UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET - GRUPA FIZIKA

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

Tema:

O PROBLEMU KOREKTNOG HARMONIJSKOG POLARITONSKOG SPEKTRA

RADUJKOV R. VLADIMIR

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

SADRŽAJ:

U V O D

Cilj ovoga rada je da se ispitaju posledice neodržanja broja kvazičestica u sistemu polaritona. Kao što je poznato, ni hamiltonijan Frenkelovih eksitona, ni hamiltonijan polaritona ne komutiraju sa operatorom totalnog broja kvazičestica, a to znači da osnovno stanje sistema nije dobro definisano. Problem neodržanja, ako se isključi Hajzenbergov feromagnetik, prisutan je kod svih tipova elementarnih eksitacija u kristalima.

Takodje je pokazano da u slučaju kada se broj kvazičestica ne održava,metod približne druge kvantizacije / P.D.K./, koji je predložio N. N. Bogoljubov, daje nekorektan spektar čak i u harmonijskim aproksimacijama. Radi se o tome da korekcije u harmonijski spektar, u ovom slučaju, unose i anharmonijski članovi hamiltonijana sistma.

Ako posmatramo sistem Frenkelovih eksitona, onda se problem harmonijskog spektra može rešiti zahvaljujući činjenici da je energija eksitacije izolovanog molekula daleko veća od širine eksitonke zone, pa se odnos ove dve veličine pojavljuje kao mali parametar ove teorije.

U sistemu polaritona ovakav prirodan mali paramtar se ne pojavljuje pa je zato problem harmonijskog spektra polaritona parcijalan i rešava se od slučaja do slučaja.

Naš cilj je da u oblasti rezonance /ona oblast inpulsa u kojoj se eksitonska i fotonska energija presecaju/ nadjemo korektan harmonijski polaritonski spektar.

GLAVA I

NEODRŽANJE BROJA EKSITONA I POSLEDICE

§1 Rezultati metode P.D.K. u teoriji eksitona

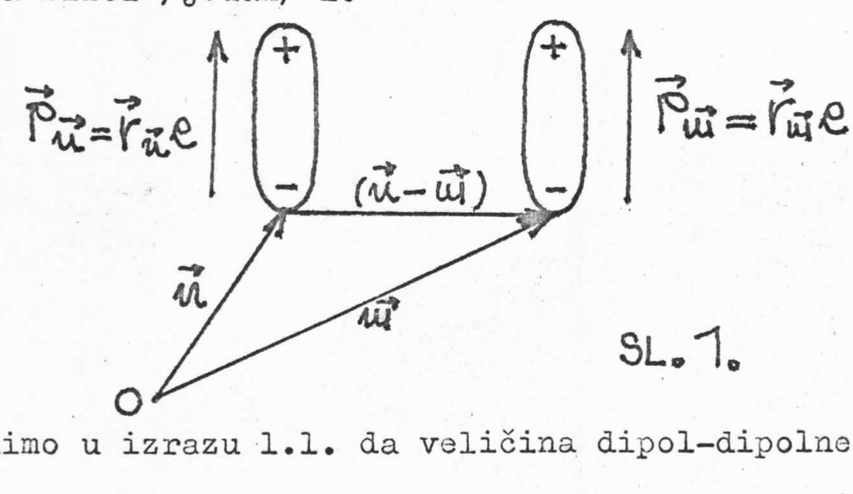
§2 Korekcija spektra dobijenog metodom P.D.K.

I. § 1. Rezultati metode P.D.K. u teoriji eksitona

Molekulski kristali se odlikuju malom energijom veze u odnosu na jonske i kovalentne kristale. Kod ovih kristala uzrok kristalizaciji je, takodje, Kulonova elektrostatička sila privlačenja, s tim što je veza u kristalnoj rešetci dipol-dipolnog tipa a ne unipolnog kao kod jonskih kristala. Kod ovih kristala ne postoje sile razmene jer su molekuli, koji čine rešetku, potpuno zatvoreni sistemi. U takve kristale spadaju plemeniti gasovi ali i jedinjenja kao što su naftalin i benzol u čvrstom stanju. Dakle, za energiju veze kod ovih kristala je odgovorna potencijalna energija dipola u polju dipola, koja se može prikazati izrazom:

