UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Ištvan Galamboš

NELINEARNA POPULACIJA EKSITONA

- diplomski rad -

Novi Sad 1978

Zahvaljujem se profesoru dr. Bratislavu Tošiću koji je rukovodio izradom ovog diplomskog rada.

Takodje se zahvaljujem R. Maksimoviću koji me je uključio u istraživanje tokom izrade njegove doktorske disertacije, tako da je deo rezultata ušao u ovaj diplomski rad.

S A D R Ž A J

U V O D

U vezi sa rastućom upotrebom lasera u svim oblastima života danas se mnogo radi na problemima konstrukcije takvih lasera koji bi radili u optimalnom režimu i sa maksimalnom ekonomičnosti.

Cilj diplomskog rada je da se ispitaju osobine nelinearne populacije eksitona u uslovima spoljašnje stimulacije i to preko mehanizma interakcije električno polje - dipol.

I. G L A V A :

ELEMENTI TEORIJE OPTIČKIH POBUDJENJA U KRISTALIMA

§ 1. Frenkelovi eksitoni

Pobudjenja u kristalima, koja su indukovana svetlošću, nazivaju se eksitoni. Postoje dva tipa eksitona:

- eksitoni Frenkela i
- eksitoni Vanije-Mota.

U energetskom smislu oba tipa eksitona su slični, jer im je energija reda veličine 3-5 eV tj. reda veličine energije vidljive svetlosti koja ih indukuje. Bitna razlika je u veličini njihovih radijusa, ako ih shvatimo kao kvazičestice sfernog oblika. Frenkelovi eksitoni imaju radijus reda veličine nekoliko angstrema, dok radijus eksitona Vanije-Mota dostiže stotinak angstrema.

Eksitoni Vanije-Mota se javljaju u poluprovodnicima i nastaju tako što svetlost iz valentne zone prebaci jedan elektron u provodnu zonu. To znači da se u valentnoj zoni pojavljuje "šupljina" koja se ponaša kao pozitivno naelektrisanje, dok je elektron u provodnoj zoni negativno naelektrisan. Ova dva raznoimena naelektrisanja privlače se Kulonovom silom i dok je ona dovoljno jaka da ih drži vezane u poluprovodniku ne teče struja, već se kompleks elektron-šupljina ponaša kao neutralna celina. Taj kompleks se pomera kroz kristal kao neki talas koji se naziva eksiton Vanije-Mota. U slučaju raskidanja Kulonovskih veza eksiton Vanije-Mota prestaje da postoji, elektron i "šupljina" počinju da se kreću nezavisno jedno od drugog i kroz poluprovodnik teče struja; u provodnoj zoni struja elektrona, a u valentnoj zoni struja "šupljina".

Kod Frenkelovih eksitona svetlost takodje stvara kompleks elektron-šupljina, ali ovaj neutralni kompleks ostaje na samom molekulu. Ali to ne znači da eksitacija ostaje lokalizovana na samo jednom molekulu. Ako se eksitacija pojavi na jednom molekulu u kristalu, menja se interakcija sa okolnim molekulima, usled čega dolazi do ekscitacije susednog molekula itd.tako da se posle izvesnog vremena prenese na sve molekule kristala.Ovakav talas pobudjenja naziva se Frenkelov eksiton.

Frenkelovi eksitoni najčešće se javljaju u molekularnim kristalima:antracenu,naftalinu,benzolu u čvrstom stanju i drugima.Molekuli ovakvih kristala su jako izraženi dipoli i zbog toga izmedju njih deluju sile dipol-dipolnog tipa.Potencijal dipol-dipolne interakcije izmedju molekula ima oblik

$$V_{\vec{n}\vec{m}} \sim \frac{1}{|\vec{n}-\vec{m}|^3} \qquad \text{I } 1.1$$

gde su $\vec{n}$ i $\vec{m}$ vektori čvorova kristalne rešetke.

Svetlost koja indukuje eksiton u molekulu može da izazove dva efekta:

-promenu stanja elektrona u molekulu,koja nastaje kao rezultat pobudjenja elektronskog podsistema u molekulu i

-promenu stanja unutrašnjih molekulskih vibracija.Ovakvi eksitoni nazivaju se vibroni.

Mi ćemo analizirati samo čiste eksitone Frenkela,tj.one eksitone koji nastaju usled promene stanja elektrona u individualnim molekulima.Kako se kod ovih eksitona radi o pobudjenjima elektrona u molekulu,ceo kristal se može tretirati kao sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama.U tom slučaju hamiltonijan sa dvočestičnim fermionskim interakcijama u reprezentaciji druge kvantizacije ima oblik

$$H=\sum_{\vec{n}f} E_{\vec{n}f}\,\alpha^{+}_{\vec{n}f}\alpha_{\vec{n}f}+\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\\ f_1f_2f_3f_4}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2f_3f_4)\,\alpha^{+}_{\vec{n}f_1}\alpha^{+}_{\vec{m}f_2}\alpha_{\vec{m}f_3}\alpha_{\vec{n}f_4} \qquad \text{I } 1.2$$

gde f,f_1,f_2,f_3,f_4 predstavljaju skupove kvantnih brojeva,koji karakterišu stanje elektrona u molekulu.

Ako sa $H_{\vec{n}}$ označimo hamiltonijan izolovanog molekula na mestu $\vec{n}$ na osnovu svojstvenog problema

$$H_{\vec{n}}\Psi_{\vec{n}f}=E_{\vec{n}f}\Psi_{\vec{n}f} \qquad \text{I } 1.3$$

zaključujemo,da su $E_{\vec{n}f}$ energije izolovanog molekula,dok su funkcije $\Psi_{\vec{n}f}$ svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula.Matrični element interakcije dva molekula sa raznim nivoima ima oblik

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2f_3f_4)=\int\Psi^*_{\vec{n}f_1}\Psi^*_{\vec{m}f_2}V_{\vec{n}\vec{m}}\Psi_{\vec{m}f_3}\Psi_{\vec{n}f_4}\,d\tau_{\vec{n}}\,d\tau_{\vec{m}} \qquad \text{I 1.4}$$

gde $d\tau_{\vec{n}}; d\tau_{\vec{m}}$ predstavljaju elemente zapremine prostora koji zauzimaju molekule na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$.

Operatori $\alpha^+_{\vec{n}f}$ i $\alpha_{\vec{n}f}$ kreiraju, odnosno anihiliraju elektron na čvoru $\vec{n}$ u stanju f.

Ograničićemo se na slučaj kada elektron u molekulu može da se nadje samo u dva stanja, osnovnom O i pobudjenom f. Ako elektrone pobudjuje monohromatska svetlost i ako je nivo f dosta udaljen od ostalih nivoa, ovakva predpostavka je opravdana. Osim toga predpostavićemo, da je elementarna ćelija kristala prosta. U tom slučaju indeksi f_1, f_2, f_3, f_4 uzimaju samo dve vrednosti i to O i f. Eksiton nastaje tako što kvant svetlosti u nekom molekulu prebaci elektron iz stanja O u stanje f. Pošto su elektroni povezani poljem interakcije V_{nm} ekscitacija se prenosi i na ostale molekule i taj talas pobudjenja naziva se eksiton.

Hamiltonijan (I 1.2) kao elektronski hamiltonijan sa dvočestičnim interakcijama nije zgodno rešavati, a fizički posmatrano, eksiton nije pobudjen elektron, već kvant pobudjenja molekula kristala. Zbog toga se umesto Fermi operatore $\alpha^+_{\vec{n}f}$ i $\alpha_{\vec{n}f}$ uvode novi operatori na sledeći način

$$P^+_{\vec{n}}=\alpha^+_{\vec{n}f}\alpha_{\vec{n}O} \qquad P_{\vec{n}}=\alpha^+_{\vec{n}O}\alpha_{\vec{n}f} \qquad \text{I 1.5}$$

čiji je fizički smisao očigledan. Operator $P^+_{\vec{n}}$ anihilira elektron u osnovnom stanju i kreira ga u pobudjenom stanju f. To znači da $P^+_{\vec{n}}$ kreira kvant elektronske ekscitacije od osnovnog do pobudjenog stanja. Operator $P_{\vec{n}}$ anihilira elektron u pobudjenom stanju f, a kreira ga u osnovnom O. Prema tome operator $P_{\vec{n}}$ anihilira kvant pobudjenja sa energijom $E_{\vec{n}f}-E_{\vec{n}O}$. Ovakvi operatori nazivaju se Pauli operatori. Komutacione relacije za Pauli operatore glase

$$\begin{aligned}
&[P_{\vec{n}},P^+_{\vec{m}}]=(1-2P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}})\delta_{\vec{n}\vec{m}}\\
&[P_{\vec{n}},P_{\vec{m}}]=[P^+_{\vec{n}},P^+_{\vec{m}}]=0 \qquad \vec{n}\neq\vec{m}\\
&P^2_{\vec{n}}=P^{+2}_{\vec{n}}=0\\
&P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}=\alpha^+_{\vec{n}f}\alpha_{\vec{n}f}=0 \ \text{ ili } 1
\end{aligned} \qquad \text{I 1.6}$$

Ako u hamiltonijanu (I 1.2) uzmemo u obzir činjenicu,da indeksi f_1,f_2,f_3,f_4 mogu uzimati samo dve vrednosti 0 i f i iskoristimo definiciju Pauli operatora i njihove komutacione relacije,dobijamo hamiltonijan sistema u paulionskoj reprezentaciji

$$H=H_0+\Delta\sum_{\vec{n}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{m}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} L_{\vec{n}\vec{m}}\left(P^+_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}\right) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \qquad I\,1.7$$

gde su oznake sledeće

$$\begin{aligned}
H_0 &= N\left[E_0+\frac{1}{2}V_0(0\,0\,0\,0)\right]\\
\Delta &= E_{\vec{n}f}-E_{\vec{n}0}-V_0(0000)+\frac{1}{2}\left[V_0(f00f)+V_0(0ff0)\right]\\
I_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{1}{2}\left[V_{\vec{n}\vec{m}}(f0f0)+V_{\vec{n}\vec{m}}(0f0f)\right]\\
L_{\vec{n}\vec{m}} &= V_{\vec{n}\vec{m}}(ff00)=V_{\vec{n}\vec{m}}(00ff)\\
M_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{1}{2}\left[V_{\vec{n}\vec{m}}(ffff)+V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)-V_{\vec{n}\vec{m}}(f00f)-V_{\vec{n}\vec{m}}(0ff0)\right]\\
V_0(f_1f_2f_3f_4) &= \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2f_3f_4)
\end{aligned} \qquad I\,1.8$$

Pri dobijanju hamiltonijana (I 1.7) iskoristili smo činjenicu,da se molekuli medjusobno ne razlikuju,pa $E_{\vec{n}f}$ i $E_{\vec{n}0}$ ne zavise od indeksa rešetke $\vec{n}$.Osim toga,pretpostavljeno je da kristal ima centar inverzije,koji se poklapa sa centrom inverzije izolovanog molekula,pa su matrični elementi tipa $V_{\vec{n}\vec{m}}(f000)$ i $V_{\vec{n}\vec{m}}(fff0)$ ravni nuli.

Sada ćemo izvršiti približnu drugu kvantizaciju,koju je predložio Bogoljubov i koja se sastoji u tome,što se hamiltonijan jako interagujućih čestica zameni ekvivalentnim hamiltonijanom slabo interagujućih čestica.Prelazeći sa Fermi na Pauli operatore,veliki deo fermionskih interakcija uključili smo u kvadratni deo paulionskog hamiltonijana,što znači,da smo sistem interagujućih čestica zamenuli gasom kvazičestica.

Sledeći korak je zamena Pauli operatora Boze operatorima po sledećim formulama

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

$$P_{\vec{n}}^{+} = B_{\vec{n}}^{+} \left[\sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\mu}}{(1+\mu)!} B_{\vec{n}}^{+\mu} B_{\vec{n}}^{\mu} \right]^{1/2} \approx B_{\vec{n}}^{+} - B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} \qquad I\ 1.9$$

$$P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} = \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\mu}}{(1+\mu)!} B_{\vec{n}}^{+\mu+1} B_{\vec{n}}^{\mu+1} \approx B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} - B_{\vec{n}}^{+2} B_{\vec{n}}^{2}$$

U toj aproksimaciji odbacuju se svi članovi četvrtog reda i više. Greška je utoliko manja, ukoliko je broj ekscitiranih molekula u kristalu manji.

