusobno ortogonalni,tj:

$$\sum_{\alpha=1}^{\sigma}\sum_{x=1}^{3}e^{x}_{\alpha s}e^{x}_{\alpha s'}=\delta_{ss'} \qquad (2.7)$$

Imajući u vidu 3σ -rešenja jednačina (2.5),komponente pomeranja atoma $\xi^{x}_{\vec{n}\alpha}$, možemo izraziti preko 3σ promenljivih $A_{\vec{k}s}$ i

$$\xi^{x}_{\vec{n}\alpha}=\frac{1}{\sqrt{NM_\alpha}}\sum_{ks}e^{x}_{\alpha s}(\vec{k})A_{\vec{k}s}e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad (2.8)$$

dok hamiltonovu funkciju možemo napisati u obliku (koristimo jednačine (2.5)i (2.7)):

$$H_{KL}=\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}s}[P_{\vec{k}s}P_{-\vec{k}s}+\Omega^2_s(\vec{k})A_{\vec{k}s}A_{-\vec{k}s}] \qquad (2.9)$$

gde su $P_{\vec{k}s} = \frac{\partial K}{\partial \dot{A}_{\vec{k}s}} = \dot{A}_{-\vec{k}s}$ -generalisani impulsi.

Prelaz na kvantni operator energije (hamiltonijan)vršimo zamenom generalisanih koordinata i impulsa odgovarajućim operatorima kreacije i anihilacije kvanata oscilacija -fonona,po pravilu:

$$\begin{aligned} A_{\vec{k}s} &\longrightarrow \hat{A}_{\vec{k}s} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\Omega_s(\vec{k})}}\,(a_{\vec{k}s} + a^{+}_{-\vec{k}s}) \\ P_{\vec{k}s} &\longrightarrow \hat{P}_{\vec{k}s} = i\sqrt{\frac{\hbar\Omega_s(\vec{k})}{2}}\,(a^{+}_{\vec{k}s} - a_{-\vec{k}s}) \end{aligned} \tag{2.10}$$

Posle tih transformacija hamiltonijan sistema dobija sledeći oblik:

$$H = \sum_{\vec{k}s} \hbar\Omega_s(\vec{k})\,[a^{+}_{\vec{k}s} a_{\vec{k}s} + \tfrac{1}{2}] \tag{2.11}$$

a vektor pomeranja atoma $\vec{n}_\alpha$

$$\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha} = \sum_{\vec{k}s} \left(\frac{\hbar}{2M_\alpha N\Omega_s(\vec{k})}\right)^{1/2} \vec{e}_{\alpha s}(\vec{k})\,[a_{\vec{k}s} + a_{-\vec{k}s}]\,e^{i\vec{k}\vec{n}} \tag{2.12}$$

Istaknimo još da učestanosti $\Omega_s(\vec{k})$ triju fononskih grana (od ukupno 3σ -grana)teže nuli kada talasni vektor $\vec{k} \to 0$ .Te grane se nazivaju akustičnim,i pri malim vrednostima talasnog vektora za te grane je

$\Omega_s(\vec{k}) = C_s \cdot |\vec{k}|$,gde je C-brzina longitudinalnih akustičnih talasa a C_2 i C_3 brzine transferzalnih talasa.

Ostale $3(\sigma-1)$ -fononske grane nazivaju se optičkim (optički fononi).

I.3. EKSITON - FONON INTERAKCIJE

Napišimo eksitonski hamiltonijan u konfiguracionom pro-
storu (u aproksimaciji Hajtler-Londona):

$$H=\sum_{\vec{n}\alpha}\Delta_\alpha B^+_{\vec{n}\alpha}B_{\vec{n}\alpha}+\sum_{nm\alpha\beta}M_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}B^+_{\vec{m}\beta}B_{\vec{n}\alpha} \tag{3.1}$$

i posmatrjmo ga u slučaju kada dolazi do oscilovanja atoma u rešetki.
Tada možemo pisati

$$\vec{r}_{\vec{n}\alpha}\longrightarrow\vec{r}_{\vec{n}\alpha}+\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}$$

gde fononski pomerai $\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}$ zadovoljavaju uslov:

$$|\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}|\ll\vec{r}_{\vec{n}\alpha}$$

Ako uvedemo δ - funkciju

$$\delta(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\alpha})=\delta_{\vec{n}\alpha,\vec{m}\alpha}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}(\vec{r}_{n\alpha}-\vec{r}_{m\alpha})}\equiv\delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

hamiltonijan (3.1) možemo napisati u obliku:

$$\begin{aligned}H=&\sum_{n\alpha m\beta}\Delta_\alpha\delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\beta})B^+_{\vec{n}\alpha}B_{\vec{m}\beta}+\\&+\sum_{n\alpha m\beta}M(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\beta})B^+_{\vec{n}\alpha}B_{\vec{m}\beta}\end{aligned} \tag{3.2}$$

Usled fononskih oscilacija imaćemo:

$$\begin{aligned}\delta(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\alpha})\longrightarrow&\ \delta(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}+\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\alpha})=\\&=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\alpha})+i\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\alpha})}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}M(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\beta})\longrightarrow&\ M(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}+\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\beta}-\vec{\xi}_{\vec{m}\beta})=\\&=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}M_{\alpha\beta}(\vec{k})e^{i\vec{k}(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{m}\beta})+i\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\beta})}\end{aligned}$$

Eksponencijalne funkcije razvićemo u red po fononskim pomerajima, zadrža-
vajući se samo na prvom stepenu po fononskim pomerajima, npr:

$$e^{i\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\beta})} \approx 1+i\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\beta})$$

ko izrazimo operatore $B_{\vec{n}\alpha}$ preko svojih Furije transforma

$$B_{\vec{n}\alpha}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum A_\alpha(\vec{k})e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

zajedno sa gornjim izrazima za δ - funkciju i matrične elemente $M_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}$ zamenimo u hamiltonijan (3.2), dobijamo:

$$H=\frac{1}{N^2}\sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\vec{k}\vec{k}_1\vec{k}_2}\Delta_\alpha A^+_\alpha(\vec{k}_1)A_\alpha(\vec{k}_2)e^{i\vec{n}_{\vec{n}\alpha}(\vec{k}-\vec{k}_1)+i\vec{n}_{\vec{m}\alpha}(\vec{k}_2-\vec{k})}[1+i\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\alpha})]+$$

$$+\frac{1}{N^2}\sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\vec{k}\vec{k}_1\vec{k}_2}M_{\alpha\beta}(\vec{k})A^+_\alpha(\vec{k}_1)A_\beta(\vec{k}_2)e^{i\vec{n}_{\vec{n}\alpha}(\vec{k}-\vec{k}_1)+i\vec{n}_{\vec{m}\beta}(\vec{k}_2-\vec{k})}[1+i\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\beta})]$$

$$H=\sum_{\alpha\vec{k}}\Delta_\alpha A^+_\alpha(\vec{k})A_\alpha(\vec{k})+\sum_{\alpha\beta\vec{k}}M_{\alpha\beta}(\vec{k})A^+_\alpha(\vec{k})A_\beta(\vec{k})+H_{int}$$

$$H_{int}\equiv H_{ef.}=\frac{i}{N^2}\sum_{nm\alpha\vec{k}\vec{k}_1\vec{k}_2}\Delta_\alpha A^+_\alpha(\vec{k}_1)A_\alpha(\vec{k}_2)e^{i\vec{n}_{\vec{n}\alpha}(\vec{k}-\vec{k}_1)+i\vec{n}_{\vec{m}\alpha}(\vec{k}_2-\vec{k})}\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\alpha})$$

$$+\frac{1}{N^2}\sum_{nm\alpha\beta\vec{k}\vec{k}_1\vec{k}_2}M_{\alpha\beta}(\vec{k})A^+_\alpha(\vec{k}_1)A_\beta(\vec{k}_2)e^{i\vec{n}_{n\alpha}(\vec{k}-\vec{k}_1)+i\vec{n}_{m\beta}(\vec{k}_2-\vec{k})}\vec{k}(\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}-\vec{\xi}_{\vec{m}\beta}) \quad (3.3)$$

Sada ćemo fononske pomeraje izraziti preko operatora kreacije i anihilacije fonona.

$$\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}=\sum_{j\vec{q}}\left[\frac{\hbar}{2M_\alpha N\omega_j(\vec{q})}\right]^{1/2}\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q})[a_{\vec{q}j}e^{i\vec{q}\vec{n}}+a^+_{\vec{q}j}e^{-i\vec{q}\vec{n}}] \quad (3.4)$$

gde je $\omega_j(\vec{q})$ -energija j-te fononske grane $\quad j=1,2,3,\dots 3\alpha$

$\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q})$ -vektor polarizacije J-te grane

M_α -masa atoma na mestu α u ćeliji

N -broj elementarnih ćelija

Za operatore $a_{\vec{q}j}$ i $a^+_{\vec{q}j}$ važe Bose komutacione relacije:

$$[a_{\vec{q}j},a^+_{\vec{q}'j'}]=\delta_{\vec{q}\vec{q}'}\delta_{jj'}$$

Izraz za $\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}$ napisaćemo kompaktnije, tako što ćemo u sumi koja sadrži operator $a_{\vec{q}j}$ staviti $\vec{q}\to-\vec{q}$ tako da imamo:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}=\sum_{j\vec{q}}\left[\frac{\hbar}{2M_\alpha N\omega_j(\vec{q})}\right]^{1/2}\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q})(a_{-\vec{q}j}+a^+_{\vec{q}j})e^{-i\vec{q}\vec{n}} \quad (3.5)$$