$$V_{\vec{n}\vec{m}} = e^2 \frac{\vec{r}_{\vec{n}}\cdot\vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{n}-\vec{m}|^3} - \frac{3e^2[\vec{r}_{\vec{n}}(\vec{n}-\vec{m})][\vec{r}_{\vec{m}}(\vec{n}-\vec{m})]}{|\vec{n}-\vec{m}|^5} \qquad 1.1.$$

gde su $e\vec{r}_{\vec{n}}=\vec{p}_{\vec{n}}$ i $e\vec{r}_{\vec{m}}=\vec{p}_{\vec{m}}$ dipolni momenti molekula sa vektorom položaja $\vec{n}$ i $\vec{m}$. Ovde je $\vec{r}_{\vec{n}}$ efektivna dužina dipola što se vidi na slici /jedan/ 1.



SL. 1.

Vidimo u izrazu 1.1. da veličina dipol-dipolne interakcije zavisi kako od intenziteta dipolnih momenata, tako i od ugla koji ovi dipoli zaklapaju sa medjusobnim radijusom $(\vec{n}-\vec{m})$.

Podjimo od toga da svojstveni problem hamiltonijana bilo kog molekula mora dati energetski spektar, tj.:

$$H_{\vec{n}}\varphi^{f}(\vec{r})=E^{f}\varphi(\vec{r})$$ gde je f - oznaka nivoa

Ali, kada imamo čvrsto stanje materije ne možemo da rešimo isti svojstveni problem jer ne znamo analitički izraz talasne funkcije kristala. Zato se koristi metod sekundarne kvantizacije koji nam omogućava da bez poznavanja talasne funkcije dodjemo do energetskog spektra.

Hamiltonijan našeg kristala će sadržati zbir hamiltonijana svih molekula i zbir svih medjusobnih dipol-dipolnih interakcija, tj.:

$$\hat{H}_{TOT}=\sum_{\vec{n}}\hat{H}_{\vec{n}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}\hat{V}_{\vec{n}\vec{m}} \qquad 1.2$$

U reprezentaciji druge kvantizacije hamiltonijan $\hat{H}_{\vec{n}}$, koji daje svojstvene energije molekula, ima oblik:

$$\hat{H}_{\vec{n}}=E_{\vec{n}f}\hat{a}^{+}_{\vec{n}f}\hat{a}_{\vec{n}f}$$

a operator interakcije:

$$\hat{V}_{\vec{n}\vec{m}}=V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2f_3f_4)\hat{a}^{+}_{\vec{n}f_1}\hat{a}^{+}_{\vec{m}f_2}\hat{a}_{\vec{m}f_3}\hat{a}_{\vec{n}f_4}$$

gde je $E_{\vec{n}f}$ svojstvena energija posmatranog stanja /f/, uočenog molekula na položaju $/\vec{n}/$, i gde je $V_{\vec{n}\vec{m}}$ - matrični element interakcije dva molekula sa raznim nivoima $/f_1f_2f_3f_4/$, tj.:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}=\int\varphi^{*f_1}_{\vec{n}}\varphi^{*f_2}_{\vec{m}}V_{\vec{n}\vec{m}}\varphi^{f_3}_{\vec{m}}\varphi^{f_4}_{\vec{n}}d\tau_{\vec{n}}d\tau_{\vec{m}}$$

Ovde se integracija vrši po oblastima Hilbertovog prostora $\tau_{\vec{n}}$ oko čvora $|\vec{n}|$ i $\tau_{\vec{m}}$ oko čvora $|\vec{m}|$. Energija interakcije se kreće od o,ol do o,l [ev], dok svojstvene vrednosti energije molekula uzimaju vrednosti od 3 do 5 ev. Zato možemo smatrati da je:

$$E_{\vec{n}f} \gg V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4)$$

Dakle hamiltonijan kristala možemo predstaviti sa:

$$\hat{H}_{TOT} = \sum_{\vec{n}f} E^{f}_{\vec{n}} \hat{a}^{+}_{\vec{n}f} \hat{a}_{\vec{n}f} + \qquad 1.3.$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ f_1 f_2 f_3 f_4}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4)\, \hat{a}^{+}_{\vec{n}f_1} \hat{a}^{+}_{\vec{m}f_2} \hat{a}_{\vec{m}f_3} \hat{a}_{\vec{n}f_4}$$