Na osnovu toga, hamiltonijan približne druge kvantizacije za eksitonski sistem ima oblik

$$H = H_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} L_{\vec{n}\vec{m}} \left(B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{m}}^{+} + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \right) \qquad I\ 1.10$$

Kada se izvrši Furije transformacija Boze operatora

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

$$B_{\vec{n}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^{+} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}} \qquad I\ 1.11$$

gornji hamiltonijan postaje

$$H = H_0 + \sum_{\vec{k}} \left(\Delta + I_{\vec{k}} \right) B_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} L_{\vec{k}} \left(B_{\vec{k}}^{+} B_{-\vec{k}}^{+} + B_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) \qquad I\ 1.12$$

gde je

$$I_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} I_{\vec{n}0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}$$

$$L_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} L_{\vec{n}0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}} \qquad I\ 1.13$$

Spektar eksitona u harmonijskoj aproksimaciji se može dobiti dijagonalizacijom hamiltonijana (I 1.12). U tom cilju izvršimo prelaz na nove Boze operatore sledećim transformacijama

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

$$B_{\vec{k}}^{+} = U_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{+} + V_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} \qquad I\ 1.14$$

Transformacione funkcije $\mathcal{U}_{\vec{k}}$ i $\mathcal{V}_{\vec{k}}$ su po pretpostavci parne i realne funkcije i ako zadovoljavaju uslov

$$\mathcal{U}_{\vec{k}}^2 - \mathcal{V}_{\vec{k}}^2 = 1 \qquad I\ 1.15$$

onda su $b_{\vec{k}}$ i $b_{\vec{k}}^+$ takodje Boze operatori. Posle zamene (I 1.14) u hamiltonijan (I 1.12) dobijamo

$$H = H_0 + \sum_{\vec{k}} \left[\mathcal{V}_{\vec{k}}^2 (\Delta + I_{\vec{k}}) + \mathcal{U}_{\vec{k}} \mathcal{V}_{\vec{k}} L_{\vec{k}} \right] + \sum_{\vec{k}} \Big\{ (\Delta + I_{\vec{k}})(\mathcal{U}_{\vec{k}}^2 + \mathcal{V}_{\vec{k}}^2) + 2\mathcal{U}_{\vec{k}} \mathcal{V}_{\vec{k}} L_{\vec{k}} \Big\} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \Big\{ (\Delta + I_{\vec{k}}) \mathcal{U}_{\vec{k}} \mathcal{V}_{\vec{k}} + \frac{1}{2} L_{\vec{k}} (\mathcal{U}_{\vec{k}}^2 + \mathcal{V}_{\vec{k}}^2) \Big\} (b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}) \qquad I\ 1.16$$

Da bi se oslobodili nedijagonalnih članova proporcionalnih $b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}$ izjednačićemo koeficijent koji stoji uz njih sa nulom. Tako dobijamo

$$\begin{aligned} (\Delta + I_{\vec{k}}) \mathcal{U}_{\vec{k}} \mathcal{V}_{\vec{k}} + \frac{1}{2} L_{\vec{k}} (\mathcal{U}_{\vec{k}}^2 + \mathcal{V}_{\vec{k}}^2) &= 0 \\ \mathcal{U}_{\vec{k}}^2 - \mathcal{V}_{\vec{k}}^2 &= 1 \end{aligned} \qquad I\ 1.17$$

Rešenja ovog sistema su data sa

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta + I_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2}} + 1 \right] \\ \mathcal{V}_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta + I_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2}} - 1 \right] \end{aligned} \qquad I\ 1.18$$

$$\mathcal{U}_{\vec{k}} \mathcal{V}_{\vec{k}} = -\frac{1}{2} \frac{L_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2}} \qquad \mathcal{U}_{\vec{k}}^2 + \mathcal{V}_{\vec{k}}^2 = \frac{\Delta + I_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2}} \qquad I\ 1.19$$

Zamenom ovih rezultata u (I 1.16) dobijamo dijagonalizovan eksitonski hamiltonijan

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \left\{ \sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2} - \Delta - I_{\vec{k}} \right\} + \sum_{\vec{k}} \sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2}\; b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \qquad I\ 1.20$$

Zakon disperzije za eksitone

$$E(\vec{k}) = \frac{\partial H}{\partial (b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}})} = \sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L_{\vec{k}}^2} \qquad I\ 1.21$$

znamo da je $\Delta \sim 3 - 5$ eV

$I_{\vec{k}}$ i $L_{\vec{k}}$ su $\sim 0{,}1 - 0{,}01$ eV

Pa na osnovu toga, možemo koren u formuli (I 1.21) razviti u red

$$E(\vec{k})=(\Delta+I_{\vec{k}})\sqrt{1-\frac{L_{\vec{k}}^2}{(\Delta+I_{\vec{k}})^2}}\approx(\Delta+I_{\vec{k}})\left\{1-\frac{1}{2}\frac{L_{\vec{k}}^2}{(\Delta+I_{\vec{k}})^2}\right\}=$$

$$=\Delta+I_{\vec{k}}-\frac{1}{2}\frac{L_{\vec{k}}^2}{\Delta+I_{\vec{k}}}\approx\Delta+I_{\vec{k}}-\frac{L_{\vec{k}}^2}{2\Delta}$$

tako da je približan izraz za energiju eksitona glasi

$$E(\vec{k})=\Delta+I_{\vec{k}}-\frac{L_{\vec{k}}^2}{2\Delta} \qquad \text{I 1.22}$$

Poslednji član je došao od onih delova koji ne održavaju broj kvazičestica. Ova popravka je mala, tj. $\Delta \gg L_{\vec{k}}$ pa ako se zanemari ovaj član, imamo

$$E(\vec{k})=\Delta+I_{\vec{k}} \qquad \text{I 1.23}$$

Ranije smo definisali

$$I_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}} I_{\vec{n}0}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}$$

Za prostu kubnu strukturu postoji 6 najbližih suseda

$$I_{\vec{k}}=I\left(e^{ik_xa}+e^{-ik_xa}+e^{ik_ya}+e^{-ik_ya}+e^{ik_za}+e^{-ik_za}\right) \qquad \text{I 1.24}$$

gde je I vrednost interakcije za najbliže susede, a "a" je konstanta kristalne rešetke. Na osnovu toga je

$$I_{\vec{k}}=2I(\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_za) \qquad \text{I 1.25}$$

Za male talasne vektore, tj. kada je $k_ia \ll 1$, imamo

$$\cos k_ia\approx 1-\frac{1}{2}k_i^2a^2 \qquad \text{I 1.26}$$

pa na osnovu toga dobijamo

$$I_{\vec{k}}=6I-Ia^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)=6I-Ia^2k^2=6I-\frac{\hbar^2k^2}{\frac{\hbar^2}{Ia^2}} \qquad \text{I 1.27}$$

i ako to zamenimo u izraz za energiju eksitona, dobijamo

$$E(\vec{k})=\Delta+6I-\frac{\hbar^2k^2}{\frac{\hbar^2}{Ia^2}} \qquad \text{I 1.28}$$

uvodeći oznaku $\mathcal{J}=\Delta+6I$ gornji izraz postaje

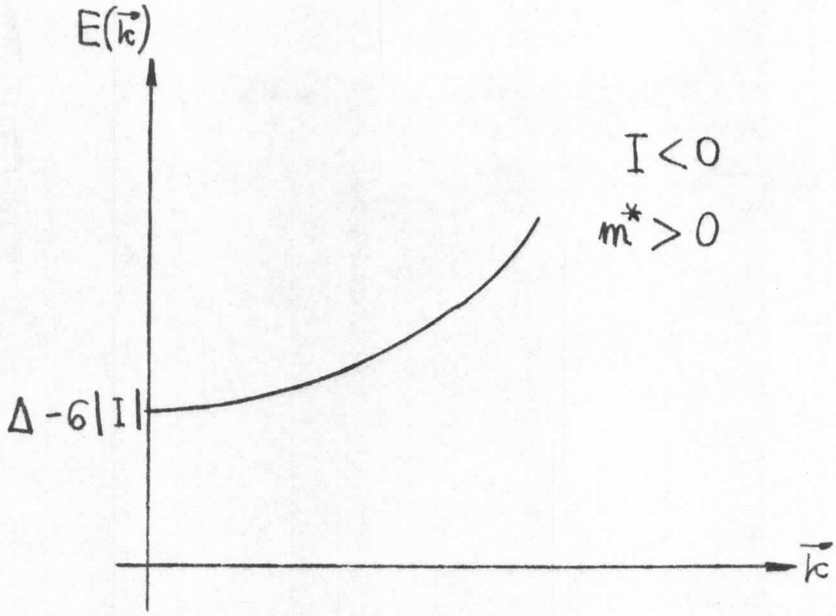
$$E(\vec{k})=\mathcal{J}-\frac{\hbar^2k^2}{\frac{\hbar^2}{Ia^2}}=\mathcal{J}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*} \qquad \text{I 1.29}$$

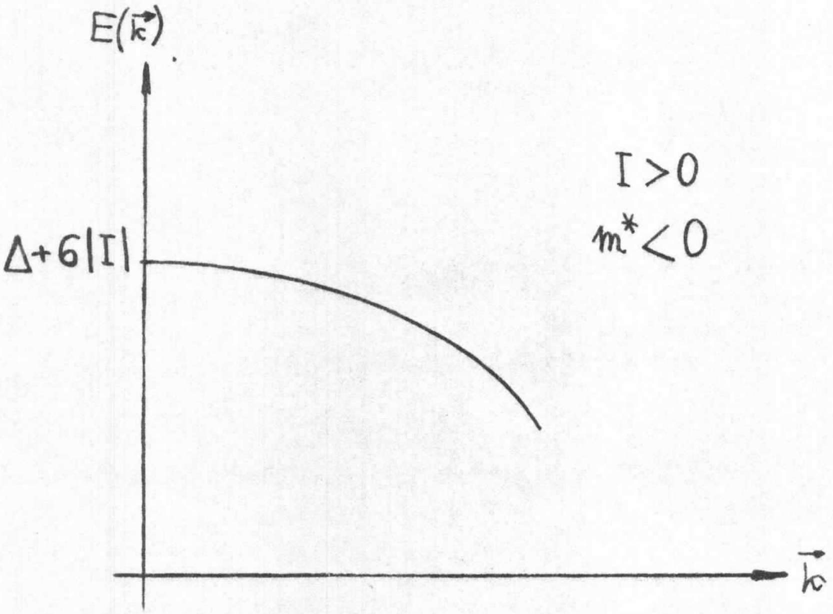
gde smo stavili

$$m^*=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{Ia^2} \qquad \text{I 1.30}$$

Odavde se vidi, da se eksiton u oblasti malih talasnih vektora ponaša kao čestica sa efektivnom masom $m^*=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{Ia^2}$

Kada je matrični element $I<0$ eksiton ima pozitivnu efektivnu masu ili drugim rečima, svetlost u kristalu ima pozitivnu disperziju, dok za $I>0$ eksiton ima negativnu efektivnu masu (negativna disperzija). Ova dva slučaja grafički se mogu predstaviti kao na sledećim grafikonima





§ 2.Normalni elektromagnetni talasi

U prvom paragrafu analizirane su elementarne optičke ekscitacije kristala,eksitoni,čiji je karakter definisan hamiltonijanom eksitona.Kada,osvetljavajući kristal,stvorimo eksitone,moramo voditi računa i o svetlosti (polju fotona),koja stvara eksitone i o interakciji izmedju upadne svetlosti i storenih eksitona.To zahteva analizu sistema,čiji se hamiltonijan sastoji iz tri dela:hamiltonijana eksitona,hamiltonijana polja transverzalnih fotona i hamiltonijana interakcije izmedju stvorenih eksitona i fotona.

Na osnovu eksperimentalnih činjenica,pored zakona disperzije za eksitone,nadjen je još jedan zakon disperzije,koji eksitonska teorija nije mogla da objasni.Ove druge kvazičestice bile su po svojim osobinama više slične fotonima,nego eksitonima.Na osnovu toga,pretpostavilo se,da u kristalu postoje neke hibridne ekscitacije,koje su "smeša" eksitona i transverzalnih fotona.Agranovič je 1959.godine dao matematičku teoriju ovih hibridnih ekscitacija i nazvao ih polaritonima.

Kada se eksitonski i fotonski sistemi posmatraju odvojeno,a interakcija izmedju njih smatra se za malu perturbaciju,onda je takav prilaz pogrešan,jer interakcija izmedju eksitona i fotona u najvećem broju slučajeva je istog reda veličine kao i energije samih eksitona i fotona.Prilaz je nailazio na teškoće i u domenu eksiton-foton rezonance,jer se u ovoj oblasti pojavili su singulariteti u svim fizičkim veličinama,koje karakterišu optičke pojave. Ove teškoće otpadaju kada se pri analiziranju optičkih pojava predje u takozvanu polaritonsku reprezentaciju.

Realno opisivanje optičkih pojava u kristalu zahteva analizu hamiltonijana

$$H=H_e+H_{fot}+H_{int} \qquad \text{I } 2.1$$

gde je H_e hamiltonijan eksitona,koji je analiziran u prvom paragrafu i dat je formulom (I 1.7).H_f je hamiltonijan polja transverzalnih fotona i dat je izrazom

$$H_{fot}=\sum_{\vec{k}j}\hbar c|\vec{k}|a^{+}_{\vec{k}j}a_{\vec{k}j} \qquad I\,2.2$$

gde j označava dve transverzalne grane polarizacije. $a^{+}_{\vec{k}j}$ i $a_{\vec{k}j}$ su operatori kreacije i anihilacije fotona sa talasnim vektorom $\vec{k}$ i polarizacije j. U gornjem izrazu ispuštena je energija nultih oscilacija elektromagnetnog polja $\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}j}\hbar c|\vec{k}|$.

Kako su eksitonska pobudjenja pobudjenja elektronskog podsistema u kristalu, a polje fotona karakteriše se vektorskim potencijalom elektromagnetnog polja, do hamiltonijana interakcije može se doći razmatranjem ponašanja elektrona u elektromagnetnom polju.

Iz klasične elektrodinamike poznato je impuls elektrona u elektromagnetnom polju

$$\vec{\mathcal{P}}=\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A} \qquad I\,2.3$$

gde je $\vec{p}$ stvarni impuls elektrona, e naelektrisanje elektrona, a $\vec{A}$ vektorski potencijal elektromagnetnog polja. Na osnovu toga, energija elektrona u elektromagnetnom polju je

$$E_e=\frac{\vec{\mathcal{P}}^2}{2m_e}=\frac{\vec{p}^2}{2m_e}-\frac{e}{m_ec}\vec{A}\cdot\vec{p}+\frac{e^2}{2m_ec^2}\vec{A}^2 \qquad I\,2.4$$

Prvi član ušao je u hamiltonijan $H_{\vec{n}}$ dok treći član definiše energiju "plazmenih" oscilacija i ovde nije uzet u obzir, jer energiju optičkih sistema očitavamo od nivoa "plazmenih oscilacija. Prema tome drugi član predstavlja hamiltonijan interakcije elektrona sa poljem transverzalnih fotona. U kristalu, ovakvu interakciju vrši svaki elektron na svakom čvoru, pa se ukupan hamiltonijan interakcije dobija, kada se izvrši sumiranje po svim molekulima i po svim naelektrisanjima unutar jednog molekula

$$H_{int}=-\frac{\vartheta e}{m_ec}\sum_{\vec{n}}\vec{A}_{\vec{n}}\cdot\vec{p}_{\vec{n}} \qquad I\,2.5$$

gde ϑ predstavlja broj elektrona u molekulu.