Ako izraze za $\vec{\xi}_{\vec{n}\alpha}$ i $\vec{\xi}_{\vec{m}\alpha}$ zamenimo u (3.3)dobijamo:

$$H_{int} = H_{int}^{(1)} + H_{int}^{(2)}$$

gde je:

$$H_{int}^{(1)} = \frac{i}{N^{1/2}} \sum_{j\alpha K q} \left(\frac{\hbar}{2M_\alpha N_j(q)}\right)^{1/2} \Delta_\alpha A_\alpha^+(\vec{K}-\vec{q}) A_\alpha(\vec{K})(a_{-\vec{q}j} + a_{\vec{q}j}^+)\vec{q}\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q})$$

i

$$H_{int}^{(2)} = \frac{i}{N^{1/2}} \sum_{j\alpha\beta\vec{K}\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2M_\alpha N_j(q)}\right)\left[M_{\alpha\beta}(\vec{K})\vec{K}\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q}) - M_{\alpha\beta}(\vec{K}-\vec{q})\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q})\right] \times$$
$$\times A_\alpha^+(\vec{K}-\vec{q}) A_\beta(\vec{K})(a_{-\vec{q}j} + a_{\vec{q}j}^+)$$

S obzirom da je $\Delta_\alpha \gg |M_{\alpha\beta}(\vec{K})|$ zanemarićemo $H_{int}^{(2)}$

Dalje,u kristalima sa kubnom simetriom,vektor polarizacije longitudinalne fononske grane je kolinearan sa talasnim vektorom fonona $\vec{q}$,tako da je u hamiltonijanu

$$H_{int}^{(1)} : \quad \vec{q}\cdot\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q}) = \vec{q}\,\vec{e}_\alpha(\vec{q})$$

samo za longitudinalnu granu,a za ostale je

$$\vec{q}\vec{e}_{\alpha j}(\vec{q}) = 0$$

Zbog toga otpada suma po indeksu „j", i konačno možemo pisati:

$$H_{int} \approx H_{int}^{(1)} = \frac{i}{N^{1/2}} \sum_{\alpha K q} \Delta_\alpha \left(\frac{\hbar}{2M_\alpha \omega(q)}\right)^{1/2} \vec{q}\vec{e}_\alpha(q) A_\alpha^+(\vec{K}-\vec{q}) A_\alpha(\vec{K})(a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}^+) \quad (3.$$

ili

$$H_{int} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\alpha K q} F_\alpha(\vec{q}) A_\alpha^+(\vec{K}-\vec{q}) A_\alpha(\vec{K})(a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}^+) \quad (3.7$$

gde je

$$F_\alpha(\vec{q}) = i\Delta_\alpha \left(\frac{\hbar}{2M_\alpha v(q)}\right)^{1/2} (\vec{q}\vec{e}_q) \qquad \omega(\vec{q}) = v(q) \quad (3.8)$$

U izrazu (3.7)preći ćemo sa operatora $A_\alpha(\vec{K})$ na operatore $B_\mu(\vec{K})$ pomoću transformacije

$$A_\alpha(\vec{K}) = \sum_{\mu=1}^{\sigma} U_{\alpha\mu}(\vec{K}) B_\mu(\vec{K})$$

$$H_{int} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{Kq} (a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}^+) \sum_{\alpha\mu'\mu} U_{\alpha\mu}^*(\vec{K}-\vec{q}) U_{\alpha\mu'}(\vec{K}) F_\alpha(\vec{q}) B_\mu^+(\vec{K}-\vec{q}) B_{\mu'}(\vec{K})$$

i

$$H_{int} = \sum_{\mu\mu' k q} \Phi_{\mu\mu'}(\vec{k},\vec{q}) B^{+}_{\mu}(\vec{k}-\vec{q}) B_{\mu'}(\vec{k})(a_{-\vec{q}} + a^{+}_{\vec{q}}) \tag{39}$$

de je

$$\Phi_{\mu\mu'}(\vec{k},\vec{q}) = \sum_{\alpha} U^{*}_{\alpha\mu}(\vec{k}-\vec{q}) U_{\alpha\mu'}(\vec{k}) F_{\alpha}(\vec{q}) \frac{1}{N}$$

II GLAVA

II.4. FROLICH-ova TRANSFORMACIJA

Uzimajući u obzir sva dosadašnja izvodjenja hamiltonijan dobija sledeći oblik:

$$H=\sum_{\mu\vec{k}} E_{\mu}(\vec{k})B_{\mu}^{+}(\vec{k})B_{\mu}(\vec{k})+\sum_{j\vec{k}}\hbar\omega_j(\vec{k})a_{j\vec{k}}^{+}a_{j\vec{k}}+$$

$$+\sum_{\mu\mu'\vec{q}\vec{k}}\Phi_{\mu\mu'}(\vec{k},\vec{q})B_{\mu}^{+}(\vec{k}-\vec{q})B_{\mu'}(\vec{k})(a_{-\vec{q}}+a_{\vec{q}}^{+})$$

gde je

$$\Phi_{\mu\mu'}(\vec{k},\vec{q})=\sum_{\alpha}U_{\alpha\mu}^{+}(\vec{k}-\vec{q})U_{\alpha\mu'}(\vec{k})F_{\alpha}(\vec{q})\frac{1}{N^{1/2}}$$

$$F_{\alpha}(\vec{q})=i\Delta_{\alpha}\left(\frac{\hbar}{2M_{\alpha}v|\vec{q}|}\right)^{1/2}\vec{q}\vec{e}_{\alpha}(\vec{q})$$

Iz uslova da je $H_{int}=H_{int}^{*}$ sledi:

$$\Phi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})=\Phi_{\nu\mu}^{*}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})$$

Pošto eksitoni interaguju samo sa longitudinalnim fononima, od fononskog hamiltonijana uzećemo deo koji se odnosi na longitudinalne fonone. Hamiltonijan koji sadrži eksitonski deo, fononski deo i eksiton -fonon interakciju ima sledeći oblik:

$$H=H_e+H_f+H_{ef} \tag{4.1}$$

gde je

$$H_e=\sum_{\mu\vec{k}}E_{\mu}(\vec{k})B_{\mu}^{+}(\vec{k})B_{\mu}(\vec{k}) \tag{4.2}$$

$$H_f=\sum_{\vec{k}}E_f(\vec{k})a_{\vec{k}}^{+}a_{\vec{k}} \qquad E_f(\vec{k})=\hbar v|\vec{k}| \tag{4.3}$$

$$H_{ef}=\sum_{\mu\nu\vec{k}\vec{q}}\Phi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})B_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}^{+}B_{\nu,\vec{k}}(a_{-\vec{q}}+a_{\vec{q}}^{+}) \tag{4.4}$$

Oznake koje su korišćene u gornjim formulama imaju sledeći smisao:

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

M_α -masa jonâ (molekula,atoma)-

v -brzina zvuka u kristalu

$B_\mu(\vec{k})$ i $a_{\vec{k}}$-eksitonski odnosno fononski operatori

Pošto je hamiltonijan (4.1) po strukturi sličan hamiltonijanu sistema elektrona sa dodatkom polja mehaničkih oscilacija u provodnicima,možemo izvršiti unitarnu transformaciju hamiltonijana (4.1)po analogiji sa Frolich-ovom tranaformaciom hamiltonijana u teoriji super provodljivosti.Unitarna transformacija koja novi hamiltonijan H_{ez} izražava preko starog H ima oblik:

$$H_{ez}=e^{-S}He^{S}\cong H-[S,H]+\frac{1}{2}[S,[S,H]] \tag{4.5}$$

gde je

$S=S_1-S_1^+$ $S^+=-S$ antiermitski operator

S_1 ćemo uzeti u obliku:

$$S_1=\sum_{ij\alpha\beta}X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})B^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}B_{j,\vec{\alpha}}a_{-\vec{\beta}} \tag{4.6}$$

$$S_1^+=\sum_{ij\alpha\beta}X^*_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})B^+_{j,\vec{\alpha}}B_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}a^+_{-\vec{\beta}} \qquad \vec{\alpha}=\vec{\alpha}''+\vec{\beta}=\vec{\alpha}''-\vec{\beta}''$$

$$S_1^+=\sum_{ij\alpha\beta}X^*_{ji}(\vec{\alpha}-\vec{\beta},-\vec{\beta})B^+_{i,\alpha-\beta}B_{j\vec{\alpha}}a^+_{\vec{\beta}} \tag{4.7}$$

Potržićemo sada komutatore u (4.5).Analogno sa Frolich-ovom transformaciom u teoriji super provodnosti funkcije $X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})$ ćemo odrediti iz uslova da u ekvivalentnom hamiltonijanu eliminišemo članove linearne po H_{ef}. Tako dobijeni ekvivalentni hamiltonijan ćemo usrednjiti zatim po fononskom vakumu.Za komutator $[S,H]$ koji figuriše u hamiltonijanu H_{ez} koristićemo jedan daleko pogodniji oblik za računanje

$$[S,H]=[S_1,H]-[S_1^+,H]=[S_1,H]+[S_1,H]^+ \tag{4.8}$$

Potrebno je znači odrediti samo komutator $[S_1,H]$

$$[S_1,H]=[S_1,H_e]+[S_1,H_f]+[S_1,H_{fe}]$$

Polazeći od komutacionih relacija

$$[B_{\mu\vec{k}},B^+_{\mu'\vec{k}'}]=\delta_{\mu\mu'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'} \qquad [B^+_{\mu\vec{k}},a^+_{\mu'\vec{k}''}]=0 \qquad [a_{\vec{k}'},a^+_{\vec{k}''}]=\delta_{\vec{k}'\vec{k}''}$$

dobićemo:

$$[S_1, H_e] = \sum_{ij\alpha\beta} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})[E_j(\vec{\alpha}) - E_i(\vec{\alpha}-\vec{\beta})]B^+_{i,\alpha-\beta} B_{j\alpha} a_{-\vec{\beta}} \qquad (4.9)$$