$\hat{a}^{+}_{\vec{n}f}$ kreacioni operator, kreira elektron u stanju f,

$\hat{a}_{\vec{n}f}$ anihilacioni operator, uništava elektron u stanju f

Operatori $\hat{a}^{+}_{\vec{n}f}$ i $\hat{a}_{\vec{n}f}$ su fermi operatori jer ceo sistem čine realne čestice sa spinom $s = \frac{1}{2}$.

Da bi kristal bio u osnovnom stanju posmatrajmo ga na temperaturi $T = 0°K$. Kada obasjamo takav kristal snopom monohromatske svetlosti, dovoljne energije da podigne elektron na viši nivo, nastaje eksiton - pobudjen molekul. Po isteku vremena života ovog pobudjenog stanja dolazi do deeksitacije uz emisiju fotona odredjene energije. Deeksitacija može da da^ i više fotona nižih energija ukoliko je pobudjen nivo bio viši od prvog. Tada ovaj foton može da izvrši novu eksitaciju nekog drugog molekula. Ovaj, pak, opet posle izvesnog vremena deeksitovanjem daje novi foton sposoban za novu eksitaciju. Dakle, proces se nastavlja u vidu prostiranja pobudjenog stanja kroz kristal. Ovaj talas jeste eksitonski talas, a pobudjeni molekul - eksiton. Kada eksiton prodje kroz kristal, na kraju daje fluorescentnu emisiju svetlosti, kao proces konačne deeksitacije kristala.

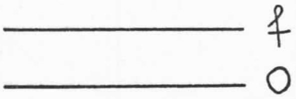
Sada ćemo metodom približne druge kvantizacije potražiti spektar eksitona. Radi jednostavnosti posmatrajmo samo dva nivoa koje označimo sa 0 za osnovno stanje i f pobudjeno stanje. Izvršimo smenu indeksa

$$f \to s \qquad f_1 f_2 f_3 f_4 \to s_1 s_2 s_3 s_4$$

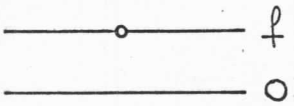
u jednačini 1.3. tj.:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n}s} E^s_{\vec{n}} \hat{a}^+_{\vec{n}s} \hat{a}_{\vec{n}s} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ s_1 s_2 s_3 s_4}} V_{\vec{n}\vec{m}} \hat{a}^+_{\vec{n}s_1} \hat{a}^+_{\vec{m}s_2} \hat{a}_{\vec{m}s_3} \hat{a}_{\vec{n}s_4}$$

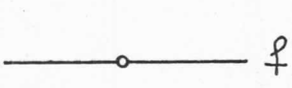
i pogledajmo koja su moguća stanja nekog n-tog molekula, što važi za svaki čvor rešetke.



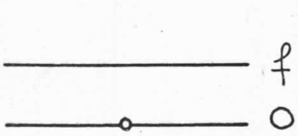
$|0_0 0_f\rangle$ prazna stanja



$|0_0 1_f\rangle$ eksiton - pobudjeni molekul



$|1_0 1_f\rangle$ jedan elektron u osnovnom i jedan elektron u pobudjenom stanju



$|1_0 0_f\rangle$ osnovno stanje molekula /elektron na osnovnom nivou/

Radi lakšeg pisanja nećemo stavljati $(\rightarrow)$ na indeksima $\vec{n}$ i $\vec{m}$ podrazumevajući ih kao vektore položaja uočenih molekula.

Moguće kombinacije nivoa za matrični element V_{nm} operatora $\hat{V}_{nm}$ su:

S_1	0	f	0	0	0	f	f	f	0	0	0	f	f	f	0	f	S_1
S_2	0	0	f	0	0	f	0	0	f	f	0	f	f	0	f	f	S_2
S_3	0	0	0	f	0	0	f	0	f	0	f	f	0	f	f	f	S_3
S_4	0	0	0	0	f	0	0	f	0	f	f	0	f	f	f	f	S_4

$V_{nm}=0$ $\qquad\qquad$ $V_{nm}=0$

Učinimo sledeće pretpostavke:

1. Neka molekul ima centar inverzije i neka se on poklapa sa centrom inverzije kristala.
2. Neka su osnovni nivoi nedegenerisani.
3. Neka su talasne funkcije za sve čvorove u osnovnom stanju realne.