Elektronski impuls je jednočestični fermionski operator i u reprezentaciji druge kvantizacije ima oblik

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}}=-i\hbar\sum_{f_1f_2}\left[\int\Psi^{*}_{\vec{n}f_1}\nabla_{\vec{n}}\Psi_{\vec{n}f_2}\,d\tau_{\vec{n}}\right]\alpha^{+}_{\vec{n}f_1}\alpha_{\vec{n}f_2} \qquad I\,2.6$$

Indeksi f_1 i f_2 uzimaju vrednost 0 ili f, pa se operator impulsa može izraziti preko Pauli operatora, posle Furije transformacije funkcija stanja elektrona

$$\psi^*_{\vec{n}f_1}=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3\vec{k}_1\,\psi^*_{\vec{k}_1f_1}e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{n}}$$

$$\psi_{\vec{n}f_2}=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3\vec{k}_2\,\psi_{\vec{k}_2f_2}e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{n}}$$

u obliku

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}}=\sum_{f_1f_2}\vec{Q}_{f_1f_2}\alpha^+_{\vec{n}f_1}\alpha_{\vec{n}f_2} \qquad \text{I 2.7}$$

gde je

$$\vec{Q}_{f_1f_2}=\frac{\hbar}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k}_1\,d^3\vec{k}_2\,d\tau_{\vec{n}}\,\psi^*_{\vec{k}_1f_1}\psi_{\vec{k}_2f_2}\vec{k}_2\,e^{i\vec{n}\cdot(\vec{k}_2-\vec{k}_1)} \qquad \text{I 2.8}$$

Izraz (I 2.7) u razvijenom obliku je sledeći

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}}=\vec{Q}_{oo}\alpha^+_{\vec{n}o}\alpha_{\vec{n}o}+\vec{Q}_{ff}\alpha^+_{\vec{n}f}\alpha_{\vec{n}f}+\vec{Q}_{of}\alpha^+_{\vec{n}o}\alpha_{\vec{n}f}+\vec{Q}_{fo}\alpha^+_{\vec{n}f}\alpha_{\vec{n}o}=$$
$$=\vec{Q}_{oo}+(\vec{Q}_{ff}-\vec{Q}_{oo})P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+\vec{Q}_{fo}P^+_{\vec{n}}+\vec{Q}_{of}P_{\vec{n}}$$

Prilikom zamene u hamiltonijan interakcije član $\vec{Q}_{oo}$ daje konstantnu popravku energije,koja se ne uzima u obzir,a član proporcionalan $(\vec{Q}_{ff}-\vec{Q}_{oo})$ takodje se ne uzima u obzir.Prema tome,uvodeći oznaku $\vec{Q}_{fo}=\vec{Q}_{of}=\vec{Q}_f$ operator impulsa se može napisati kao

$$\hat{\vec{p}}_{\vec{n}}=\vec{Q}_f(P^+_{\vec{n}}+P_{\vec{n}}) \qquad \text{I 2.9}$$

Iz teorije kvantovanja elektromagnetnog polja znamo da je

$$\vec{A}_{\vec{n}}=\sum_{\vec{k}j}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{Nv|\vec{k}|}}\,\vec{l}_{\vec{k}j}(a_{\vec{k}j}+a^+_{-\vec{k}j})e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}} \qquad \text{I 2.10}$$

Ako u (I 2.9) izvršimo Furije transformaciju Pauli operatora

$$P_{\vec{n}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}P_{-\vec{k}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}}$$
$$P^+_{\vec{n}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}P^+_{\vec{k}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}} \qquad \text{I 2.11}$$

zatim kombinujemo ove formule,dobijamo hamiltonijan interakcije

$$H_{int}=\sum_{\vec{k}j}\vec{D}_{\vec{k}f}\,\vec{l}_{\vec{k}j}(a_{\vec{k}j}+a^+_{-\vec{k}j})(P^+_{\vec{k}}+P_{-\vec{k}}) \qquad \text{I 2.12}$$

gde je

$$\vec{D}_{\vec{k}f}=-\frac{e}{m_e}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{v|\vec{k}|c}}\,\vec{Q}_f \qquad \text{I 2.13}$$

dipolni moment prelaza u molekulu.

Na osnovu približne formule prelaza sa Pauli na Boze operatore

$$P_{\vec{n}}\cong B_{\vec{n}}-B^+_{\vec{n}}B_{\vec{n}}B_{\vec{n}}$$
$$P^+_{\vec{n}}\cong B^+_{\vec{n}}-B^+_{\vec{n}}B^+_{\vec{n}}B_{\vec{n}} \qquad \text{I 2.14}$$

posle Furije transformacije operatora $P_{\vec{n}}$ i $B_{\vec{n}}$ dobijamo

$$P_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{\lambda}_1\vec{\lambda}_2} B^+_{\vec{\lambda}_2} B_{\vec{\lambda}_1} B_{\vec{k}-\vec{\lambda}_1+\vec{\lambda}_2} \approx B_{\vec{k}}$$

$$P^+_{\vec{k}} = B^+_{\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{\lambda}_1\vec{\lambda}_2} B^+_{\vec{k}-\vec{\lambda}_1+\vec{\lambda}_2} B^+_{\vec{\lambda}_1} B_{\vec{\lambda}_2} \approx B^+_{\vec{k}} \qquad \text{I } 2.15$$

ako pretpostavimo da eksiton interaguje samo sa jednom fotonskom granom dobićemo hamiltonijan interakcije eksitona i fotona u harmonijskoj aproksimaciji

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} \vec{D}_{\vec{k}f}\, \vec{l}_{\vec{k}} \left(B^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + a^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + B^+_{\vec{k}} a^+_{-\vec{k}} + a_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) \qquad \text{I } 2.16$$

Početni hamiltonijan (I 2.1) možemo napisati u obliku

$$H = \sum_{\vec{k}} E_e(\vec{k})\, b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} E_{ft}(\vec{k})\, a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} \left(B^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + a^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + B^+_{\vec{k}} a^+_{-\vec{k}} + a_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) \qquad \text{I } 2.17$$

gde je

$$E_e(\vec{k}) = \sqrt{(\Delta + I_{\vec{k}})^2 - L^2_{\vec{k}}}$$

$$E_{ft}(\vec{k}) = \hbar c |\vec{k}| \qquad \text{I } 2.18$$

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \frac{\Delta + I_{\vec{k}}}{E_e(\vec{k})} \vec{D}_{\vec{k}f}\, \vec{l}_{\vec{k}}$$

Hamiltonijan (I 2.17) opisuje harmonijski proces u sistemu eksitona i fotona i treba ga dijagonalizovati. Zbog toga ga pišemo u pogodnijem obliku

$$H = \sum_{\mu\nu=1}^{2} M_{\mu\nu}\, b^+_\mu b_\nu + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^{2} N_{\mu\nu} \left(b^+_\mu b^+_\nu + b_\nu b_\mu \right) \qquad \text{I } 2.19$$

gde je

$$M_{11} = E_e(\vec{k}) \qquad M_{22} = E_{ft}(\vec{k}) \qquad M_{12} = M_{21} = \mathcal{E}_{\vec{k}}$$

$$N_{11} = N_{22} = 0 \qquad N_{12} = N_{21} = \mathcal{E}_{\vec{k}} \qquad \text{I } 2.20$$

$$b_1 = B_{\vec{k}} \qquad b_2 = a_{\vec{k}}$$

Dijagonalizaciju hamiltonijana (I 2.19) izvršićemo tako što ćemo iskoristiti Hajzenbergove jednačine kretanja i izvršiti dijagonalizaciju po Tjablikovu, koja direktno daje zakon disperzije polaritona. Hajzenbergova jednačina kretanja bilo koje fizičke veličine

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A, H] \qquad \text{I } 2.21$$

a za naš slučaj je

$$i\hbar \frac{db_\mu(t)}{dt} = [b_\mu, H]_{t=0} = \sum_{\nu=1}^{2} M_{\mu\nu} b_\nu + \sum_{\nu=1}^{2} N_{\mu\nu} b_\nu^+ \qquad \text{I 2.22}$$

čime smo uveli naš hamiltonijan u Hajzenbergove jednačine kretanja. Pošto $b_\mu(t)$ nije konstanta kretanja, prelazimo na nove operatore $C_s(t)$ sledećom transformacijom

$$b_\mu(t) = \sum_{s=1}^{2} \left[U_{\mu s} C_s e^{-iEt} + V_{\mu s}^* C_s^+ e^{iEt} \right] \qquad \text{I 2.23}$$

Da bi ova transformacija bila kanonična, operatori C_s i C_s^+ moraju biti Boze operatori. Uslove kanoničnosti transformacije izvešćemo za momenat t=0

$$b_\mu = \sum_{s=1}^{2} (U_{\mu s} C_s + V_{\mu s}^* C_s^+)$$

$$b_\nu^+ = \sum_{t=1}^{2} (U_{\nu t}^* C_t^+ + V_{\nu t} C_t) \qquad \text{I 2.24}$$

odavde je

$$\delta_{\mu\nu} = [b_\mu, b_\nu^+] = \sum_{st=1}^{2} \{ U_{\mu s} U_{\nu t}^* [C_s, C_t^+] + V_{\mu s}^* V_{\nu t} [C_s^+, C_t] +$$

$$+ U_{\mu s} V_{\nu t} [C_s, C_t] + U_{\nu t}^* V_{\mu s}^* [C_s^+, C_t^+] \} =$$

$$= \sum_{st=1}^{2} (U_{\mu s} U_{\nu t}^* - V_{\mu s}^* V_{\nu t}) \delta_{st}$$

pa je

$$\sum_{s=1}^{2} (U_{\mu s} U_{\nu s}^* - V_{\mu s}^* V_{\nu s}) = \delta_{\mu\nu} \qquad \text{I 2.25}$$

Osim toga

$$0 = [b_\mu, b_\nu] = \sum_{st=1}^{2} \{ U_{\mu s} U_{\nu t} [C_s, C_t] + U_{\mu s} V_{\nu t}^* [C_s, C_t^+] +$$

$$+ U_{\nu t} V_{\mu s}^* [C_s^+, C_t] + V_{\mu s}^* V_{\nu t}^* [C_s^+, C_t^+] \} =$$

$$=\sum_{st=1}^{2}\left(U_{\mu s}V_{\nu t}^{*}-U_{\nu t}V_{\mu s}^{*}\right)\delta_{st}$$

pa je

$$\sum_{s=1}^{2}\left(U_{\mu s}V_{\nu s}^{*}-U_{\nu s}V_{\mu s}^{*}\right)=0 \qquad \text{I } 2.26$$

Relacije (I 2.25) i (I 2.26) obezbedjuju potrebnu kanoničnost.

Da bi transformacija (I 2.23) imala inverznu transformaciju analognu samoj sebi (što znači,da i u inverznoj transformaciji funkcija U stoji uz operator istog tipa,kao i u direktnoj transformaciji) treba postupiti na sledeći način

$$\begin{aligned} b_{\mu}&=\sum_{t=1}^{2}\left(U_{\mu t}C_{t}+V_{\mu t}^{*}C_{t}^{+}\right)\\ b_{\mu}^{+}&=\sum_{t=1}^{2}\left(U_{\mu t}^{*}C_{t}^{+}+V_{\mu t}C_{t}\right)\end{aligned} \qquad \text{I } 2.27$$

Prvu jednačinu množimo sa $U_{\mu s}^{*}$ drugu sa $-V_{\mu s}^{*}$ i saberemo ih i izvršimo sumaciju po μ i dobijamo

$$\sum_{\mu=1}^{2}\left(U_{\mu s}^{*}b_{\mu}-V_{\mu s}^{*}b_{\mu}^{+}\right)=\sum_{t=1}^{2}C_{t}\left[\sum_{\mu=1}^{2}\left(U_{\mu t}U_{\mu s}^{*}-V_{\mu t}V_{\mu s}^{*}\right)\right]+$$

$$+\sum_{t=1}^{2}C_{t}^{+}\left[\sum_{\mu=1}^{2}\left(U_{\mu s}^{*}V_{\mu t}^{*}-U_{\mu t}^{*}V_{\mu s}^{*}\right)\right]$$

Ako uvedemo uslove

$$\begin{aligned}&\sum_{\mu=1}^{2}\left(U_{\mu t}U_{\mu s}^{*}-V_{\mu t}V_{\mu s}^{*}\right)=\delta_{st}\\ &\sum_{\mu=1}^{2}\left(U_{\mu s}^{*}V_{\mu t}-U_{\mu t}^{*}V_{\mu s}^{*}\right)=0\end{aligned} \qquad \text{I } 2.28$$

inverzna transformacija glasi

$$C_{s}=\sum_{\mu=1}^{2}\left(U_{\mu s}^{*}b_{\mu}-V_{\mu s}^{*}b_{\mu}^{+}\right) \qquad \text{I } 2.29$$