Isto tako:

$$[S_1, H_f] = \sum_{ij\alpha\beta} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta}) E_f(\vec{\beta}) B^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} B_{j\vec{\alpha}} a_{-\vec{\beta}} \qquad (4.10)$$

Posledji član će biti:

$$[S_1, H_{ef}] = \sum_{ij\alpha\beta\mu\nu k q} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta}) \Phi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) \{ [B^+_{i,\alpha-\beta} B_{j\alpha}, B^+_{\mu,k-q} B_{\nu k}] a_{-\beta} a_{-q} +$$

$$+ [B^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} B_{j\vec{\alpha}}, B^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}}] a_{-\vec{\beta}} a^+_{\vec{q}} + B^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} B_{j\vec{\alpha}} B_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}} [a_{-\vec{\beta}}, a^+_{\vec{q}}]$$

Kako ekvivalentni hamiltonijan H_{eq} usrednjavamo po fononsko vakumu

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

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

$$a_{-\vec{\beta}} a^+_{\vec{q}} = a^+_{\vec{q}} a_{-\beta} + \delta_{-\beta q} \qquad [B^+_{\mu\vec{k}'}, a^+_{\mu'\vec{k}'}] = 0$$

$$[B_{\mu\vec{k}}, B^+_{\mu'\vec{k}'}] = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \qquad [a_{\vec{k}}, a^+_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

dobijamo:

$$[S_1, H_{ef}] = \sum_{ij\alpha\beta} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta}) \Phi_{j\nu}(\vec{\alpha}-\vec{\beta}, -\vec{\beta}) B^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} B_{\nu,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} +$$

$$+ \sum_{ij\mu\nu\alpha\beta k} X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta}) \Phi_{\mu\nu}(\vec{k},-\vec{\beta}) B^+_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}} B^+_{\mu,\vec{k}+\vec{\beta}} B_{j\vec{\alpha}} B_{\nu\vec{k}} \qquad (4.11)$$

Sada možemo formirati kompletan komutator

$$[S, H] = [S_1, H] + [S_1, H]^+$$

$$[S, H] = \sum_{\mu\nu k q} X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})[E_\nu(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) + E_f(\vec{q})] B^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}} a_{-\vec{q}} +$$

$$+\sum_{\mu\nu k q} X^{*}_{\mu\nu}(\vec{k}-\vec{q}, -\vec{q})[E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})-E_{\nu}(\vec{k})+E_{f}(\vec{q})]B^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}B_{\nu,\vec{k}}a^{+}_{\vec{q}}+$$

$$+\sum_{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4 k_1 k_2 k_3}\{X_{\mu_1\mu_3}(\vec{k}_3, \vec{k}_3-\vec{k}_1)\Phi_{\mu_2\mu_4}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3, \vec{k}_1-\vec{k}_3)+$$

$$+X^{*}_{\mu_4\mu_2}(\vec{k}_2, \vec{k}_3-\vec{k}_1)\Phi^{*}_{\mu_3\mu_1}(\vec{k}_1, \vec{k}_1-\vec{k}_3)\}B^{+}_{\mu_1,\vec{k}_1}B^{+}_{\mu_2\vec{k}_2}B_{\mu_3\vec{k}_3}B_{\mu_4,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \qquad (4.12)$$

Za dobijanje ekvivalentnog hamiltonijana H_{eq} moramo naći i komutator

$$[S,\hat{L}]\equiv[S,[S,H]]=[S_1,[S,H]]+[S_1,[S,H]]^{+}=[S_1,\hat{L}]+[S_1,\hat{L}]^{+} \qquad (4.13)$$

gde je

$$S_1=\sum_{ij\alpha\beta}X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})B^{+}_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}B_{j\vec{\alpha}}a_{-\vec{\beta}} \qquad \hat{L}\equiv[S,H]$$

$$[S_1,\hat{L}]_{ef}=\sum_{ij\alpha\beta\mu\nu k q}X_{ij}(\vec{\alpha},\vec{\beta})X^{*}_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})[E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})-E_{\nu}(\vec{k})+E_{f}(\vec{q})]\times$$

$$\times B^{+}_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}B_{j\vec{\alpha}}B^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}B_{\nu\vec{k}}[a_{-\vec{\beta}},a^{+}_{\vec{q}}]=\sum_{ij\mu\nu\alpha q k}X_{ij}(\vec{\alpha},-\vec{q})X^{*}_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})\times$$

$$\times[E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})-E_{\nu}(\vec{k})+E_{f}(\vec{q})]B^{+}_{i,\vec{\alpha}+\vec{q}}B^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}B_{j\vec{\alpha}}B_{\nu\vec{k}}$$

odnosno

$$[S_1,\hat{L}]_{ef}=\sum_{\mu\nu\mu_1\mu_2 k_1 k q}X_{\mu_1\mu_2}(\vec{k}_1,-\vec{q})X^{*}_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})[E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})-E_{\nu}(\vec{k})+E_{f}(\vec{q})]\times$$

$$\times B^{+}_{\mu_1,\vec{k}_1+\vec{q}}B^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}B_{\mu_2\vec{k}_1}B_{\nu\vec{k}} \qquad (4.14)$$

Isto tako dobijamo:

$$[S_1^{+},\hat{L}]_{ef}=\sum_{ij\alpha\beta\mu\nu k q}X^{*}_{ji}(\vec{\alpha}-\vec{\beta},-\vec{\beta})X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})[E_{\nu}(\vec{k})-E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})+E_{f}(\vec{q})]\times$$

$$\times B^{+}_{i,\vec{\alpha}-\vec{\beta}}B_{j\vec{\alpha}}B^{+}_{\mu,\vec{k}-\vec{q}}B_{\nu\vec{k}}[a^{+}_{\vec{\beta}},a_{-\vec{q}}]=$$

$$=-\sum_{ij\mu\nu\alpha k q}X^{*}_{ji}(\vec{\alpha}-\vec{q},-\vec{q})X_{\mu\nu}(\vec{k},-\vec{q})[E_{\nu}(\vec{k})-E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})+E_{f}(\vec{q})]\times$$

$$\times B^{+}_{i,\vec{\alpha}-\vec{q}}B^{+}_{\mu,\vec{k}+\vec{q}}B_{j\vec{\alpha}}B_{\nu\vec{k}}=$$

$$=-\sum_{\mu_1\mu_2\mu\nu k_1 k q}X^{*}_{\mu_2\mu_1}(\vec{k}_1+\vec{q},\vec{q})X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})[E_{\nu}(\vec{k})-E_{\mu}(\vec{k}-\vec{q})+E_{f}(\vec{q})]\times$$

$$\times B^{+}_{\mu_1,\vec{k}_1+\vec{q}}B^{+}_{\mu\,\vec{k}-\vec{q}}B_{\mu_2\vec{k}_1}B_{\nu\vec{k}} \qquad (4.15)$$

Sada možemo napisati ekvivalentni hamiltonijan

$$H_{eq} \cong H - [S,H] + \frac{1}{2}[S,[S,H]]$$

u obliku

$$H_{eq} \cong \sum_{\mu\vec{k}} E_\mu(\vec{k}) B^+_{\mu\vec{k}} B_{\mu\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} E_f(\vec{k}) a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \sum_{\mu\nu k q} \{\Phi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) B^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}} a_{-\vec{q}} +$$
$$+ \Phi^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}) B^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}} a^+_{\vec{q}} \} -$$
$$-\sum_{\mu\nu k q} \{X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})[E_\nu(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) + E_f(\vec{q})] B^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}} a_{-\vec{q}} +$$
$$+ X^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})[E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) - E_\nu(\vec{k}) + E_f(\vec{q})] B^+_{\mu,\vec{k}-\vec{q}} B_{\nu\vec{k}} a^+_{\vec{q}}\} -$$
$$-\sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\\ \vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}} \{X_{\mu_1\mu_3}(\vec{k}_3,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\Phi_{\mu_2\mu_4}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3,\vec{k}_1-\vec{k}_3) + X^*_{\mu_1\mu_2}(\vec{k}_2,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\Phi_{\mu_3\mu_1}(\vec{k}_1,\vec{k}_1-\vec{k}_3)\}$$
$$\times B^+_{\mu_1\vec{k}_1} B^+_{\mu_2\vec{k}_2} B_{\mu_3\vec{k}_3} B_{\mu_4,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu\nu\\ k_1 k q}} \{X_{\mu_1\mu_2}(\vec{k}_1,-\vec{q}) X^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})[E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) - E_\nu(\vec{k}) + E_f(\vec{q})] +$$
$$+ X^*_{\mu_2\mu_1}(\vec{k}_1+\vec{q},\vec{q}) X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})[E_\nu(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) + E_f(\vec{q})]\} B^+_{\mu_1\vec{k}_1+\vec{q}} B^+_{\mu_1\vec{k}-\vec{q}} B_{\mu_2\vec{k}_1} B_{\nu\vec{k}} \qquad (4.16)$$