Tada su $V_{nm}(S_1 S_2 S_3 S_4)=0$ za naznačene kombinacije.

Pa jednačina 1.3. u razvijenom obliku glasi: 1.4.

/Sume prim označavaju sumiranje po svim čvorovima sem slučaja n-n, jer ne intereaguje čvor sam sa sobom/.

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{TOT} = {} & \sum_{n} \left[E_n^{o}\, \hat{a}^{+}_{no} \hat{a}_{no} + E_n^{f}\, \hat{a}^{+}_{nf} \hat{a}_{nf} \right] + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' V_{nm}(0,0,0,0)\, \hat{a}^{+}_{no} \hat{a}^{+}_{mo} \hat{a}_{mo} \hat{a}_{no} + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' V_{nm}(f,f,0,0)\, \hat{a}^{+}_{nf} \hat{a}^{+}_{mf} \hat{a}_{mo} \hat{a}_{no} + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' V_{nm}(0,0,f,f)\, \hat{a}^{+}_{no} \hat{a}^{+}_{mo} \hat{a}_{mf} \hat{a}_{nf} + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' V_{nm}(f,0,f,0)\, \hat{a}^{+}_{nf} \hat{a}^{+}_{mo} \hat{a}_{mf} \hat{a}_{no} + \qquad 1.4. \\
& + \frac{1}{2} \sum{}' V_{nm}(0,f,0,f)\, \hat{a}^{+}_{no} \hat{a}^{+}_{mf} \hat{a}_{mo} \hat{a}_{nf} + \\
& + \frac{1}{2} \sum{}' V_{nm}(f,0,0,f)\, \hat{a}^{+}_{nf} \hat{a}^{+}_{mo} \hat{a}_{mo} \hat{a}_{nf} + \\
& + \frac{1}{2} \sum{}' V_{nm}(0,f,f,0)\, \hat{a}^{+}_{no} \hat{a}^{+}_{mf} \hat{a}_{mf} \hat{a}_{no} + \\
& + \frac{1}{2} \sum{}' V_{nm}(f,f,f,f)\, \hat{a}^{+}_{nf} \hat{a}^{+}_{mf} \hat{a}_{mf} \hat{a}_{nf}
\end{aligned}
$$

Matrični elementi $V_{nm}(f,f,0,0)$ i $V_{nm}(0,0,f,f)$, kao i $V_{nm}(f,0,f,0)$ i $V_{nm}(0,f,0,f)$, kao i $V_{nm}(f,0,0,f)$ i $V_{nm}(0,f,f,0)$, su jednaki ukoliko promenimo u jednom od njih mesto posmatranja, a to znači u sumi izvršimo smenu indeksa $n \rightleftarrows m$.

Uvedimo oznake $\alpha_{nm}=V_{nm}(f,0,f,0)$, $\beta_{nm}=V_{nm}(f,f,0,0)$ i $\gamma_{nm}=V_{nm}(f,0,0,f)$.

$$\hat{H}_{TOT}=\sum_{n}\left[E_{n}^{o}\hat{a}_{no}^{+}\hat{a}_{no}+E_{n}^{f}\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{nf}\right]+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'V_{nm}(0,0,0,0)\hat{a}_{no}^{+}\hat{a}_{mo}^{+}\hat{a}_{mo}\hat{a}_{no}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'\alpha_{nm}(f,0,f,0)\left[\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{mo}^{+}\hat{a}_{mf}\hat{a}_{nf}+\hat{a}_{mo}^{+}\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{no}\hat{a}_{mf}\right] \qquad 1.5.$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'\beta_{nm}(f,f,0,0)\left[\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{mf}^{+}\hat{a}_{mo}\hat{a}_{no}+\hat{a}_{mo}^{+}\hat{a}_{no}^{+}\hat{a}_{nf}\hat{a}_{mf}\right]$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'\gamma_{nm}(f,0,0,f)\left[\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{mo}^{+}\hat{a}_{mo}\hat{a}_{nf}+\hat{a}_{mo}^{+}\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{nf}\hat{a}_{mo}\right]$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nm}{}'V_{nm}(f,f,f,f)\left[\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{mf}^{+}\hat{a}_{mf}\hat{a}_{nf}\right]$$