Vidi se,da je ispunjen polazni uslov,tj.na levoj strani jednačine je anihilacioni operator C a na desnoj strani uz anihilacioni operator b stoji funkcija U. Zamenom (I 2.23) u (I 2.22) dobijamo ($\hbar$=1)

$$\sum_{s=1}^{2}\Big\{C_s e^{-iEt}\Big[E\mathcal{U}_{\mu s}-\sum_{\nu=1}^{2}(M_{\mu\nu}\mathcal{U}_{\nu s}+N_{\mu\nu}\mathcal{V}_{\nu s})\Big]+ +C_s^{+}e^{iEt}\Big[-E\mathcal{V}^{*}_{\mu s}-\sum_{\nu=1}^{2}(M_{\mu\nu}\mathcal{V}^{*}_{\nu s}+N_{\mu\nu}\mathcal{U}^{*}_{\nu s})\Big]\Big\}=0 \qquad \text{I 2.30}$$

Izjednačavajući koeficijente uz operatore C i C^{+} sa nulom i uzimajući u obzir, da su matrični elementi M i N realni, dobijamo

$$\begin{aligned} E\mathcal{U}_{\mu s}&=\sum_{\nu=1}^{2}(M_{\mu\nu}\mathcal{U}_{\nu s}+N_{\mu\nu}\mathcal{V}_{\nu s})\\ -E\mathcal{V}_{\mu s}&=\sum_{\nu=1}^{2}(N_{\mu\nu}\mathcal{U}_{\nu s}+M_{\mu\nu}\mathcal{V}_{\nu s})\end{aligned} \qquad \text{I 2.31}$$

što u razvijenom obliku glasi

$\mu=1$

$$E\mathcal{U}_{1s}=M_{11}\mathcal{U}_{1s}+M_{12}\mathcal{U}_{2s}+N_{11}\mathcal{V}_{1s}+N_{12}\mathcal{V}_{2s}$$

$$-E\mathcal{V}_{1s}=N_{11}\mathcal{U}_{1s}+N_{12}\mathcal{U}_{2s}+M_{11}\mathcal{V}_{1s}+M_{12}\mathcal{V}_{2s}$$

$\mu=2$

$$E\mathcal{U}_{2s}=M_{21}\mathcal{U}_{1s}+M_{22}\mathcal{U}_{2s}+N_{21}\mathcal{V}_{1s}+N_{22}\mathcal{V}_{2s}$$

$$-E\mathcal{V}_{2s}=N_{21}\mathcal{U}_{1s}+N_{22}\mathcal{U}_{2s}+M_{21}\mathcal{V}_{1s}+M_{22}\mathcal{V}_{2s}$$

Ako zamenimo vrednosti za M i N prema (I 2.20) posle sredjivanja sistema jednačina, dobijamo

$$\begin{aligned} &[E-E_e(\vec{k})]\mathcal{U}_{1s}-\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{U}_{2s}-0\cdot\mathcal{V}_{1s}-\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{V}_{2s}=0\\ &-\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{U}_{1s}+[E-E_{fot}(\vec{k})]\mathcal{U}_{2s}-\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{V}_{1s}-0\cdot\mathcal{V}_{2s}=0\\ &0\cdot\mathcal{U}_{1s}+\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{U}_{2s}+[E+E_e(\vec{k})]\mathcal{V}_{1s}+\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{V}_{2s}=0\\ &\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{U}_{1s}+0\cdot\mathcal{U}_{2s}+\mathcal{E}_{\vec{k}}\mathcal{V}_{1s}+[E+E_{fot}(\vec{k})]\mathcal{V}_{2s}=0\end{aligned} \qquad \text{I 2.32}$$

Da bi ovaj sistem jednačina imao rešenja različita od nule determinantu sistema moramo izjednačiti sa nulom

$$\begin{vmatrix} E-E_e(\vec{k}) & -\mathcal{E}_{\vec{k}} & 0 & -\mathcal{E}_{\vec{k}} \\ -\mathcal{E}_{\vec{k}} & E-E_{fot}(\vec{k}) & -\mathcal{E}_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \mathcal{E}_{\vec{k}} & E+E_e(\vec{k}) & \mathcal{E}_{\vec{k}} \\ \mathcal{E}_{\vec{k}} & 0 & \mathcal{E}_{\vec{k}} & E+E_{fot}(\vec{k}) \end{vmatrix} = 0$$

Kao rešenje dobijamo jednu bikvadratnu jednačinu, iz koje odredjujemo vrednosti parametra E, koje su date sa

$$E_{1,2}(\vec{k}) = \sqrt{\frac{E_e^2(\vec{k})+E_{fot}^2(\vec{k})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{E_e^2(\vec{k})+E_{fot}^2(\vec{k})}{2}\right]^2 + 4\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 E_e(\vec{k}) E_{fot}(\vec{k})}} \qquad I\ 2.33$$

Za energiju imamo dve vrednosti i one predstavljaju energije dveju polaritonskih grana. Rezultat ovog postupka daje dijagonalizovan (I 2.17) hamiltonijan, po operatorima C, u obliku

$$H = \sum_{\vec{k}} \left[E_1(\vec{k}) C_{1\vec{k}}^{+} C_{1\vec{k}} + E_2(\vec{k}) C_{2\vec{k}}^{+} C_{2\vec{k}} \right] \qquad I\ 2.34$$

Iz sistema jednačina (I 2.32) uz uslov (I 2.28) dobijamo eksplicitne izraze za transformacione funkcije U i V u obliku

$$\mathcal{U}_{1s} = -\frac{2\mathcal{E}_{\vec{k}} E_{fot}(\vec{k})}{[E_s - E_e(\vec{k})][E_s - E_{fot}(\vec{k})]} \mathcal{V}_{2s}$$

$$\mathcal{U}_{2s} = -\frac{E_s + E_{fot}(\vec{k})}{E_s - E_{fot}(\vec{k})} \mathcal{V}_{2s}$$

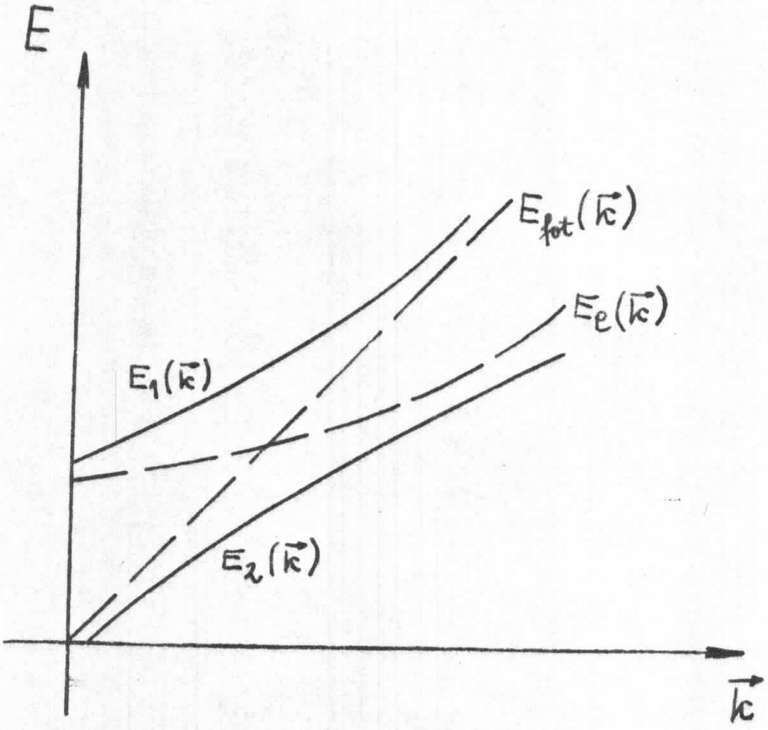
$$\mathcal{V}_{1s} = \frac{2\mathcal{E}_{\vec{k}} E_{fot}(\vec{k})}{[E_s + E_e(\vec{k})][E_s - E_{fot}(\vec{k})]} \mathcal{V}_{2s} \qquad I\ 2.35$$

$$\mathcal{V}_{2s} = \frac{1}{\sqrt{\left[\frac{E_s + E_{fot}(\vec{k})}{E_s - E_{fot}(\vec{k})}\right]^2 + \frac{4\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 E_{fot}^2(\vec{k})}{[E_s - E_e(\vec{k})]^2 [E_s - E_{fot}(\vec{k})]^2} - \frac{4\mathcal{E}_{\vec{k}}^2 E_{fot}^2(\vec{k})}{[E_s + E_e(\vec{k})]^2 [E_s - E_{fot}(\vec{k})]^2} - 1}}$$

gde je

$$E_s = E_s(\vec{k}) \qquad s=1,2$$

Dobijene vrednosti za $E_{1,2}(k)$ predstavljaju energije optičkih pobudjivanja u kristalu - polaritona. Grafički prikaz je sledeći



Dve polaritonske grane E_1 i E_2 se ne presecaju, kao što to čine energije eksitona i fotona, pa ako se optičko pobudjivanje u kristalu analizira u polaritonskoj reprezentaciji, otpadaju teškoće, povezane sa singularitetima u tački preseka eksitonske i fotonske energije.

II. G L A V A :

EKSITONI U SPOLJAŠNJEM POLJU

§ 1. Osnovi neravnotežne statistike

U kvantnoj statistici srednja vrednost fizičke veličine A(t) dobija se kao "špur" produkta ermitskog i linearnog operatora $\hat{A}(t)$, koji se u kvantnoj mehanici korespondira fizičkoj veličini A(t) i statističkog operatora $\hat{\rho}(t)$, tj.:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = Sp\{\hat{A}(t)\hat{\rho}(t)\}$$
$$\hat{\rho}(t) = \sum_{k} W_k \int dx\, |tkx\rangle\langle xkt| \qquad \text{II } 1.1$$

U zavisnosti od toga da li statistički operator zavisi eksplicitno od vremena ili ne, statistički ansambli se dele na ravnotežne i neravnotežne. Ako statistički operator ansambla ne zavisi eksplicitno od vremena, tj., $\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = 0$, onda takav ansambl nazivamo ravnotežnim. U protivnom, ansambl je neravnotežni. Ovde ćemo razmotriti samo slučaj neravnotežnih ansambla.

Na osnovu formule (II 1.1) izgleda da statistički operator $\hat{\rho}(t)$ zavisi eksplicitno od vremena, jer se argument t pojavljuje u vektoru stanja $|tkx\rangle$. Možemo pokazati, da ako hamiltonijan sistema ne zavisi eksplicitno od vremena, onda ni statistički operator $\hat{\rho}$ ne zavisi eksplicitno od vremena. Vektor stanja $|tkx\rangle$ je rešenje Šredingerove jednačine

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|tkx\rangle = \hat{H}\,|tkx\rangle \quad ; \quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \qquad \text{II } 1.2$$

Pošto je $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ lako dolazimo do zaključka, da se rešenje jednačine (II 1.2) može napisati u obliku

$$|tkx\rangle = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}|kx\rangle \quad ; \quad \langle xkt| = \langle xk|e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.3$$

gde je vektor stanja $|kx\rangle$, koji ne zavisi eksplicitno od vremena, rešenje svojstvenog problema hamiltonijana $\hat{H}$, tj.:

$$\hat{H}\,|kx\rangle = E_k\,|kx\rangle \qquad \text{II } 1.4$$

Ako eksponent $e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$ u formuli (II 1.3) razvijemo u red i svaki član primenimo na $|kx\rangle$, onda na osnovu (II 1.4) konstatujemo, da se

(II 1.3) može pisati kao

$$|tkx\rangle = e^{\frac{E_k t}{i\hbar}}|kx\rangle \quad ; \quad \langle xkt| = \langle xk| e^{-\frac{E_k t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.5$$

Zamenom (II 1.5) u (II 1.1) konstatujemo, da je

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k W_k \int dx |tkx\rangle\langle xkt| = \sum_k W_k \int dx\, e^{\frac{E_k t}{i\hbar}} |kx\rangle\langle xk| e^{-\frac{E_k t}{i\hbar}} =$$

$$= \sum_k W_k \int dx |kx\rangle\langle xk| \equiv \hat{\rho} \qquad \text{II } 1.6$$

što znači da statistički operator ne zavisi eksplicitno od vremena. Prema tome, svi ansambli, čiji hamiltonijan ne zavisi eksplicitno od vremena, su ravnotežni.

Koristeći dobijene relacije, možemo izvesti formulu za evoluciju statističkog operatora u vremenu i Hajzenbergove jednačine kretanja. Pošto je

$$|tkx\rangle = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}|kx\rangle$$

možemo pisati

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k W_k \int dx |tkx\rangle\langle xkt| = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \left\{ \sum_k W_k \int dx |kx\rangle\langle xk| \right\} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$$

tj.:

$$\hat{\rho}(t) = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}\, \hat{\rho}\, e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.7$$

Ako ovu relaciju diferenciramo po vremenu

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H}\hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} - e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho}\hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} =$$

$$= e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} - e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{\rho} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}$$

dolazimo do jednačine koja definiše evoluciju statističkog operatora u vremenu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \quad ; \quad \hat{H}(t) = e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.8$$

Ovde $\hat{H}$ samo formalno zavisi od vremena.

Diferenciraćemo sada po vremenu srednju vrednost bilo koje fizičke veličine A

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}(t)\rangle = \left\langle \frac{d\hat{A}(t)}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} Sp\{\hat{A}(t)\hat{\rho}(t)\} = Sp\left\{ \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \hat{\rho}(t) \right\} +$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} Sp\{\hat{A}(t)\hat{H}(t)\hat{\rho}(t) - \hat{A}(t)\hat{\rho}(t)\hat{H}(t)\} - \left\langle \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \rangle$$

Prilikom dobijanja poslednjeg izraza korišćena je relacija (II 1.8) i činjenica,da je pod znakom "špur"-a dozvoljena ciklična permutacija operatora.Ako izjednačimo izraze,koji se nalaze pod znakom srednje vrednosti,dobijamo zakon promene u vremenu fizičke veličine A

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t)=\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t)+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}(t),\hat{H}(t)\right] \qquad \text{II } 1.9$$

Ako $\hat{A}$ ne zavisi eksplicitno od vremena, tj. $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t)=0$ onda se (II 1.9) svodi na

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A}(t)=\left[\hat{A}(t),\hat{H}(t)\right] \qquad \text{II } 1.10$$

Poslednja relacija predstavlja Hajzenbergove jednačine kretanja za operator $\hat{A}(t)$,koji korespondira fizičkoj veličini A.