Funkcije $X_{\mu\nu}$ ćemo odrediti tako što ćemo sve članove linearne po interakciji izjednačiti sa nulom. Na taj način dobijamo:

$$X_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{\Phi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q})}{E_\nu(\vec{k}) - E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) + E_f(\vec{q})} \qquad (4.17)$$

$$X^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}) = \frac{\Phi^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})}{E_\mu(\vec{k}-\vec{q}) - E_\nu(\vec{k}) + E_f(\vec{q})} \qquad (4.18)$$

S obzirom da iz uslova $H_{ef} = H^+_{ef}$ sledi $\Phi_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \Phi^*_{\nu\mu}(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})$ lako je videti da su dva gornja uslova (4.17)i (4.18)ekvivalentna. Konačno ćemo H_{eq} usrednjiti po fononskom vakumu na sledeći način:

$$H'_{eq} = \langle 0 | H_{eq} | 0 \rangle = \sum_{\mu\vec{k}} E_\mu(\vec{k}) B^+_{\mu\vec{k}} B_{\mu\vec{k}} -$$
$$-\sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\\ \vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}} \left\{ \frac{\Phi_{\mu_1\mu_3}(\vec{k}_3,\vec{k}_3-\vec{k}_1)\Phi_{\mu_2\mu_4}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3,\vec{k}_1-\vec{k}_3)}{E_{\mu_3}(\vec{k}_3) - E_{\mu_1}(k_1) + E_f(\vec{k}_1-\vec{k}_3)} \right. +$$

$$+\frac{\Phi_{\mu_2\mu_4}(\vec{K}_1+\vec{K}_2-\vec{K}_3,\vec{K}_1-\vec{K}_3)\Phi_{\mu_3\mu_1}(\vec{K}_1,\vec{K}_1-\vec{K}_3)}{E_{\mu_2}(\vec{K}_2)-E_{\mu_4}(\vec{K}_1+\vec{K}_2-\vec{K}_3)+E_f(\vec{K}_1-\vec{K}_3)}\Big\}B^+_{\mu_1\vec{K}_1}B^+_{\mu_2\vec{K}_2}B_{\mu_3\vec{K}_3}B_{\mu_4\vec{K}_1+\vec{K}_2-\vec{K}_3}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\mu_1\mu_2\mu\nu}\Big\{\frac{\Phi^*_{\nu\mu}(\vec{K}-\vec{Q},-\vec{Q})\Phi_{\mu_1\mu_2}(\vec{K}_1,-\vec{Q})}{E_{\mu_2}(\vec{K}_1)-E_{\mu_1}(\vec{K}_1+\vec{Q})+E_f(\vec{Q})}+\frac{\Phi_{\mu\nu}(\vec{K},\vec{Q})\Phi^*_{\mu_2\mu_1}(\vec{K}_1+\vec{Q},\vec{Q})}{E_{\mu_1}(\vec{K}_1+\vec{Q})-E_{\mu_2}(\vec{K}_1)+E_f(\vec{Q})}\Big\}B^+_{\mu_1\vec{K}_1+\vec{Q}}B^+_{\mu\vec{K}-\vec{Q}}B_{\mu_2\vec{K}_1}B_{\nu\vec{K}}$$

poslednjem članu hamiltonijana izvršićemo smene:

$K_1+Q=K_1'$ $\quad K_1=K_3'$ $\quad K-Q=K_2'$ $\quad \mu_1=\mu_1'$

$K-Q=K_2'$ $\quad Q=K_1'-K_3'$ $\quad -Q=K_3'-K_1'$ $\quad \mu=\mu_2'$

$K_1=K_3'$ $\quad K=K_2'+K_1'-K_3'$ $\quad K_1+Q=K_1'$ $\quad \mu_2=\mu_3'$

$K=K_1'+K_2'-K_3'=K_4$ $\quad \nu=\mu_4$

a on postaje

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\\ \vec{K}_1\vec{K}_2\vec{K}_3}}\Big\{\frac{\Phi^*_{\mu_4\mu_2}(\vec{K}_2,\vec{K}_3-\vec{K}_1)\Phi_{\mu_1\mu_3}(\vec{K}_3,\vec{K}_3-\vec{K}_1)}{E_{\mu_3}(\vec{K}_3)-E_{\mu_1}(\vec{K}_1)+E_f(\vec{K}_3-\vec{K}_1)}+\frac{\Phi^*_{\mu_3\mu_1}(\vec{K}_1,\vec{K}_1-\vec{K}_3)\Phi_{\mu_2\mu_4}(\vec{K}_1+\vec{K}_2-\vec{K}_3,\vec{K}_1-\vec{K}_3)}{E_{\mu_1}(\vec{K}_1)-E_{\mu_3}(\vec{K}_3)+E_f(\vec{K}_3-\vec{K}_1)}\Big\}\times$$

$$\times B^+_{\mu_1\vec{K}_1}B^+_{\mu_2\vec{K}_2}B_{\mu_3\vec{K}_3}B_{\mu_4\vec{K}_1+\vec{K}_2-\vec{K}_3}$$

majući u vidu relacije $\Phi_{\mu\nu}(\vec{K},\vec{Q})=\Phi^*_{\mu\nu}(\vec{K}-\vec{Q},-\vec{Q})$ možemo isati

$$H'_{eq}=\sum_{\mu\vec{K}}E_\mu(\vec{K})B^+_{\mu\vec{K}}B_{\mu\vec{K}}+H_{int} \qquad (4.19)$$

gde je

$$H_{int}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\\ K_1K_2K_3}}\Phi^*_{\mu_4\mu_2}(\vec{K}_2,\vec{K}_3-\vec{K}_1)\Phi_{\mu_1\mu_3}(\vec{K}_3,\vec{K}_3-\vec{K}_1)\Big\{\frac{1}{E_\mu(\vec{K}_1)-E_{\mu_3}(\vec{K}_3)+E_f(\vec{K}_1-\vec{K}_3)}-$$

$$-\frac{1}{E_{\mu_3}(\vec{K}_3)-E_{\mu_1}(\vec{K}_1)+E_f(\vec{K}_1-\vec{K}_3)}-\frac{2}{E_{\mu_2}(\vec{K}_2)-E_{\mu_4}(\vec{K}_1+\vec{K}_2-\vec{K}_3)+E_f(\vec{K}_1-\vec{K}_3)}\Big\}B^+_{\mu_1\vec{K}_1}B^+_{\mu_2\vec{K}_2}B_{\mu_3\vec{K}_3}B_{\mu_4\vec{K}_4} \qquad (4.20)$$

Može se pokazati da je u izvesnom intervalu impulsa interakcija privlačna te može doći do stvaranja eksitonskih kaplji tj.do slepljivanja dva eksitona sa suprotnim impulsima.Ŭtom cilju ćemo izdvojiti članove za koje je

$\vec{K}_1=\vec{K}$ $\quad \vec{K}_2=-\vec{K}$ $\quad \vec{K}_3=\vec{Q}$ $\quad \vec{K}_4=-\vec{Q}$ $\quad \mu_1=\mu_2=\mu$ $\quad \mu_3=\mu_4=\nu$

pa dobijamo da je

$$\frac{1}{E_\mu(\vec{K})-E_\nu(\vec{Q})+E_f(\vec{K}-\vec{Q})}-\frac{1}{E_\nu(\vec{Q})-E_\mu(\vec{K})+E_f(\vec{K}-\vec{Q})}-\frac{2}{E_\mu(-\vec{K})-E_\nu(-\vec{Q})+E_f(\vec{K}-\vec{Q})}=$$

$$= \frac{E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}') - E_f(\vec{k}'-\vec{q}') + E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}') + E_f(\vec{k}'-\vec{q}') - 2[E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}') - E_f(\vec{k}'-\vec{q}')]}{[E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}')]^2 - E_f^2(\vec{k}'-\vec{q}')} =$$

$$= \frac{2E_f(\vec{k}'-\vec{q}')}{[E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}')]^2 - E_f^2(\vec{k}'-\vec{q}')}$$

koje kad uvrstimo u (4.2o)daje:

$$H_k = \sum_{\mu\nu k q} \frac{E_f(\vec{k}'+\vec{q}')\,\Phi^*_{\nu\mu}(\vec{k}',\vec{k}'+\vec{q}')\,\Phi_{\mu\nu}(\vec{q}',\vec{k}'+\vec{q}')}{[E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}')]^2 - E_f^2(\vec{k}'+\vec{q}')} B^+_{\mu\vec{k}'} B^+_{\mu,-\vec{k}'} B_{\nu,\vec{q}'} B_{\nu,-\vec{q}'} \tag{4.21}$$

Za redukovanu vrednost hamiltonijana dobijamo sledeći izraz:

$$H'_{ez} = \sum_{\mu\vec{k}'} E_\mu(\vec{k}') B^+_{\mu\vec{k}'} B_{\mu\vec{k}'} + \sum_{\mu\nu k q} J_{\mu\nu}(\vec{k}',\vec{q}') B^+_{\mu,\vec{k}'} B^+_{\mu,-\vec{k}'} B_{\nu,-\vec{q}'} B_{\nu,\vec{q}'} \tag{4.22}$$

gde je

$$J_{\mu\nu}(\vec{k}',\vec{q}') = \frac{E_f(\vec{k}'+\vec{q}')\,\Phi^*_{\nu\mu}(\vec{k}',\vec{k}'+\vec{q}')\,\Phi_{\mu\nu}(\vec{q}',\vec{k}'+\vec{q}')}{[E_\mu(\vec{k}') - E_\nu(\vec{q}')]^2 - E_f^2(\vec{k}'+\vec{q}')} \tag{4.23}$$

$$\Phi_{\mu\nu}(\vec{k}',\vec{q}') = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_\alpha U^*_{\alpha\mu}(\vec{k}'-\vec{q}')\,U_{\alpha\nu}(\vec{k}')\,F_\alpha(\vec{q}') \qquad F_\alpha(\vec{q}') = i\Delta_\alpha\left(\frac{\hbar}{2M_\alpha v}\right)^{1/2}|\vec{q}'|^{1/2}$$

Poslednji oblik hamiltonijana koristićemo u daljem računanju pri ispitivanju energetskog spektra eksitonskih kaplji.