Sada možemo razmotriti slučaj neravnotežnih ansambla.Ansambl će biti neravnotežni ako hamiltonijan sistema zavisi eksplicitno od vremena.Tada i statistički operator mora zavisiti od vremena.

Mi ćemo pretpostaviti,da se hamiltonijan sistema menja u vremenu na sledeći način:

$$\hat{H}(t)=\begin{cases}\hat{H}_0 & \text{za } t\leqslant t_0\\ \hat{H}_0+\hat{H}_{int}(t) & \text{za } t>t_0\end{cases} \quad ; \quad \frac{\partial\hat{H}_0}{\partial t}=0 \qquad \text{II } 1.11$$

Moment vremena t_0 je moment uključenja interakcije $\hat{H}_{int}(t)$.Vidimo da je za $t\leqslant t_0$ ansambl ravnotežni,a za $t>t_0$ on postaje neravnotežni.Za $t>t_0$ možemo pisati

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|Stkx\rangle=\left[\hat{H}_0+\hat{H}_{int}(t)\right]|Stkx\rangle \qquad \text{II } 1.12$$

gde indeks S označava Šredingerovu reprezentaciju za vektor stanja. Uvešćemo novi vektor stanja $|Itkx\rangle$,gde indeks I označava reprezentaciju interakcije,na sledeći način:

$$|Stkx\rangle=e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}|Itkx\rangle \quad ; \quad |Itkx\rangle=e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}|Stkx\rangle \qquad \text{II } 1.13$$

Ako ovaj izraz diferenciramo po vremenu i rezultat zamenimo u (II 1.12) dolazimo do relacije

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|Itkx\rangle=\hat{W}(t)|Itkx\rangle \quad ; \quad \hat{W}(t)=e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\hat{H}_{int}(t)e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.14$$

Ova jednačina se najlakše rešava tako što se integracijom obeju strana po vremenu prevodi u integralnu jednačinu

$$|Itkx\rangle = |It_0kx\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{W}(t') \qquad \text{II } 1.15$$

Pošto je za $t=t_0$ vektor

$$|St_0kx\rangle = e^{\frac{\hat{H}_0 t_0}{i\hbar}}|Hkx\rangle$$

gde je Hkx Hajzenbergov vektor stanja,koji ne zavisi od vremena i

$$|It_0kx\rangle = e^{-\frac{\hat{H}_0 t_0}{i\hbar}}|St_0kx\rangle$$

dolazimo do zaključka

$$|It_0kx\rangle = |Hkx\rangle \qquad \text{II } 1.16$$

što znači,da su svi vektori $|Itkx\rangle$ pri $t\leqslant t_0$ nezavisni od vremena.

Integralnu jednačinu (II 1.15) rešavaćemo metodom sukcesivnih aproksimacija,uzimajući da je rešenje nulte aproksimacije

$$|Itkx\rangle^{(0)} = |It_0kx\rangle$$

Tako dolazimo do rezultata

$$|Itkx\rangle = \Big[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\hat{W}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) + \cdots$$
$$\cdots + \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\,\hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2)\cdots\hat{W}(t_n) + \cdots\Big]|It_0kx\rangle \qquad \text{II } 1.17$$

$$t_0 < t_n < t_{n-1} < \cdots < t_1 < t$$

Pošto operatori $\hat{W}(t)$ deluju u različitim trenucima vremena, redosled ovih vremenskih trenutaka je naznačen u (II 1.17),zgodno je uvesti Dajsonov hronološki operator $\hat{T}$ sa osobinom

$$\hat{T}\,\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) & \text{za} \quad t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1) & \text{za} \quad t_1 < t_2 \end{cases} \quad ; \quad \hat{T}^n = \hat{T} \qquad \text{II } 1.18$$

S obzirom da je $t_0 < t_n < t_{n-1} < \cdots < t_1 < t$ formulu (II 1.17) možemo pisati na sledeći način:

$$|Itkx\rangle = \hat{T}\Big[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\hat{W}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) + \cdots$$
$$\cdots + \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\,\hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2)\cdots\hat{W}(t_n) + \cdots\Big]|It_0kx\rangle \qquad \text{II } 1.19$$

Uvodjenje operatora $\hat{T}$, koji reguliše uredjenost po vremenu, daje nam mogućnost, da (II 1.19) napišemo u kompaktnoj formi.

Razmotrimo treći član u formuli (II 1.19). Menjajući red integracije, na osnovu Dirihletove formule, možemo pisati

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) = \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_2}^{t} dt_1\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) =$$

$$= \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) - \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) =$$

$$= \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{W}(t_2)\hat{W}(t_1) - \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{W}(t_2)\hat{W}(t_1)$$

Operatori $\hat{W}(t_1)$ i $\hat{W}(t_2)$ ne komutiraju, pa im ne smemo promeniti red množenja. Pošto hronološki operator $\hat{T}$ uredjuje operatore po vremenu, sve vremenski zavisne operatore, koji stoje desno od $\hat{T}$ možemo pisati bilo kojim redom, jer će ih $\hat{T}$ uvek vratiti na njihov zakoniti red u produktu. Znači

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) = \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) - \hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2)$$

i odavde

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2) = \frac{1}{2!}\left[\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{W}(t')\right]^2 \qquad \text{II } 1.20$$

Primenom dobijene formule može se pokazati, da je

$$\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \hat{W}(t_1)\hat{W}(t_2)\cdots\hat{W}(t_n) = \frac{1}{n!}\left[\hat{T}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{W}(t')\right]^n \qquad \text{II } 1.21$$

pa konačno možemo pisati

$$|Itkx\rangle = \hat{S}(t,t_0)|It_0kx\rangle$$

$$\hat{S}(t,t_0) = e^{\frac{\hat{T}}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{W}(t')} = \hat{T}\, e^{\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{W}(t')} \qquad \text{II } 1.22$$

Unitarni operator $\hat{S}(t,t_0)$ naziva se S-matrica sistema.

Kombinujući (II 1.13),(II 1.16) i (II 1.22) dolazimo do veze izmedju Šredingerovih i Hajzenbergovih vektora stanja

$$|Stkx\rangle = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\, \hat{S}(t,t_0)|Hkx\rangle$$

$$\langle xktS| = \langle xkH|\hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.23$$

Neravnotežni statistički operator, koji zavisi eksplicitno od vremena, mora biti izražen preko Šredingerovih vektora stanja. Odgovarajući ravnotežni operator mora biti izražen preko Hajzenbergovih vektora, jer ovi ne zavise od vremena. Koristeći (II 1.23) možemo pisati:

$$\sum_k W_k \int dx\, |Stkx\rangle\langle xktS| =$$

$$= e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t,t_0) \left\{ \sum_k W_k \int dx\, |Hkx\rangle\langle xkH| \right\} \hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}$$

što nas dovodi do sledeće veze izmedju neravnotežnog i ravnotežnog statističkog operatora:

$$\hat{\rho}_t = e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t,t_0) \hat{\rho}_0\, \hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}$$

$$\hat{\rho}_t = \sum_k W_k \int dx\, |Stkx\rangle\langle xktS| \qquad \text{II } 1.24$$

$$\hat{\rho}_0 = \sum_k W_k \int dx\, |Hkx\rangle\langle xkH|$$

Pošto se neravnotežni statistički operator može izraziti pomoću ravnotežnog operatora, to znači da se prilikom izračunavanja srednjih vrednosti po neravnotežnom ansamblu mogu koristiti ravnotežne distribucije. Zaista

$$Sp\{\hat{A}(t)\hat{\rho}_t\} = Sp\left\{\hat{A}(t)\, e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t,t_0)\hat{\rho}_0\, \hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\right\} =$$

$$= Sp\left\{\hat{S}^{-1}(t,t_0)\, e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(t)\, e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{S}(t,t_0)\hat{\rho}_0\right\} \qquad \text{II } 1.25$$

ili

$$\langle \hat{A}(t)\rangle_t = \langle \hat{S}^{-1}(t,t_0)\, \hat{\mathcal{A}}(t)\, \hat{S}(t,t_0)\rangle_0$$

$$\hat{\mathcal{A}}(t) = e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\, \hat{A}(t)\, e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 1.26$$

gde indeks t označava srednju vrednost po neravnotežnom ansamblu, a indeks 0 srednju vrednost po ravnotežnom ansamblu.

§ 2. Linearna reakcija i Grinova funkcija

U ovom delu ćemo analizirati problem izračunavanja neravnotežnih srednjih vrednosti na osnovu opštih izraza, koji su navedeni u prethodnom paragrafu.

U praksi najčešći oblik interakcije je

$$\hat{H}_{int}(t)=\int dx\, \hat{B}(x,t)\, \mathcal{E}(x,t) \qquad \text{II } 2.1$$

gde su $\hat{B}(x,t)$ operatori, dok funkcije $\mathcal{E}(x,t)$ nemaju operatorsku strukturu. Na osnovu (II 1.14) i (II 2.1) imamo

$$\hat{W}(t)=e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\hat{H}_{int}(t)e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}=\int dx\, \hat{\mathcal{B}}(x,t)\mathcal{E}(x,t)$$

$$\hat{\mathcal{B}}(x,t)=e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\hat{B}(x,t)e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \qquad \text{II } 2.2$$

S-matrica ima oblik

$$\hat{S}(t,t_0)=\hat{T}\, e^{\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\int dx'\, \hat{\mathcal{B}}(x',t')\mathcal{E}(x',t')} \qquad \text{II } 2.3$$

Sada ćemo potražiti neravnotežnu srednju vrednost neke fizičke veličine $\hat{A}(x,t)$, u aproksimaciji, koja je linearna po interakciji $\hat{W}(t)$. S-matricu (II 2.3) razvijemo u red sa tačnošću do prvog stepena $\hat{W}$ zaključno, tj.

$$\hat{S}^{\pm 1}(t,t_0)\approx 1\pm\frac{1}{i\hbar}\hat{T}\int_{t_0}^{t}dt'\int dx'\, \hat{\mathcal{B}}(x',t')\mathcal{E}(x',t')+O(W^2)$$

na osnovu (II 1.26) tada možemo pisati

$$\langle\hat{A}(x,t)\rangle_t=\langle\hat{\mathcal{A}}(x,t)\rangle_0+\frac{1}{i\hbar}\int dx'\int_{t_0}^{t}dt'\,\mathcal{E}(x',t')\langle\hat{T}[\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')-\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)]\rangle \qquad \text{II } 2.4$$

Drugi član predstavlja popravku ravnotežne srednje vrednosti, koja dolazi usled neravnotežnih procesa u sistemu i naziva se linearna reakcija sistema ili linearni odziv sistema na interakciju $\hat{H}_{int}(t)$.

Pošto mora biti $t>t'$ možemo pisati:

$$\langle\hat{T}[\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')-\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)]\rangle_0=\theta(t-t')\langle\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')-\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)\rangle_0 \qquad \text{II } 2.5$$

gde je $\theta(t-t')$ Hevisajdova funkcija

$$\theta(t-t')=\begin{cases}1 & \text{za } t>t'\\ 0 & \text{za } t<t'\end{cases} \qquad \text{II } 2.6$$

Veličina

$$G(x,x';t,t')=\theta(t-t')\langle\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')-\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)\rangle_0 \qquad \text{II } 2.7$$

naziva se dvovremenska, temperaturska Grinova funkcija.

Koristeći Grinovu funkciju, popravljenu srednju vrednost veličine $\hat{A}(x,t)$ možemo izraziti na sledeći način:

$$\langle \hat{A}(x,t)\rangle_t = \langle \hat{A}(x,t)\rangle_0 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \int dx' \, \mathcal{E}(x',t') \, G(x,x';t,t') \qquad \text{II } 2.8$$

Sada ćemo analizirati osobine Grinove funkcije (II 2.7). U opštem slučaju G zavisi od četiri argumenta x,x',t i t'. Ako je sistem prostorno homogen, tada ni jedna njegova fizička karakteristika ne može zavisiti od koordinata x i x' ponaosob, već samo od njihove razlike x-x', odakle i sledi zakon o održanju impulsa u prostorno homogenim sredinama. Pošto Grinova funkcija predstavlja fizičku karakteristiku sistema (pomoću nje se izražavaju neravnotežne srednje vrednosti), to znači da ona u prostorno homogenim sredinama ne zavisi od x i x' ponaosob, već samo od razlike x-x'. Još ćemo pokazati, da ako operatori $\hat{A}(x,t)$ i $\hat{B}(x,t)$ ne zavise eksplicitno od vremena, tj. ako je $\hat{A}(x,t)\equiv\hat{A}(x)$ i $\hat{B}(x,t)\equiv\hat{B}(x)$ onda Grinova funkcija ne zavisi od momenata vremena t i t' ponaosob, već samo od njihove razlike t-t'. S obzirom na (II 2.7) dovoljno je dokazati da $\langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t')\rangle_0$ zavisi od razlike vermena t-t'.

Pošto je

$$\hat{\rho}_0 = e^{\frac{\Phi+\mu\hat{N}_0-\hat{H}_0}{\theta}}$$

to znači da $\hat{\rho}_0$ i $e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}$ komutiraju, jer komutiraju $\hat{N}_0$ i $\hat{H}_0$. Koristeći ovu činjenicu i ciklično permutujući naznačene operatorske kompleks

$$\langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t')\rangle_0 = Sp\left\{ e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{A}(x) e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} e^{-\frac{\hat{H}_0 t'}{i\hbar}} \hat{B}(x') e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}} \hat{\rho}_0 \right\} =$$

$$= Sp\left\{ \hat{\rho}_0 e^{-\frac{\hat{H}_0(t-t')}{i\hbar}} \hat{A}(x) e^{\frac{\hat{H}_0(t-t')}{i\hbar}} \hat{B}(x') \right\}$$

vidimo da je zaista

$$\langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t')\rangle_0 = f(t-t')$$

Prema tome, ako operatori, koji ulaze u sastav Grinove funkcije, ne zavise eksplicitno od vremena i ako je sistem prostorno homogen, onda Grinova funkcija zavisi od razlike koordinata x-x' i od razlike vremena t-t', tj.:

$$G(x,x';t,t') \longrightarrow G(x-x';t-t') \qquad \text{II } 2.9$$

Kao što se vidi iz (II 2.4) ili iz opštije formule (I 1.26) neravnotežne srednje vrednosti se izračunavaju preko operatora u reprezentaciji interakcije

$$\hat{\mathcal{A}}(x,t) = e^{-\frac{\hat{H}_o t}{i\hbar}} \hat{A}(x,t)\, e^{\frac{\hat{H}_o t}{i\hbar}}$$

a ne preko originalnih operatora $\hat{A}(x,t)$. To znači, da za primenu ove procedure nije obavezno, da operatori čiju srednju vrednost izračunavamo, zavise eksplicitno od vremena, niti je nužno da $\hat{H}_{int}$ zavisi eksplicitno od vremena. Bez obzira, da li $\hat{A}$ i $\hat{B}$ zavise eksplicitno od vremena ili ne, formula (II 2.4) ima isti oblik, a to znači, da se Grinova funkcija može koristiti i pri analizi ravnotežnih sistema, kada $\hat{H}_{int}$ ne zavisi eksplicitno od vremena. Grinova funkcija se češće koristi kod ravnotežnih sistema, jer je ravnotežni hamiltonijan matematički komplikovan, pa mu se svojstvene vrednosti moraju izračunavati perturbacionim metodom, tj. moraju se izraziti u vidu beskonačnog, konvergirajućeg reda popravki, koje se dobijaju razvijanjem S-matrice u red i primenom formule (I 1.26). Ako interakcija ne zavisi eksplicitno od vremena, onda se postavlja pitanje izbora momenta t_o-uključenja interakcije. Tu se uvodi tzv. adijabatska hipoteza, po kojoj je u beskonačno udaljenom trenutku vremena $t_o \to -\infty$ sistem bio sastavljen od slobodnih čestica, pa se zatim interakcija beskonačno lagano uključivala. Znači, formalno, ako $\hat{H}_{int}$ ne zavisi eksplicitno od vremena, za donju granicu S-matrice uzima se vrednost $t_o = -\infty$.

$$\hat{S}(t,t_o) \longrightarrow \hat{S}(t) = \hat{T}\, e^{\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\, \hat{W}(t')} \qquad \text{II } 2.10$$

Analiziraćemo Grinovu funkciju za slučaj kada originalni operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ ne zavise eksplicitno od vremena. Kao što se vidi iz (II 2.7) Grinova funkcija je proporcionalna razlici srednjih vrednosti:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{AB}(x-x',t-t') &= \langle \hat{\mathcal{B}}(x',t')\, \hat{\mathcal{A}}(x,t) \rangle \\ \mathcal{I}_{BA}(x-x',t-t') &= \langle \hat{\mathcal{A}}(x,t)\, \hat{\mathcal{B}}(x',t') \rangle \end{aligned} \qquad \text{II } 2.11$$

Ove novouvedene funkcije se nazivaju korelacione funkcije. Potražimo sad eksplicitne izraze za ove korelacione funkcije. Prilikom izračunavanja srednjih (II 2.11) koristićemo statistički operator kanoničkog ansambla

$$\hat{\rho}_0 = Q^{-1}(\theta, N, V)\, e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} \qquad \text{II } 2.12$$

Uvodeći projekcioni operator

$$\hat{P} = \sum_{l} |l\rangle\langle l|$$

možemo pisati

$$\mathcal{J}_{AB}(x-x';t-t') = Sp\{\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{A}(x,t)\hat{\rho}_0\} - Sp\{\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{P}\hat{A}(x,t)\hat{\rho}_0\}$$

$$\mathcal{J}_{BA}(x-x';t-t') = Sp\{\hat{A}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\rho}_0\} = Sp\{\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\rho}_0\hat{A}(x,t)\} =$$
$$= Sp\{\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\rho}_0\hat{P}\hat{A}(x,t)\}$$

tako da su konačni izrazi

$$\mathcal{J}_{AB}(x-x';t-t') = Q^{-1}(\theta,N,V)\sum_{kl}\langle k|\hat{B}(x')|l\rangle\langle l|\hat{A}(x)|k\rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} e^{-i\Omega_{kl}(t-t')}$$

$$\mathcal{J}_{BA}(x-x';t-t') = Q^{-1}(\theta,N,V)\sum_{kl}\langle k|\hat{B}(x')|l\rangle\langle l|\hat{A}(x)|k\rangle e^{\frac{\hbar\Omega_{kl}}{\theta}} e^{-\frac{E_k}{\theta}} e^{-i\Omega_{kl}(t-t')}$$

$$\Omega_{kl} = \frac{1}{\hbar}(E_k - E_l) \qquad \text{II } 2.13$$

Posle Furije transformacija tipa

$$f(x-x';t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} dw\, f(x-x';w)\, e^{-iw(t-t')}$$

poslednji izrazi prelaze u

$$\mathcal{J}_{AB}(x-x';w) = Q^{-1}(\theta,N,V)\sum_{kl}\langle k|\hat{B}(x')|l\rangle\langle l|\hat{A}(x)|k\rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}}\delta(w-\Omega_{kl})$$

$$\mathcal{J}_{BA}(x-x';w) = e^{\frac{\hbar w}{\theta}}\mathcal{J}_{AB}(x-x';w) \qquad \text{II } 2.14$$

Važno je naglasiti, da funkcije $\mathcal{J}_{AB}(x-x';w)$ i $\mathcal{J}_{BA}(x-x';w)$ imaju singularitet za $w=\Omega_{kl}$. Veličina $\Omega_{kl}=E_k-E_l$ predstavlja energiju pobudjivanja sistema pri prelasku iz kvantnog stanja k u kvantno stanje l. Za one vrednosti energije $\hbar w$ koje su jednake energiji pobudjivanja sistema,korelacione funkcije imaju singularitet.Pošto je Grinova funkcija proporcionalna korelacionim funkcijama,to znači,da i Grinova funkcija ima singularitet za one vrednosti energije,koje su ravne energiji pobudjivanja sistema. Ovaj zaključak omogućava da,tražeći singularitete Grinove funkcije, mi u stvari ispitujemo ponašanje elementarnih pobudjenja u sistemu.

Pošto je "delta"-funkcija

$$\delta(t-t')=\int_{-\infty}^{+\infty} dw\, e^{-iw(t-t')}$$

izvod Hevisajdove funkcije po t,to možemo pisati:

$$\theta(t-t')=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega\, \frac{e^{-i\Omega(t-t')}}{\Omega+i\delta} \qquad \delta\to+0 \qquad \text{II } 2.15$$

Ako ovo zamenimo u (II 2.7) i izvršimo Furije transformaciju Grinove funkcije

$$G(x-x';t-t')=\int_{-\infty}^{+\infty} dw\, G(x-x';w)e^{-iw(t-t')} \qquad \text{II } 2.16$$

i Furije transformacije korelacionih funkcija,dolazimo do sledeće veze izmedju Grinove funkcije G(x-x';w) i korelacione funkcije $\mathcal{J}_{AB}$(x-x';w)

$$G(x-x';w)=\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \left(e^{\frac{\hbar\Omega}{\theta}}-1\right)\mathcal{J}_{AB}(x-x';\Omega)\frac{1}{\Omega-w-i\delta} \qquad \delta\to+0 \qquad \text{II } 2.17$$

Pošto je

$$\frac{1}{x\pm i\delta}=\frac{1}{x}\mp i\pi\delta(x)$$

iz poslednje formule zaključujemo,da je:

$$\left(e^{\frac{\hbar w}{\theta}}-1\right)\mathcal{J}_{AB}(x-x';w)=G(x-x';w+i\delta)-G(x-x';w-i\delta) \qquad \delta\to+ \qquad \text{II } 2.18$$

Prema tome,ako poznajemo Grinovu funkciju,onda se na osnovu (II 2.18) može izračunati korelaciona funkcija,a preko ove,srednje vrednosti tipa

$$\langle \hat{B}(x')\hat{A}(x)\rangle_0=\int_{-\infty}^{+\infty} dw\, \mathcal{J}_{AB}(x-x';w) \qquad \text{II } 2.19$$

Naš krajnji cilj u statističkim istraživanjima je izračunavanje takvih srednjih vrednosti,jer ako se radi o sistemima sa velikim brojem čestica,samo ove srednje vrednosti mogu da se mere.

Sad ćemo izračunati Grinovu funkciju.Uvešćemo oznaku

$$G(x-x';t-t')\equiv\langle\langle \hat{A}(x,t)|\hat{B}(x',t')\rangle\rangle$$

pa se tada (II 2.7) može pisati kao

$$\langle\langle \hat{A}(x,t)|\hat{B}(x',t')\rangle\rangle = \theta(t-t')\langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t')\hat{A}(x,t)\rangle_0 \qquad \text{II } 2.20$$

Ako ovu relaciju diferenciramo po t, vodeći računa o tome, da je izvod Hevisajdove funkcije po vremenu "delta"-funkcija, i da je na osnovu Hajzenbergovih jednačina kretanja

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(x,t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}(x,t), \hat{H}(t)\right]$$

dolazimo do sledeće jednačine

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(x,t)|\hat{B}(x',t')\rangle\rangle = i\hbar\,\delta(t-t')\,C(x-x') +$$
$$+\theta(t-t')\langle\left[\hat{A}(x,t),\hat{H}(t)\right]\hat{B}(x',t') - \hat{B}(x',t')\left[\hat{A}(x,t),\hat{H}(t)\right]\rangle_0 \qquad \text{II } 2.21$$
$$C(x-x') = \langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t) - \hat{B}(x',t)\hat{A}(x,t)\rangle_0$$

Kao što vidimo, prvobitna Grinova funkcija $\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle$ izražava se preko "više" Grinove funkcije $\langle\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle$. Ova se istom procedurom može izraziti preko još složenije Grinove funkcije, tako da dolazimo do beskonačnog sistema jednačina u kome se pojavljuju sve komplikovanije Grinove funkcije. Polazna Grinova funkcija može se izračunati, ako se viša Grinova funkcija izrazi preko nižih. Osnovni problem, pri radu sa Grinovim funkcijama, sastoji se u tome da se u svakom problemu odabere ispravan način "presecanja" lanca jednačina. To je procedura dekuplovanja viših Grinovih funkcija.

U formuli (II 2.21) možemo izvršiti Furije transformacije tip

$$f(x-x';t-t') = \int dk\int dw\; f(k,w)e^{ik(x-x')-iw(t-t')} \qquad \text{II } 2.22$$

posle čega ona prelazi u:

$$i\hbar w\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{kw} = \frac{i\hbar}{2\pi}C(k) + \langle\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{kw} \qquad \text{II } 2.23$$

Pretpostavljajući, da se dekuplovanje više Grinove funkcije može izvršiti na sledeći način

$$\langle\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{kw} \approx \hbar\Omega(k)\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{kw}$$

dolazimo do rezultata:

$$\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{kw} = \frac{i}{2\pi} \frac{C(k)}{w - \Omega(k) + i\delta} \qquad \delta \to +0 \tag{II 2.24}$$

Pol Grinove funkcije nalazi se u tački $w=\Omega(k)$. Pošto je w u opštem slučaju kompleksna veličina, ovaj pol se nalazi u kompleksnoj w ravni i to, za čestice, uvek u četvrtom kvadrantu. S obzirom na ranije zaključke o fizičkom smislu singulariteta Grinove funkcije, realna koordinata pola funkcije

$$\langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle\rangle_{kw} \equiv G(k,w)$$

(množena sa $\hbar$) dati energiju elementarnih ekscitacija u sistemu, dok će recipročna vrednost imaginarne koordinate predstavljati **vreme** života elementarnih ekscitacija.

Na osnovu (II 2.18) nalazimo korelacionu funkciju

$$J_{AB}(k,w) = C(k)\,\delta[w - \Omega(k)] \tag{II 2.25}$$

i pomoću nje srednje vrednosti

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle_k = \int_{-\infty}^{+\infty} dw\, C(k)\left(e^{\frac{\hbar w}{\theta}} - 1\right)^{-1} \delta[w - \Omega(k)] = \frac{C(k)}{e^{\frac{\hbar \Omega(k)}{\theta}} - 1}$$

odnosno

$$\langle \hat{B}(x)\hat{A}(x) \rangle = \int dk\, \frac{C(k)}{e^{\frac{\hbar \Omega(k)}{\theta}} - 1} \tag{II 2.26}$$

I time smo završili pregled nekih problema i metoda neravnotežne statističke fizike.

§ 3. Interakcija polje-dipol i odziv eksitonskog sistema

Izračunavanje srednjih vrednosti okupacionog broja eksitona po ravnotežnom ansamblu i analiziranje termodinamičkih karakteristika eksitonskog sistema, uz pomoć ovih srednjih vrednosti pokazuje, da usled visokih eksitonskih energija, koje su reda $10^4 K_B T$, porast temperature kristala ne izaziva nikakve značajne efekte. Ovde ćemo analizirati odgovarajuće neravnotežne srednje vrednosti, tj. srednje vrednosti tipa $\langle P_\alpha^+ P_\beta \rangle_{n.eq}$ koje su uzete po neravnotežnom ansamblu. Operatori P_α^+ i P_β kreiraju i anihiliraju eksitone tipa α i β respektivno. Interakcioni hamiltonijan je tipa $\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{D}$ i tretira se kao perturbacija. Spoljašnje periodično električno polje označeno je sa $\vec{\mathcal{E}}$, dok je $\vec{D}$ ukupni dipolni moment eksitonskog sistema.