II.5 SPEKTAR EKSITACIJA NASTALIH RASPADOM KAPLJE

Ako hamiltonijan (4.22) dijagonalizujemo kanoničkom transformacijom Bogoljubova prelaskom sa Boze operatora $B^+_{\mu,\vec{k}}$ i $B_{\mu,\vec{k}}$ na nove Boze operatore $b^+_{\mu\vec{k}}$ i $b_{\mu\vec{k}}$.

$$B_{\mu,\vec{k}} = U_\mu(\vec{k}) b_{\mu\vec{k}} + V_\mu(\vec{k}) b^+_{\mu-\vec{k}}$$
$$B^+_{\mu\vec{k}} = U_\mu(\vec{k}) b_{\mu,\vec{k}} + V_\mu(\vec{k}) b_{\mu,-\vec{k}} \tag{5.1}$$

dobijamo novi oblik hamoltonijana u kome funkcije $U_\mu(\vec{k})$ i $V_\mu(\vec{k})$ zbog kononičnosti transformacije zadovoljavaju uslov

$$U_\mu^2(\vec{k}) - V_\mu^2(\vec{k}) = 1 \tag{5.2}$$

Zadržavajući se samo na kvadratnim članovima po operatorima $b^+_{\mu,\vec{k}}$ i $b_{\mu\vec{k}}$ i izjednačavajući nedijagonalni deo hamiltoijana sa nulom dobijamo uslov

$$2U_\mu(\vec{k}) V_\mu(\vec{k}) E_\mu(\vec{k}) = -\Upsilon_\mu(\vec{k})[U_\mu^2(\vec{k}) + V_\mu^2(\vec{k})] \tag{5.3}$$

gde je

$$\Upsilon_\mu(\vec{k}) = 2\sum_{\nu\vec{q}} J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) U_\nu(\vec{k}) V_\nu(\vec{q}) \tag{5.4}$$

iz uslova (5.2) i (5.3) za funkcije $U_\mu(\vec{k})$ i $V_\mu(\vec{k})$ dobijamo sledeće uzraze

$$U_\mu^2(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{E_\mu(\vec{k})}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Upsilon_\mu^2(\vec{k})}}\right) \qquad V_\mu^2(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left(-1 + \frac{E_\mu(\vec{k})}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Upsilon_\mu^2(\vec{k})}}\right) \tag{5.5}$$

Zamenom ovih izraza u hamoltonijan

$$H'_{ez} = \sum_{\mu k}\{E_\mu(\vec{k})[U_\mu^2(\vec{k}) + V_\mu^2(\vec{k})] + 2\Upsilon_\mu(\vec{k}) U_\mu(\vec{k}) V_\mu(\vec{k})\} b^+_{\mu,\vec{k}} b_{\mu,\vec{k}} +$$
$$+ \sum_{\mu k}\{E_\mu(\vec{k}) V_\mu^2(\vec{k}) + \Upsilon_\mu(\vec{k}) U_\mu(\vec{k}) V_\mu(\vec{k})\} \tag{5.6}$$

dobijamo

$$H'_{ez} = \frac{1}{2}\sum_{\mu k}\{\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Upsilon_\mu^2(\vec{k})} - E_\mu(\vec{k})\} + \sum_{\mu k}\sqrt{E_\mu^2(\vec{k}) - \Upsilon_\mu^2(\vec{k})}\, b^+_{\mu\vec{k}} b_{\mu\vec{k}}$$

gde se funkcije $\Upsilon_\mu(\vec{K})$ odredjuju iz uslova:

$$\Upsilon_\mu(\vec{K}) + \sum_{\nu \vec{q}} \frac{J_{\mu\nu}(\vec{K},\vec{q})}{\sqrt{E_\nu^2(\vec{q}) - \Upsilon_\nu^2(\vec{q})}} \Upsilon_\nu(\vec{q}) = 0 \qquad \mu = 1,2,\dots\sigma \tag{5.7}$$

tj. preko sistema integralnih jednačina.

KOd rešavanja sistema integralnih jednačina u prvom redu treba odrediti funkciju $J_{\mu\nu}(\vec{K},\vec{q})$ .Uvodjenjem sledećih aproksimacija:

$$U_{\alpha\mu}(\vec{K}) = U_{\alpha\mu}(0)$$

$$\Phi_{\mu\nu}(\vec{q},\vec{K}+\vec{q})\,\Phi^*_{\nu\mu}(\vec{K},\vec{K}+\vec{q}) = \frac{1}{N}\,\frac{\hbar|\vec{K}+\vec{q}|}{2v}\,G_{\mu\nu}$$

$$G_{\mu\nu} = \sum_{\alpha\alpha'} \frac{\Delta_\alpha}{M_\alpha}\frac{\Delta_{\alpha'}}{M_{\alpha'}} U^*_{\alpha\mu}(0)\,U_{\alpha\nu}(0)\,U_{\alpha'\nu}(0)\,U^*_{\alpha'\mu}(0) \tag{5.8}$$

$$E_\mu(\vec{K}) = E_\mu(0) + \frac{\hbar^2K^2}{2m_\mu}$$

jednačina (4.23) dobija oblik

$$J_{\mu\nu}(\vec{K},\vec{q}) = \frac{2mG_{\mu\nu}}{N\hbar^2}\cdot\frac{1}{(\vec{K}-\vec{q})^2 - K_0^2 + \frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2}\cdot\frac{K^2-q^2}{(K+q)^2} + \left[\frac{2m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2(K+q)}\right]^2} \tag{5.9}$$

gde je

$$K_0 = \frac{2mv}{\hbar} \qquad \Delta_{\mu\nu} = E_\mu(0) - E_\nu(0)$$

Dalji postupak u radu je zamena sa srednjim vrednostima po svim impulsima sledećih izraza:

$$\frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2}\frac{K^2-q^2}{(\vec{K}+\vec{q})^2} \longrightarrow \frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{N^2\hbar^2}\sum_{Kq}\frac{K^2-q^2}{(\vec{K}+\vec{q})^2} = \tilde{Q}_{\mu\nu} \tag{5.10}$$

$$\left[\frac{2m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2(\vec{K}+\vec{q})}\right]^2 \longrightarrow \left[\frac{2m\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2}\right]^2\frac{1}{N^2}\sum_{Kq}\frac{1}{(\vec{K}+\vec{q})^2} = \tilde{P}_{\mu\nu} \tag{5.11}$$

Radi nalaženja $\tilde{Q}_{\mu\nu}$ i $\tilde{P}_{\mu\nu}$ prelazimo sa sume na integral po pravilu

$$\frac{1}{N}\sum_K \longrightarrow \frac{V}{N(2\pi)^3}\int d^3K \qquad \mu_0^3 = \frac{6\pi^2N}{V}$$

i koristimo sledeću aproksimaciju:

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

gde je μ_0 - granični impuls

Posle integracije dobija se:

$$\tilde{Q}_{\mu\nu} \cong -\frac{4m\Delta_{\mu\nu}}{35\hbar^2} = -Q^2_{\mu\nu} \tag{5.12}$$

$$\tilde{P}_{\mu\nu} \cong \frac{21}{10}\left[\frac{\frac{\Delta_{\mu\nu}}{\hbar^2\mu_0^2}}{2m}\right]^2 \mu_0^2 = P^2_{\mu\nu} \tag{5.13}$$

Zamenjujući izraze (5.12) i (5.13) u (5.9) dobijamo konačno

$$J_{\mu\nu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{N}\frac{2m^2 G_{\mu\nu}}{\hbar^2}\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})-(\kappa_0^2+Q^2_{\mu\nu}-P^2_{\mu\nu}} \tag{5.14}$$

Sobzirom da je

$$\Delta_{\mu\mu} = 0$$

sledi da su $Q_{\mu\nu}$ i $P_{\mu\nu}$ za $\mu=\nu$ takodje jednaki nuli,pa izraz (5.14) postaje:

$$J_{\mu\mu}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{N}\frac{2m^2 G_{\mu\mu}}{\hbar^2}\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2-\kappa_0^2} \tag{5.15}$$

Pri analizi sistema integrlnih jednačina (5.7) uzeta je u obzir i sledeća aproksimacija:

$$\frac{1}{\sqrt{E_\mu^2(\vec{q})-\Upsilon_\mu^2(\vec{q})}} \cong \frac{1}{E_\mu(\vec{q})} \cong \frac{1}{E_\mu(0)} \tag{5.16}$$

Zamenjujući izraze (5.14) i (5.16) u (5.7) dobijamo

$$\Upsilon_\mu(\vec{k}) + \frac{1}{N}\sum_{q\nu}\frac{2m^2}{\hbar^2}\frac{G_{\mu\nu}}{E_\mu(0)}\frac{1}{(\vec{k}-\vec{q})^2-(\kappa_0^2+Q^2_{\mu\nu}-P^2_{\mu\nu}}\Upsilon_\mu(\vec{q}) = 0$$

Ako izvršimo prelaz sa sume na integral po pravilu:

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

dobićemo sistem integralnih jednačina

$$\Upsilon_\mu(\vec{k}) + \frac{2m^2 V}{(2\pi)^3\hbar^2}\sum_{\mu=1}^{\sigma}\frac{G_{\mu\mu}}{E_\mu(0)}\int d^3q\frac{\Upsilon_\mu(\vec{q})}{(\vec{k}-\vec{q})^2-(\kappa_0^2+Q^2_{\mu\nu}-P^2_{\mu\nu})} = 0 \tag{5.17}$$

U sistemu (5.17) ćemo izvršiti sledeće Furije transformacije:

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

$$\Upsilon_\mu(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k}\,\Upsilon_\mu(\vec{k})e^{-i\vec{k}\vec{r}} \tag{5.18}$$

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

$$Y_{\mu\nu}(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\lambda\, e^{-i\vec{r}\lambda}\frac{1}{\lambda^2-(k_0^2+Q_{\mu\nu}^2-P_{\mu\nu}^2)} \tag{5.18}$$

Posle Furije transformacije sistem integralnih jednačina dobija oblik

$$\Psi_\mu(\vec{r})+D\sum_{\nu=1}^{\sigma}\frac{G_{\mu\mu}}{E_\mu(0)}Y_{\mu\nu}(\vec{r})\Psi_\nu(\vec{r})=0 \tag{5.19}$$

Gde je

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

Izraz (5.19) predstavlja homogen sistem algebarskih jednačina. Da bi sistem imao netrivijalna rešenja njegova determinanta mora biti jednaka nuli

$$\begin{vmatrix} 1+D\frac{G_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(\vec{r}) & D\frac{G_{12}}{E_2(0)}Y_{12}(\vec{r}) & \dots & D\frac{G_{1\sigma}}{E_\sigma(0)}Y_{1\sigma}(\vec{r}) \\ D\frac{G_{21}}{E_1(0)}Y_{21}(\vec{r}) & 1+D\frac{G_{22}}{E_2(0)}Y_{22}(\vec{r}) & \dots & D\frac{G_{2\sigma}}{E_\sigma(0)}Y_{2\sigma}(\vec{r}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ D\frac{G_{\sigma1}}{E_1(0)}Y_{\sigma1}(\vec{r}) & D\frac{G_{\sigma2}}{E_2(0)}Y_{\sigma2}(\vec{r}) & \dots & 1+D\frac{G_{\sigma\sigma}}{E_\sigma(0)}Y_{\sigma\sigma}(\vec{r}) \end{vmatrix}=0$$

Sobzirom da ćemo posebno posmatrati slučaj kada elementarna ćelija sadrži dva molekula, σ trba da ima vrednosti 1 i 2. Tom slučaju odgovaraju jednačine

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

$$D\frac{G_{21}}{E_1(0)}Y_{21}(\vec{r})\Psi_1(\vec{r})+\Big[1+D\frac{G_{22}}{E_2(0)}Y_{22}(\vec{r})\Big]\Psi_2(\vec{r})=0 \tag{5.20}$$

Jedno rešenje sistema homogenih jednačina je proizvoljno i može se napisati u obliku

$$\Psi_1(\vec{r})=C_1\delta(r-R) \tag{5.2}$$

C-proizvoljna konstanta i $|r|=R$

Drugo rešenje ima sledeći oblik:

$$\Psi_2(\vec{r}) = -C_1\,\delta(r-R)\frac{E_2(0)}{DG_{12}Y_{12}(\vec{r})}\left[1 + D\frac{G_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(\vec{r})\right] \tag{5.22}$$

Furije transformacije rešenja (5.21) i (5.22) su:

$$\Psi_1(\vec{K}) = \int d^3r\, C_1\,\delta(r-R)\,e^{i\vec{K}\vec{r}} = C\,\frac{\sin RK}{RK} \qquad C = 4\pi R^2 C_1$$

$$\Psi_2(\vec{K}) = -C\,\frac{E_2(0)\left[1+\frac{DG_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(R)\right]}{DG_{12}Y_{12}(R)}\,\frac{\sin RK}{RK} \tag{5.23}$$

Konačno, možemo izračunati i energije elementarnih eksitacija nastalih raspadom kaplje, koje su date formulama:

$$\mathcal{E}_1(\vec{K}) = \sqrt{E_1^2(\vec{K}) - \Psi_1^2(\vec{K})}$$

$$\mathcal{E}_2(\vec{K}) = \sqrt{E_2^2(\vec{K}) - \Psi_2^2(\vec{K})} \tag{5.24}$$

ali pre moramo odrediti funkcije $G_{\mu\nu}$ i $Y_{\mu\nu}(\vec{r})$ kao i energije eksitona $E_\mu(\vec{K})$. Utom cilju moramo rešiti sistem jednačina (1.35), da bi izračunali energije eksitonskih grana $E_1(\vec{K})$ i $E_2(\vec{K})$ kao i funkcije transformacija $U_{\mu\nu}(\vec{K})$.

II.6 EKSITONSKE KAPLJE U KRISTALU SA DVE MOLEKULE U ELEMENTARNOJ ĆELIJI

Opšte rešenje sistema jednačina (1.35) u slučaju kada kristal sadrži dve molekule u elementarnoj ćeliji dato je sledećim izrazima:

$$E_{1,2}(\vec{K}) = \frac{\mathcal{L}_{11}(\vec{K}) + \mathcal{L}_{22}(\vec{K})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22}}{2}\right)^2 + \mathcal{L}_{12}\mathcal{L}_{21}} \tag{6.1}$$

a matrica transformacije

$$\{U_{\alpha\beta}(\vec{K})\} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\gamma_K}{2} & \sin\frac{\gamma_K}{2} \\ \sin\frac{\gamma_K}{2} & -\cos\frac{\gamma_K}{2} \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Ugao $\gamma_{\vec{K}}$ odredjen je relaciom:

$$tg\,\gamma_{\vec{K}} = \frac{2\mathcal{L}_{12}(\vec{K})}{\mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})} \tag{6.3}$$

U gornjim formulama je $\mathcal{L}_{\alpha\beta}(\vec{K}) = \Delta_\alpha \delta_{\alpha\beta} + L_{\alpha\beta}(\vec{K})$

Kao što je ranije rečeno, pri rešavanju sistema integralnih jednačina (5.7), mora se koristiti aproksimacija u kojoj se zanemaruje zavisnost funkcija $U_{\alpha\beta}$ od talasnog vektora $\vec{K}$, jer inače račun postaje mnogo složeniji. Imajući u vidu opšte rešenje za $U_{\alpha\beta}(\vec{K})$ dato formulama (6.2) i (6.3) vidimo da $U_{\alpha\beta}$ neće zavisiti od $\vec{k}$, u opštem slučaju, akosu zadovoljena sledeća dva granična uslova

a) $\mathcal{L}_{12}(\vec{K}) \gg \mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})$ b) $\mathcal{L}_{12}(\vec{K}) \ll \mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})$

Upravo ta dva slučaja ćemo detaljnije analizirati, i to kada kristal sadrži dve identične i dve različite molekule u elementarnoj ćeliji

I Slučaj identičnih molekula

Ako su molekule u elementarnoj ćeliji identične, tada važe sledeće je dnakosti:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$$

$$M_1 = M_2 = M$$

ıkcije $G_{\mu\nu}$,koje su definisane relaciom (5.8) možemo odrediti koriste- relacije (6.2) i (6.3).Posle zamene dobijamo:

$$_{11} = G_{22} = \frac{\Delta^2}{M} \cos^2 \frac{\gamma_{\vec{K}} - \gamma_{\vec{K}}}{2} \qquad G_{12} = G_{21} = -\frac{\Delta^2}{M} \sin^2 \frac{\gamma_{\vec{K}} - \gamma_{\vec{K}}}{2} \tag{6.4}$$

Posmatrjmo sada granični slučaj $L_{12}(\vec{K}) \gg L_{11}(\vec{K}) - L_{22}(\vec{K})$
) što je pokazano u [2] § 3 i § 2 , u slučaju identičnih molekula,za ıvce normalne i paralelne ravni simetrije kristala je ispunjen uslov $(\vec{K}) = L_{22}(\vec{K})$, te je za te pravce gornji uslov automatski zadovoljen. relacije (6.3)sledi da je,u ovom slučaju $\gamma \approx \frac{\pi}{2}$,pa ralacije (6.4) da-
:

$$G_{11} = G_{22} = \frac{\Delta^2}{M} \qquad G_{12} = G_{21} = 0 \tag{6.5}$$

k relacija (6.1)daje

$$E_{1/2} \equiv \Delta + \frac{L_{11}(\vec{K}) + L_{22}(\vec{K})}{2} \pm L_{12}(\vec{K}) \tag{6.6}$$

Granični uslov $L_{12}(\vec{K}) \ll L_{11}(\vec{K}) - L_{22}(\vec{K})$
ovom slučaju je $\gamma \approx 0$ i

$$_{11} = G_{22} = \frac{\Delta^2}{M} \qquad G_{12} = G_{21} = 0 \tag{6.7}$$

. isto kao u slučaju a),dok za energije eksitona dobijamo:

$$E_1(\vec{K}) = \Delta + L_{11}(\vec{K}) + \frac{L_{21}(\vec{K})}{L_{11}(\vec{K}) - L_{22}(\vec{K})} \tag{6.8}$$

$$E_2(\vec{K}) = \Delta + L_{22}(\vec{K}) - \frac{L_{21}(\vec{K})}{L_{11}(\vec{K}) - L_{22}(\vec{K})} \tag{6.9}$$

obzirom da je $L_{21}(\vec{K}) \ll L_{11}(\vec{K}) - L_{22}(\vec{K})$,iz relacij a (6.8)i (6.9) vidimo da ovom slučaju u kristalu postoje dva,skoro nezavisna,tipa eksitona,ko- pripadaju pojedinim podrešetkama.
obzirom da i u slučaju a) i b)su funkcije G_{12} i G_{21} jednake nuli,u ıučaju identičnih molekula sistem jednačina (5.2o)se svodi na dva ide- ıična,i nezavisna,uslova za odredjivanje funkcija $\Upsilon_{1/2}(\vec{K})$,i to:

$$\Upsilon_1(\vec{K}) \left[1 + \frac{D\Delta^2}{ME_1(0)} Y_{11}(\vec{K}) \right] = 0$$

$$\Upsilon_2(\vec{K}) \left[1 + \frac{D\Delta^2}{ME_2(0)} Y_{22}(\vec{K}) \right] = 0 \tag{6.10}$$

Rešenje jednačina (6.1o) će biti oblika:

$$\Psi_{1,2}(\vec{r}) = C_{1/2}\,\delta(r - R_{1/2}) \tag{6.11}$$

za vrednosti $|\vec{r}| = R$ koja su rešenja jednačine:

$$1 + \frac{D\Delta^2}{ME_\mu(0)} Y_{\mu\mu}(\vec{r}) = 0 \qquad \mu = 1,2 \tag{6.12}$$

S obzirom na jednačine (5.18)je:

$$Y_{11}(\vec{r}) = Y_{22}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\lambda\, e^{-i\vec{r}\lambda}\,\frac{1}{\lambda^2 - K_0^2} = \frac{\cos K_0 r}{4\pi r} \tag{6.13}$$

te se (6.12) svodi na oblik:

$$\frac{ME_\mu(0)}{D\Delta^2}\,4\pi r = -\cos K_0 r \tag{6.14}$$

Dalje možemo uzeti da je $E_\mu(0) \cong \Delta$,te je

$$\frac{ME_\mu(0)}{D\Delta^2} = \frac{M\hbar^2}{2m^2\Delta} \approx 10^{-11}$$

odakle sledi da jednačina (6.14) ima oko 10^{10} rešenja.Za nas je interesantno samo prvo rešenje (za najmanje r),s obzirom da interakcija opada sa rastojanjem,i ono je približno odredjeno uslovom:

$$RK_0 \approx \frac{\pi}{2} \quad \text{odnosno} \quad R \approx \frac{\pi}{2K_0} \approx 10^{-6}\,\text{cm} \tag{6.15}$$

Konačno možemo odrediti i funkciju $\Psi_{1/2}(\vec{k})$

$$\Psi_{1/2}(\vec{K}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-\vec{K}\vec{r}}\,\Psi_{1/2}(\vec{r})\,d^3\vec{r} = C\,\frac{\sin RK}{RK} \tag{6.16}$$

Za energije elementarnih eksitacija,nastalih raspadom kaplje,dobijamo sledeće izraze:

$$\mathcal{E}_{1/2}(\vec{K}) = \sqrt{E_{1/2}^2(\vec{K}) - C^2\left(\frac{\sin RK}{RK}\right)^2} \tag{6.17}$$

Vidimo,da u slučaju identičnih molekula u elementarnoj ćeliji,dobijamo dve grane sa sličnim zakonom disprzije.

Konstantu C možemo odrediti iz uslova da za male talasne vektore energija eksitacije bude proporcionalna talasnom vektoru (tj.elementarne eksitacije slične fotonima).

S obzirom da je

$$\frac{\sin KR}{KR} \approx 1 - \frac{2}{3}(KR)^2$$

dobijamo $C^2 = E_{1,2}^2(0)$ i konačno:

$$\mathcal{E}_{1,2}(\vec{K}) = \sqrt{E_{1,2}^2(\vec{K}) - E_{1,2}^2(0)\frac{\sin^2 KR}{K^2R^2}} \tag{6.18}$$

za male talasne vektore dobijamo

$$\mathcal{E}_{1,2}(\vec{K}) = v_{1,2}\hbar K \tag{6.19}$$

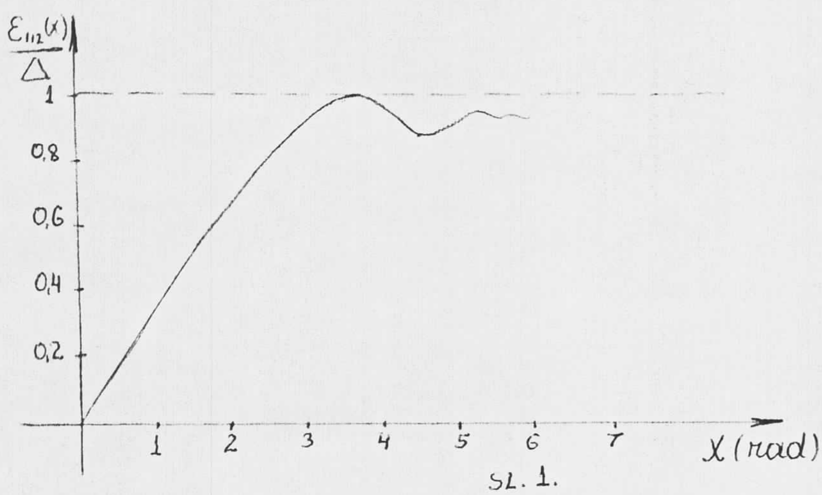
gde je brzina eksitacija

$$v_{1,2} = \sqrt{\frac{2}{3}}\,\frac{E_{1,2}(0)R}{\hbar} \approx \sqrt{\frac{2}{3}}\,\frac{\Delta\pi}{2K_0\hbar} \approx 10^{10}\,cm/s \tag{6.20}$$

Zakon disperzije dat relaciom (6.18) zadovoljava uslov superfluidnosti, jer je

$$\min \frac{\mathcal{E}_{1,2}(p)}{p} = C_{1,2} > 0$$

i ima tzv. rotonski minimum.u tački $RK_H \approx 4{,}5\,rad$,kao što je prikazano na sl.1,na kojoj je nacrtan grafik funkcije



$$\frac{\mathcal{E}_{1,2}(x)}{\Delta} = \sqrt{1 - \frac{\sin^2 x}{x^2}}$$

$$x = RK$$

sl. 1.

Napomenimo,na kraju,da u slučaju identičnih molekula u elementarnoj ćeliji,dobijamo dve grane elementarnih eksitacija sa superfluidnim zakonom disperzije,kao i u slučaju kad postoji samo jedna molekula u elementarnoj ćeliji (videti [4]).

II Slučaj različitih molekula u elementarnoj ćeliji

Ako u elementarnoj ćeliji postoje dve različite molekule, tada je $\Delta_1 \neq \Delta_2$ i $M_1 \neq M_2$ Opšte izraze za funkcije $G_{\mu\nu}$, koji bi bili analogni relacijama (6.4) nećemo napisati,već ćemo samo posmatrati granične slučajeve a) i b)

a) $L_{12}(\vec{K}) \gg \mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})$

U ovom slučaju $tg\,\gamma = 2L_{12}/\mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22}$, te ćemo staviti $\gamma = \frac{\pi}{2} - 2\delta$ $(\delta \to 0)$ Tada je

$$tg\left(\frac{\pi}{2} - 2\delta\right) = \frac{\cos 2\delta}{\sin 2\delta} = \frac{2L_{12}(\vec{K})}{\mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})}$$

odnosno

$$\delta \approx \frac{\mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})}{4L_{12}(\vec{K})} \approx \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{4L} \qquad L \equiv L_{12}(0) \tag{6.21}$$

Za matrične elemente $U_{\alpha\beta}$, na osnovu formula (6.2),(6.3) i (6.1o) dobijamo:

$$U_{11} = -U_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\delta}{\sqrt{2}} \qquad U_{21} = U_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\delta}{\sqrt{2}}$$

a za funkcije $G_{\mu\nu}$:

$$G_{11} = G_{22} \cong -\frac{1}{4}\left(\frac{\Delta_1}{M_1^{1/2}} + \frac{\Delta_2}{M_2^{1/2}}\right)^2 \quad ; \qquad G_{12} = G_{21} = \frac{1}{4}\left(\frac{\Delta_1}{M_1^{1/2}} - \frac{\Delta_2}{M_2^{1/2}}\right)^2 \tag{6.22}$$

b) $\mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22} \gg L_{12}(\vec{K})$

U ovom slučaju $tg\,\gamma = [2L_{12}(\vec{K})/\mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})] \to 0$ te možemo staviti $\gamma \approx 2\varepsilon$ $(\varepsilon \to 0)$, gde je

$$\varepsilon \approx \frac{L_{12}}{\mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{22}} \approx \frac{L}{\Delta_1 - \Delta_2} \tag{6.23}$$

Za matrične elemente $U_{\alpha\beta}$ dobijamo:

$$U_{11} = -U_{22} = 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \qquad U_{21} = U_{12} = \varepsilon$$

a za funkcije $G_{\mu\nu}$:

$$G_{11} = \left(\frac{\Delta_1}{M_1^{1/2}} + \varepsilon^2 \frac{\Delta_2}{M_2^{1/2}}\right)^2 \approx \frac{\Delta_1^2}{M_1}$$

$$G_{22} = \left(\frac{\Delta^2}{M_2^{1/2}} + \varepsilon^2 \frac{\Delta_1}{M_1^{1/2}}\right)^2 \approx \frac{\Delta_2^2}{M_2} \tag{6.24}$$

$$G_{12} = G_{21} \cong \varepsilon^2\left[\frac{\Delta_1}{M_1^{1/2}} - \frac{\Delta_2}{M_2^{1/2}}\right]^2$$