Predpostavićemo, da se interakcija uključila adijabatski, tj. donja granica S-matrice sistema je $-\infty$. Ovo uprošćava račun, kao i razmatranje kristala samo sa jednim molekulom u elementarnoj ćeliji.

Hamiltonijan eksitonskog sistema, koji odgovara multinivoskoj šemi molekulskih pobudjenja, ima oblik

$$H = H_0 + \sum_{fg} \int d^3\vec{r}\, d^3\vec{r}\,'\, X_{fg}(\vec{r}-\vec{r}\,') P_f^+(\vec{r}) P_g(\vec{r}\,') + \sum_{ff'gg'} Y_{ff'gg'}(\vec{r}-\vec{r}\,') P_f^+(\vec{r}) P_{f'}(\vec{r}) P_g^+(\vec{r}\,') P_{g'}(\vec{r}\,') \qquad \text{II } 3.1$$

gde su upotrebljene oznake

$$H_0 = N\left(E_0 + \frac{1}{2} V_{0000}\right)$$

$$X_{fg}(\vec{r}-\vec{r}\,') = \left[(E_f - E_0 - V_{0000})\delta_{fg} + \frac{1}{2}(V_{fg00} + V_{00fg})\right]\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') + \frac{1}{2}\left[\Phi_{f00g}(\vec{r}-\vec{r}\,') + \Phi_{0gf0}(\vec{r}-\vec{r}\,')\right]$$

$$Y_{ff'gg'}(\vec{r}-\vec{r}\,') = \frac{1}{2}\left\{\Phi_{ff'gg'}(\vec{r}-\vec{r}\,') + \frac{1}{2}\left[\Phi_{ff'00}(\vec{r}-\vec{r}\,') + \Phi_{00ff'}(\vec{r}-\vec{r}\,')\right]\delta_{gg'} + \Phi_{0000}(\vec{r}-\vec{r}\,')\delta_{ff'}\delta_{gg'}\right\}$$

$$V_{ff'gg'} = \int d^3\vec{r}\, \Phi_{ff'gg'}(\vec{r})$$

Eksitonski operatori $P_f(\vec{r})$ i $P_f^+(\vec{r})$ konstruisani su od elektronskih operatora $a_f(\vec{r})$ i $a_f^+(\vec{r})$ na sledeći način

$$P_f(\vec{r}) = a_0^+(\vec{r})\, a_f(\vec{r})$$

$$P_f^+(\vec{r}) = a_f^+(\vec{r})\, a_0(\vec{r}) \qquad \text{II } 3.2$$

ovi kvazi-Pauli operatori, kada je koncentracija eksitona mala, mogu se zameniti Boze operatorima $B_f(\vec{r})$ i $B_f^+(\vec{r})$. Indeksi f, f', g, g' označavaju tip molekulskih ekscitacija, a indeks "0" označava osnovno stanje molekula. Energije E_f su svojstvene vrednosti hamiltonijana izolovanog molekula, tj.

$$\hat{H}(\vec{\xi}_{\vec{r}})\Psi_f(\vec{\xi}_{\vec{r}}) = E_f \Psi_f(\vec{\xi}_{\vec{r}}) \qquad \text{II } 3.3$$

gde je $\vec{\xi}_{\vec{r}}$ skup unutrašnjih koordinata molekula, koji se nalazi na mestu $\vec{r}$. $\Phi_{ff'gg'}(\vec{r}-\vec{r}')$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije

$$\Phi_{ff'gg'}(\vec{r}-\vec{r}') = \int d^3\vec{\xi}_{\vec{r}}\, d^3\vec{\xi}_{\vec{r}'}\, \Psi_f^*(\vec{\xi}_{\vec{r}})\Psi_g^*(\vec{\xi}_{\vec{r}'})V(\vec{r}-\vec{r}')\Psi_{g'}(\vec{\xi}_{\vec{r}'})\Psi_{f'}(\vec{\xi}_{\vec{r}}) \qquad \text{II } 3.4$$

gde je

$$V(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}\left\{\vec{\xi}_{\vec{r}}\cdot\vec{\xi}_{\vec{r}'} - \frac{3\left[(\vec{r}-\vec{r}')\vec{\xi}_{\vec{r}}\right]\left[(\vec{r}-\vec{r}')\vec{\xi}_{\vec{r}'}\right]}{|\vec{r}-\vec{r}'|^2}\right\}$$

Centar simetrije kristala poklapa se sa centrom inverzije molekula, tako da u hamiltonijanu nemamo članove, koji sadrže produkte tri eksitonska operatora. Osim toga, zanemareni su članovi hamiltonijana, koji su proporcionalni PP i P^+P^+.

Interakcioni hamiltonijan ima oblik

$$\hat{H}_{int}(t) = -\int d^3\vec{r}\, \vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)\vec{D}(\vec{r},t) \qquad \text{II } 3.5$$

gde je

$$\vec{D}(\vec{r}) = \sum_f \left[\vec{\mathcal{D}}_{0f}^* P_f(\vec{r}) + \vec{\mathcal{D}}_{0f} P_f(\vec{r})\right] + \sum_f \vec{\mathcal{D}}_{fg} P_f^+(\vec{r}) P_g(\vec{r})$$

$$\vec{\mathcal{D}}_{fg} = e\int d^3\vec{\xi}_{\vec{r}}\, \Psi_f^*(\vec{\xi}_{\vec{r}})\, \vec{\xi}_{\vec{r}}\, \Psi_g(\vec{\xi}_{\vec{r}})$$

$$\vec{\mathcal{D}}_{fg} = \vec{\mathcal{D}}_{gf} \quad ; \quad \vec{\mathcal{D}}_{ff} = 0$$

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r},t)=\int d^3\vec{k}\,d\omega\,\vec{\mathcal{S}}(\vec{k},\omega)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t}$$

$$\vec{\mathcal{S}}(\vec{k},\omega)=\vec{\mathcal{S}}(-\vec{k},\omega)$$

U reprezentaciji interakcije možemo pisati

$$\hat{W}(t)=e^{-\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}\hat{H}_{int}(t)e^{\frac{\hat{H}_0 t}{i\hbar}}=\hat{W}^{(1)}(t)+\hat{W}^{(2)}(t) \qquad \text{II } 3.6$$

$$\hat{W}^{(1)}(t)=-\sum_f\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{k}\,d\omega\,\vec{\mathcal{S}}(\vec{k},\omega)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t}\cdot\vec{\mathcal{D}}_{0f}P_f(\vec{r},t)$$

$$\hat{W}^{(2)}(t)=-\sum_f\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{k}\,d\omega\,\vec{\mathcal{S}}(\vec{k},\omega)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t}\cdot\vec{\mathcal{D}}_{fg}P^+_f(\vec{r},t)P_g(\vec{r},t) \qquad \text{II } 3.7$$

Izračunavaćemo sledeću neravnotežnu srednju vrednost

$$\langle P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\rangle_{n.eq.}=\langle\hat{S}^{-1}(t,t_0)P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\hat{S}(t,t_0)\rangle_{eq.} \qquad \text{II } 3.8$$

gde je

$$\langle\hat{A}\rangle_{eq}=Sp\,\hat{A}\hat{\rho}_0\ ;\quad \hat{\rho}_0=e^{\frac{F_0-\hat{H}_0}{\theta}}$$

$$\hat{S}(t,t_0)=\hat{T}\,e^{\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt\,\hat{W}(t)}$$

Tu je F_0 slobodna energija neperturbovanog sistema. Ako S-matricu razvijemo do članova kvadratnih po interakciji, dobijamo

$$\langle P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\rangle_{neq}=\langle P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\rangle_{eq}+$$
$$+\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}dt\langle P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\hat{W}^{(2)}(t)-\hat{W}^{(2)}(t)P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\rangle_{eq}+$$
$$+\frac{1}{\hbar^2}\Big\{\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2\langle\hat{W}^{(1)}(t_1)P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\hat{W}^{(2)}(t_2)\rangle_{eq}- \qquad \text{II } 3.9$$
$$-\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2\langle P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\hat{W}^{(1)}(t_1)\hat{W}^{(2)}(t_2)-\hat{W}^{(2)}(t_2)\hat{W}^{(1)}(t_1)P^+_\alpha(\vec{r},t)P_\beta(\vec{r},t)\rangle_{eq}\Big\}$$

Pošto izvršimo sledeća dekuplovanja

$$\langle P^+(x_1)P(x_2)P^+(x_3)P(x_4)\rangle_{eq}=\mathcal{J}(x_2-x_1)\mathcal{J}(x_4-x_3)+\mathcal{J}(x_4-x_1)I(x_2-x_1)$$

gde su korelacione funkcije

$$\mathcal{I}(x-y)=\langle P^{+}(y)\,P(x)\rangle_{eq}$$

$$I(x-y)=\langle P(x)\,P^{+}(y)\rangle_{eq}$$

$$x\equiv(\vec{r},t)$$

$$y\equiv(\vec{r}',t')$$

i pošto predjemo na Furije likove

$$A(x-y)=\int dq\,A(q)\,e^{q(x-y)}$$

$$q\equiv(\vec{k},w)$$

konačno dobijamo

$$\mathcal{N}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)=\mathcal{N}^{(1)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)+\mathcal{N}^{(2)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)+\mathcal{N}^{(3)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w) \qquad \text{II } 3.10$$

pri tome je

$$\mathcal{N}^{(1)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)=\langle P^{+}_{\alpha}P_{\beta}\rangle_{eq}\,\delta(\vec{k})\,\delta(w)\Big\{1-\frac{(2\pi)^{8}}{4\hbar^{2}}\sum_{fg}\int d^{3}\vec{q}\,d\Omega\,\mathcal{H}(\vec{q},\Omega)\times$$
$$\times\Big[\vec{\mathcal{D}}_{0g}\vec{\mathcal{D}}^{*}_{0f}\,I_{gf}(\vec{q},\Omega)+\vec{\mathcal{D}}^{*}_{0g}\vec{\mathcal{D}}_{0f}\,\mathcal{I}_{fg}(\vec{q},\Omega)\Big]\Big\}$$

$$\mathcal{N}^{(2)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)=\frac{i(2\pi)^{4}}{2\hbar}\sum_{fg}\int d^{3}\vec{q}\,d\Omega\,\vec{\mathcal{D}}_{fg}\,\vec{L}(\vec{k},w)\times$$
$$\times\Big[I_{\beta f}(\vec{q},\Omega)\,\mathcal{I}_{g\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)-I_{g\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)\,\mathcal{I}_{\beta f}(\vec{q},\Omega)\Big]$$

$$\mathcal{N}^{(3)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)=\frac{(2\pi)^{8}}{4\hbar^{2}}\sum_{fg}\int d^{3}\vec{q}\,d\Omega\,\mathcal{T}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w;\vec{q},\Omega)\times$$
$$\times\Big\{\vec{\mathcal{D}}_{0g}\vec{\mathcal{D}}^{*}_{0f}\Big[\mathcal{I}_{g\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)\,\mathcal{I}_{\beta f}(\vec{q},\Omega)-\mathcal{I}_{g\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)\,I_{\beta f}(\vec{q},\Omega)-$$
$$-\mathcal{I}_{\beta f}(\vec{q},\Omega)\,I_{g\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)\Big]+\vec{\mathcal{D}}^{*}_{0g}\vec{\mathcal{D}}_{0f}\Big[I_{\beta g}(\vec{q},\Omega)\,I_{f\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)-$$
$$-I_{\beta g}(\vec{q},\Omega)\,\mathcal{I}_{f\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)-I_{f\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\Omega-w)\,\mathcal{I}_{\beta g}(\vec{q},\Omega)\Big]\Big\}$$

gde je

$$\langle P_\alpha^+ P_\beta \rangle \equiv \langle P_\alpha^+(\vec{r},t) P_\beta(\vec{r},t) \rangle_{eq}$$

$$\mathcal{H}(\vec{k},w) = 2|\vec{\rho}(\vec{k},w)|^2 + \vec{\rho}^{\,2}(\vec{k},w) + \vec{\rho}^{\,*2}(\vec{k},w)$$

$$\vec{L}(\vec{k},w) = \vec{\rho}(\vec{k},w) + \vec{\rho}^{\,*}(\vec{k},w)$$

$$\mathcal{T}(\vec{k}',w',\vec{k}'',w'') = \vec{\rho}(\vec{k}',w')\vec{\rho}^{\,*}(\vec{k}'',w'') + \vec{\rho}(\vec{k}',w')\vec{\rho}(\vec{k}'',w'')$$

$$\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\vec{k},w) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{r}\,dt \langle P_\alpha^+(\vec{r},t) P_\beta(\vec{r},t) \rangle_{n.eq} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}+iwt} \qquad \text{II } 3.11$$

Kao što vidimo, član $\hat{W}^{(2)}(t)$ interakcionog hamiltonijana daje doprinose veličini $\mathcal{N}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)$ u linearnoj aproksimaciji i dovodi do disipativnih procesa u sistemu. Prvi doprinos različit od nule $\hat{W}^{(1)}(t)$ dobija se u kvadratnoj aproksimaciji. Odavde se može zaključiti, da spoljašnja interakcija (II 3.6) izaziva disipativne procese u sistemu, a osim toga dovodi do prostorno-vremenske disperzije srednjih vrednosti tipa $\langle P_\alpha^+ P_\beta \rangle$. Kao što je poznato, ravnotežne srednje vrednosti $\langle P_\alpha^+ P_\beta \rangle_{eq}$ ne zavise od $\vec{k}$ i w.