Vidimo da u slučaju različitih molekula u elementarnoj ćeliji funkcije G_{12} i G_{21}

su različite od nule, te su u ovom slučaju funkcije $\Upsilon_1(\vec{K}')$ i $\Upsilon_2(\vec{K}')$ date opštim relacijama (5.23):

$$\Upsilon_1(\vec{K}') = C\,\frac{\sin RK}{RK}$$

$$\Upsilon_2(\vec{K}') = -C\,\frac{E_2(0)\left[1+\frac{DG_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(R)\right]}{DG_{12}Y_{12}(R)}\,\frac{\sin RK}{RK} \tag{6.25}$$

gde je

$$Y_{11}(R) = \frac{\cos K_0 R}{4\pi R}$$

$$Y_{12}(R) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\lambda\, e^{-i\vec{r}\vec{\lambda}}\,\frac{1}{\lambda^2-(K_0^2+Q_{12}^2-P_{12}^2)} \tag{6.26}$$

Pri izračunavanju funkcije $Y_{12}(\vec{r})$ moramo imati u vidu sledeća dva slučaja:

1° $\quad K_0^2+Q_{12}^2-P_{12}^2 = \Pi_{12}^2 > 0$

2° $\quad K_0^2+Q_{12}^2-P_{12}^2 = -\Pi_{12} < 0$

U prvom slučaju dobijamo

$$Y_{12}^{(1)}(\vec{r}) = \frac{\cos \Pi_{12} r}{4\pi r} \tag{6.27}$$

a u drugom

$$Y_{12}^{(2)}(\vec{r}) = \frac{e^{-\Pi_{12} r}}{4\pi r} \tag{6.28}$$

Za energiju elementarnih eksitacija, nastalih raspadom kaplje, dobijamo:

$$\mathcal{E}_1(\vec{K}') = \sqrt{E_1^2(\vec{K}') - C^2\,\frac{\sin^2 KR}{K^2R^2}} \tag{6.29}$$

$$\mathcal{E}_2(\vec{K}') = \sqrt{E_2^2(\vec{K}') - C^2\,\frac{E_2^2(0)}{D^2G_{12}^2Y_{12}^2(R)}\left[1+\frac{DG_{11}}{E_1(0)}Y_{11}(R)\right]^2} \tag{6.30}$$

Konstantu C odredjujemo iz uslova da energija $\mathcal{E}_1(\vec{K}')$ bude linearna funkcija talasnog vektora u slučaju kada $|\vec{K}'|\to 0$, što daje:

$$C = E_1(0)$$

$$\mathcal{E}_1(\vec{K}') = \sqrt{E_1^2(\vec{K}') - E_1^2(0)\,\frac{\sin^2 KR}{(KR)^2}} \tag{6.31}$$

Vidimo da ova grana elementarnih eksitacija ima zakon disperzije analogan elementarnim eksitacijama u kristalima sa dve identične molekule (relacija (6.18)), pa prema tome ova grana zadovoljava uslov superfluidnosti i njen grafik je sličan grafiku na sl.1
Energija elementarnih eksitacija druge grane data je relacijom:

$$\mathcal{E}_2(\vec{K}) = \sqrt{E_2^2(\vec{K}) - \frac{E_1^2(0)E_2^2(0)}{D^2 G_{12}^2 Y_{12}^2(K)}\left[1 + \frac{DG_{11}Y_{11}(\vec{K})}{E_1(0)}\frac{\sin^2 KR}{(KR)^2}\right.} \qquad (6.32)$$

Ako stavimo $E_2(\vec{K}) \simeq E_2(0)$ (za male talasne vektore), tada iz (6.32) sledi da je spektar $\mathcal{E}_2(\vec{K})$ definisan samo za one vrednosti talasnog vektora koje zadovoljavaju nejednačinu:

$$\frac{\sin^2 KR}{(KR)^2} \leqslant \frac{D^2 G_{12}^2 Y_{12}^2(R)}{[E_1(0) + DG_{11}Y_{11}(R)]^2} \qquad (6.33)$$

Sada ćemo izvršiti približnu prosenu veličina sa desne strane nejednačine (6.33), da bi videli za koje vrednosti talasnog vektora je zakon disperzije (6.32) definisan. Ako uzmemo sledeći približne brojne vrednosti:

$$R = 10^{-6}\ cm$$

$$m = 10^{-27}\ gr \qquad M_1 \simeq M_2 \approx 10^{-22}\ gr \qquad \Delta_1 = E_1(0) = 4\cdot 10^{-12}\ erg$$

$$\Delta_2 \approx E_2(0) = 5\cdot 10^{-12}\ erg \qquad V = 1\ cm^3$$

dobijamo:

a) za $L_{12}(\vec{K}) \gg \mathcal{L}_{11}(\vec{K}) - \mathcal{L}_{22}(\vec{K})$

$$D = \frac{2m^2 V}{\hbar^2} \sim 1\left[\frac{g^2 cm^3}{erg^2 s^2}\right]$$

$$G_{11} \cong 2\cdot 10\left[\frac{erg^2}{g}\right] \qquad G_{12} \cong 2\cdot 10^{-3}\left[\frac{erg^2}{g}\right]$$

$$K_0^2 \approx 10^{12}\ cm^{-2} \qquad K_0^2 + Q_{12}^2 - P_{12}^2 \approx 10^{16}\ cm^{-2} > 0$$

$$Y_{11} \cong 10^5\ cm^{-1} \qquad Y_{12} = 10^5\ cm^{-1}$$

i (6.33) se svodi na sledeću nejednakost:

$$\sin KR \leqslant 10^{-4}\ KR \qquad (6.34)$$

Približna rešenja nejednačine (6.34)su $\sin KR \approx 0$ odnosno

$$KR \approx n\pi \qquad n = 1, 2, \ldots \tag{6.35}$$

b)za $L_{12}(\vec{K}') \ll \mathcal{L}_{11}(\vec{K}') - \mathcal{L}_{22}(\vec{K}')$,pri istim brojnim vrednostima dobijamo:

$$G_{11} \approx 2\cdot 10 \left[\frac{erg^2}{g}\right] \qquad G_{12} = 10^{-5}\left[\frac{erg^2}{g}\right]$$

odnosno

$$\sin KR \leqslant 10^{-3} KR \tag{6.36}$$

Prema tome u ovom slučaju rešenja se poklapaju sa (6.35),tj.

$$KR \approx n\pi \qquad n = 1, 2, \ldots \tag{6.37}$$

Na osnovu rezultata(6.35) i (6.37) zaključujemo da je energetski spektar $\mathcal{E}_2(\vec{K}')$ linijski,dok je za $K < \frac{\pi}{R} \approx 10^6 cm^{-1}$ $\mathcal{E}_2(\vec{K}')$ imaginarno,što znači da se za male talasne vektore druga grana prigušuje.Ovaj rezultat sličan je rezultatu dobijenom kod razmatranja eksitonskih kaplji u monomolekularnim kristalima sa dva pobudjena mloekularna (elektronska)nivoa (videti [5]).

II.7 ZAKLJUČAK

U radu je razmatran problem eksiton-fonon interakcije u kristalima sa dve molekule u elementarnoj ćeliji, sličnim metodom kojim se tretira i elektron-fonon interakcija u superprovodnicima. Frelihovom transformaciom hamiltonijana eksitoni+ fononi, pokazano je da eksiton-fonon interakcija dovodi do efektivne eksiton-eksiton interakcije, koja je u izvesnoj oblasti impulsa privlačna. Ona dovodi do slepljivanja dva eksitona sa suprotnim impulsima u eksitonsku kaplju. Koristeći „UV" transformaciju Bogoljubova, dobijen je zakon disperzije elementarnih eksitacija nastalih raspadom kaplje. Pokazano je, da u slučaju kada elementarna ćelija sadrži dve identične molekule, u kristalu se javljaju dve grane elementarnih eksitacija sa superfluidnim spektrom. U drugom slučaju kada se mlekule razlikuju, jedna grana elementarnih eksitacija ima superfluidan spektar, dok se druga grana za male talasne vektore prigušuje a za talasne vektore veće od $10^{6} cm^{-1}$ ima linijski spektar.

Napomenimo na kraju, da u ovom radu nije razmatrana repulzija medju eksitonima, jer ona nema bitnog uticija na formiranje eksitonskih kaplji s obzirom da je kratkog dometa ($\lesssim 10^{-8} cm$), dok je poluprečnik kaplje reda veličine $R = 10^{-6} cm$ i pored toga ona je značajna pri većim koncentracijama eksitona (videti [6]).

II.8 LITERATURA

[1] V.M.AGRANOVIĆ: Teorija eksitona

[2] A.S.DAVIDOV: Teorija molekularnih eksitona

[3] A.S.DAVIDOV: Teorija tvrdog tela

[4] S.D.STOJANOVIĆ,J.P.ŠETRAJČIĆ,M.J.ŠKRINJAR and B.S.TOŠIĆ:Phys.Stat.Sol.(b),79,433,(1977)

[5] D.LJ.MIRJANIĆ:Superfluidnost optičkim pobudjenjem za multinivosku eksitonsku šemu (diplomski rad)

[6] S.D.STOJANOVIĆ and M.j.ŠKRINJAR:Phys.Stat.Sol.(b),84,K1o1,(1977)