§ 4. Neravnotežna eksitonska populaciona funkcija

Analizu veličine $\mathcal{N}_{\beta\alpha}(\vec{k},\omega)$ izvršićemo koristeći harmonijsku aproksimaciju za eksitone, a to znači, da ćemo u hamiltonijanu (II 3.1) zanemariti član, koji je proporcionalan Y i kvazi-Pauli operatore P i P^{+} zamenićemo Boze operatorima B i B^{+}. Pošto se korelacione funkcije, koje figurišu u (II 3.10), mogu izraziti pomoću odgovarajućih Grinovih funkcija, mi ćemo prvo izračunati Grinove funkcije

$$G^{(0)}_{ij}(\vec{r}-\vec{r}';t-t')=\theta(t-t')\langle B_i(\vec{r},t)B^{+}_j(\vec{r}',t')-B^{+}_j(\vec{r}',t')B_i(\vec{r},t)\rangle_{eq}$$

$$\theta(t-t')=\begin{cases}1 & \text{za}\quad t>t'\\ 0 & \text{za}\quad t<t'\end{cases} \qquad \text{II 4.1}$$

$$B_i(\vec{r},t)=e^{-\frac{\hat{H}_0^{(0)}t}{i\hbar}}B_i(\vec{r})e^{\frac{\hat{H}_0^{(0)}t}{i\hbar}}$$

za harmonijski hamiltonijan

$$H^{(0)}=\sum_{fg}\int d^3\vec{r}\,d^3\vec{r}'\,X_{fg}(\vec{r}-\vec{r}')B^{+}_f(\vec{r})B_g(\vec{r}') \qquad \text{II 4.2}$$

Sistem jednačina za $G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}';t-t')$ može da se napiše ovako

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}';t-t')=i\hbar\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta(t-t')\,\delta_{\alpha\beta}+$$
$$+\sum_f\int d^3\vec{r}''X_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}'')\,G^{(0)}_{f\beta}(\vec{r}''-\vec{r}';t-t') \qquad \text{II 4.3}$$

Posle Furije transformacija

$$G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}';t-t')=\int d^3\vec{k}\,d\omega\,G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')-i\omega(t-t')}$$
$$X_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}')=\int d^3\vec{k}\,X_{\alpha\beta}(\vec{k})e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \qquad \text{II 4.4}$$

sistem jednačina (II 4.3) može da se napiše u matričnoj formi na sledeći način

$$\left[\hat{E}-\hat{X}(\vec{k})\right]\hat{G}^{(0)}(\vec{k},\omega)=\frac{i\hbar}{2\pi}\cdot\hat{1} \qquad \text{II 4.5}$$

gde je

$$\hat{G}^{(0)}(\vec{k},w)=\| G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{k},w)\| \quad ; \quad \hat{E}=\| \hbar w\, \delta_{\alpha\beta}\|$$

$$\hat{X}(\vec{k})=\| X_{\alpha\beta}(\vec{k},w)\| \quad ; \quad \hat{1}=\| \delta_{\alpha\beta}\|$$

Ako uvedemo unitarnu matricu M,koja dijagonalizuje matricu X(k),tj.

$$\hat{X}(\vec{k})\hat{M}(\vec{k})=\hat{M}(\vec{k})\hat{\mathcal{F}}(\vec{k})$$

$$\hat{\mathcal{F}}(\vec{k})=\| \hbar f_{\alpha\alpha}(\vec{k})\delta_{\alpha\beta}\| \qquad \text{II } 4.6$$

dobijamo

$$G^{(0)}_{M}(\vec{k},w)=\frac{i\hbar}{2\pi}\left[\hat{E}-\hat{\mathcal{F}}(\vec{k})\right]^{-1}=\hat{M}^{-1}(\vec{k})G^{(0)}(\vec{k},w)\hat{M}(\vec{k})=\| G_{\alpha\alpha}(\vec{k},w)\delta_{\alpha\beta}\|$$

$$G_{\alpha\alpha}(\vec{k},w)=\frac{i}{2\pi}\frac{1}{w-f_{\alpha\alpha}(\vec{k})+i\delta} \qquad \text{II } 4.7$$

Kao što se vidi,harmonijska Grinova funkcija eksitonskog sistema je dijagonalna,pa su i odgovarajuće korelacione funkcije

$$\mathcal{J}_{ij}(\vec{k},w)=\left[G_{ij}(\vec{k},w+i\delta)-G_{ij}(\vec{k},w-i\delta)\right]\eta(w,\theta)$$

$$\delta\to+0$$

$$I_{ij}(\vec{k},w)=e^{\frac{\hbar w}{\theta}}\mathcal{J}_{ij}(\vec{k},w) \qquad \text{II } 4.8$$

$$\eta(w,\theta)=\frac{1}{e^{\frac{\hbar w}{\theta}}-1}$$

takodje dijagonalne.

Kombinujući (II 4.7) i (II 4.8) sa (II 3.10) dobijamo $\mathcal{N}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)$ u harmonijskoj aproksimaciji

$$\left[\mathcal{N}^{(1)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)\right]^{(0)}=\langle B^{+}_{\alpha}B_{\beta}\rangle_{eq}\,\delta_{\alpha\beta}\,\delta(\vec{k})\,\delta(w)\left\{1-\frac{(2\pi)^{8}}{4\hbar^{2}}\sum_{f}\int d^{3}\vec{q}\,|\mathcal{D}_{0f}|^{2}\times\right.$$

$$\left.\times\mathcal{H}\left[\vec{q},f_{ff}(\vec{q})\right]\cdot \mathrm{cotg}\,h\,\frac{\hbar f_{ff}(\vec{q})}{2\theta}\right\}$$

$$\left[\mathcal{N}^{(2)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)\right]^{(0)}=\frac{i(2\pi)^{4}}{2\hbar}\int d^{3}\vec{q}\,\vec{\mathcal{D}}_{\alpha\beta}\,\vec{L}(\vec{k},w)\left[e^{\frac{\hbar f_{\beta\beta}(\vec{q})}{\theta}}-e^{\frac{\hbar f_{\alpha\alpha}(\vec{q})}{\theta}}\right]\times$$

$$\times\eta\left[f_{\beta\beta}(\vec{q}),\theta\right]\eta\left[f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k},\theta)\right]\delta\left\{w-\left[f_{\beta\beta}(\vec{q})-f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k})\right]\right\}$$

$$\left[\mathcal{N}^{(3)}_{\beta\alpha}(\vec{k},w)\right]^{(0)}=\frac{(2\pi)^8}{4\hbar^2}\int d^3\vec{q}\,\vec{\mathcal{D}}_{0\alpha}\vec{\mathcal{D}}^{*}_{0\beta}\,\mathcal{T}\left[\vec{q}-\vec{k},f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k});\vec{q},f_{\beta\beta}(\vec{q})\right]\times$$

$$\times\left\{e^{\frac{\hbar f_{\beta\beta}(\vec{q})}{\theta}}\eta\left[f_{\beta\beta}(\vec{q}),\theta\right]-\eta\left[f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k}),\theta\right]-\right.$$

$$\left.-2e^{\frac{\hbar f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k})}{\theta}}\eta\left[f_{\beta\beta}(\vec{q}),\theta\right]\eta\left[f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k}),\theta\right]\right\}\times$$

$$\times\,\delta\left\{w-\left[f_{\beta\beta}(\vec{q})-f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k})\right]\right\} \qquad \text{II } 4.9$$

Sada možemo da dobijemo izraz za neravnotežni eksitonski okupacioni broj. Stavljajući $\alpha=\beta$ u (II 4.9) nalazimo sledeći izraz za neravnotežni eksitonski okupacioni broj na $\theta\approx 0$

$$\left[\mathcal{N}_{\alpha\alpha}(\vec{k},w)\right]^{(0)}_{\theta\approx 0}=$$

$$=\frac{(2\pi)^8}{4\hbar^2}\int d^3\vec{q}\,\left|\vec{\mathcal{D}}_{0\alpha}\right|^2\mathcal{T}\left[\vec{q}-\vec{k},f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k}),\vec{q},f_{\alpha\alpha}(\vec{q})\right]\delta\left\{w-\left[f_{\alpha\alpha}(\vec{q})-f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k})\right]\right\} \qquad \text{II } 4.10$$

U cilju procene ponašanja $\left[\mathcal{N}_{\alpha\alpha}(\vec{k},w)\right]^{(0)}_{\theta\approx 0}$ uzećemo približno

$$\mathcal{T}\left[\vec{q}-\vec{k},f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k}),\vec{q},f_{\alpha\alpha}(\vec{q})\right]=\mathcal{T}(\varphi_\alpha)$$

gde je

$$\varphi_\alpha=\frac{E_\alpha-E_0}{\hbar}$$

Takodje ćemo koristiti aproksimaciju efektivne mase, pa otuda

$$f_{\alpha\alpha}(\vec{q})-f_{\alpha\alpha}(\vec{q}-\vec{k})=\frac{\hbar k}{2m_\alpha}(2q\cos\lambda-k)$$

$$\lambda\in(0,\pi)$$

$$q\geqslant\frac{k+Q(k)}{2}\quad;\quad Q(k)=\frac{q\,m_\alpha w}{\hbar k}$$

gde je m_α efektivna masa elektrona iz zone sa indeksom α.

Uz gore navedene aproksimacije konačno dobijamo

$$\left[\mathcal{N}_{\alpha\alpha}(\vec{k},w)\right]^{(0)}_{\theta\approx 0} =$$

$$= \frac{(2\pi)^9}{(2\hbar)^3 k} |m_\alpha| \left|\vec{\mathcal{D}}_{0\alpha}\right|^2 \mathcal{T}(\ell_\alpha)\left\{q^2_{max} - \left[\frac{k+Q(k)}{2}\right]^2\right\} \qquad \text{II } 4.11$$

Vidi se,da neravnotežni eksitonski okupacioni broj (izračunat po jedinici kvadrata zapremine i jedinici kvadrata vremena),ima maksimalnu vrednost za $w=0$ i teži nuli kada

$$\Phi \rightarrow w_c^{(\alpha)}(k)$$

gde je

$$w_c^{(\alpha)}(k) = \frac{\hbar k}{2m_\alpha}\left(2q_{max} - k\right) \qquad \text{II } 4.12$$

Vidi se,da $\mathcal{N}_{\alpha\alpha}$ raste dok k opada.

Iščezavanje veličine $\mathcal{N}_{\alpha\alpha}$ za $w=w_c$ možemo da shvatimo kao prelaz iz "stimulisane" u "nestimulisanu" fazu,pošto za $w>w_c$ uticaj spoljašnje stimulacije $\hat{W}(t)$ na eksitonski populacioni broj postaje zanemarljiv i posle toga ovaj okupacioni broj menja se uglavnom zahvaljujući termalnim efektima.

Z A K L J U Č A K

Analiza efekata spoljašnje stimulacije u molekularnom kristalu sa Bete-ovim zonama,koja je izvršena u ovom diplomskom radu,može se rezimirati na sledeći način:

a) spoljašnja stimulacija tipa električno polje--dipol dovodi do disipacije energije u sistemu.Ovaj rezultat se dobija u aproksimaciji linearne reakcije.Disipacija nastupa usled toga što je popravka na srednji broj eksitona koja dolazi usled interakcije sa spoljašnjim poljem, imaginarna.To znači,da je srednja energija sistema kompleksna veličina,pri čemu je njen imaginarni deo odgovoran za pretvaranje energije elektromagnetnih talasa u druge vrste energije,konkretno,u toplotnu energiju;

b) spoljašnja stimulacija dovodi do porasta eksitonskog populacionog broja tek u kvadratnoj aproksimaciji po interakciji.Pokazano je,da do porasta dolazi zbog prisustva većeg broja Bete-ovih zona,što praktično znači,da dolazi do nagomilavanja eksitona u jednoj zoni,za račun pražnjenja ostalih.Osim toga,indukovani populacioni broj je utoliko veći,ukoliko je frekvenca elektromagnetnih talasa manja,što takodje odgovara poznatim eksperimentalnim činjenicama o laserima.Najinteresantniji rezultat istraživanja je svakako činjenica,da u laserima postoji fazni prelaz iz "stimulisane faze" u normalnu fazu.To znači,da na frekvencama do neke granične frekvence spoljašnja stimulacija povećava srednji broj eksitona.Posle ove granice povećavanja nema,indukovani eksitonski srednji broj je ravan nuli i populacija eksitona se menja samo zahvaljujući unutrašnjim procesima u sistemu,a ove promene su,kao što smo već naglasili,veoma male.Interesantno je podvući,da je ova granična frekvenca za dva reda veličine niža od srednje frekvence vidljive svetlosti.

L I T E R A T U R A

1. V.M.Agranovič:Teorija eksitonov;Nauka,Moskva 1969
2. D.N.Zubarev:Neravnovesnaja statističeskaja termodinamika Nauka,Moskva 1971
3. S.V.Tjablikov:Metodi kvantovoj teoriji magnetizma Nauka,Moskva 1965
4. V.M.Agranovič:ŽETF 37 430 (1959)
5. V.M.Agranovič,B.S.Tošič:ŽETF 53 149 (1967)
6. O.A.Dubovskij,J.V.Konobejev:FTT 6 2599 (1964)
7. O.A.Dubovskij,J.V.Konobejev:FTT 7 946 (1965)
8. L.D.Landau,E.M.Lifšic:Kvantna mehanika Beograd 1966
9. N.N.Bogoljubov:Lekciji po kvantovoj statistike Kiev 1949
10. V.M.Agranovič,B.L.Ginzburg:Kristallooptika s učetom prostranstvenoj disperziji i teorija eksitonov Nauka,Moskva 1965