Sledeće uprošćenje vršimo standardnim prelazom na kvazipauli operatore, radi čega nam trebaju komutacione relacije fermi--operatora, koje glase:

$$\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{mf}+\hat{a}_{mf'}\hat{a}_{nf}^{+}=\delta_{nm}\delta_{ff'}$$

$$\hat{a}_{nf}\hat{a}_{mf'}+\hat{a}_{mf'}\hat{a}_{nf}=0 \qquad \text{i} \qquad a_{nf}^{2}=a_{nf}^{+2}=0 \qquad 1.6.$$

$$\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{mf'}^{+}+\hat{a}_{mf'}\hat{a}_{nf}=0$$

$$\sum_{f}\hat{a}_{nf}^{+}\hat{a}_{nf}=\hat{a}_{f}^{+}\hat{a}_{f}+\hat{a}_{o}^{+}\hat{a}_{o}=1 \qquad \text{USLOV NORMIRANJA}$$

Kvazi-pauli-operatore uvodimo smenom:

$$\hat{P}^{+}_{nf} = \hat{a}^{+}_{nf}\hat{a}_{no} \quad \hat{P}_{nf} = \hat{a}^{+}_{no}\hat{a}_{nf}$$
$$\hat{P}^{+}_{nf}\hat{P}_{nf} = \hat{L}_{f} = \hat{a}^{+}_{nf}\hat{a}_{nf} = \hat{n}_{f} \qquad 1.7.$$

gde je $\hat{L}_f$ okupacioni broj ovih operatora koji daje broj čvorova u stanju f.

Može se pokazati delovanjem pauli-operatora $\hat{P}^{+}_{nf}$ i $\hat{P}_{nf}$ da su oni jednaki 0 u delu Hilbertovog prostora koji čine stanja $|0_o 0_f\rangle$ ~~[>0]~~ ; $|1_o 1_f\rangle$. Ali, u delu H. prostora $|1_o 0_f\rangle$ $|0_o 1_f\rangle$ daju nova stanja.

$$\hat{P}^{+}_{nf}|1_o 0_f\rangle = \hat{a}^{+}_{nf}\hat{a}_{no}|1_o 0_f\rangle = |0_o 1_f\rangle$$

$$\hat{P}^{+}_{nf}|0_o 1_f\rangle = \hat{a}^{+}_{nf}\hat{a}_{no}|0_o 1_f\rangle = 0$$

$$\hat{P}_{nf}|1_o 0_f\rangle = \hat{a}^{+}_{no}\hat{a}_{nf}|1_o 0_f\rangle = 0$$

$$\hat{P}_{nf}|0_o 1_f\rangle = \hat{a}^{+}_{no}\hat{a}_{nf}|0_o 1_f\rangle = |1_o 0_f\rangle$$

Tako upravo pauli-operatori $\hat{P}^{+}_{nf}$ kreiraju eksitone, a $\hat{P}_{nf}$ ih anihiliraju na tekućim čvorovima/koji su pobudjeni/.

Komutacione relacije kvazi-pauli-operatora se mogu dobiti na osnovu 1.6. i 1.7., tj,:

$$\hat{P}_{n}\hat{P}^{+}_{m} - \hat{P}^{+}_{m}\hat{P}_{n} = (1 - 2\hat{P}^{+}_{n}\hat{P}_{n})\,\delta_{nm}$$
$$\hat{P}^{+}_{n}\hat{P}^{+}_{m} - \hat{P}^{+}_{m}\hat{P}^{+}_{n} = 0 \;;\; \hat{P}_{n}\hat{P}_{m} - \hat{P}_{m}\hat{P}_{n} = 0$$
$$\hat{P}^{2}_{n} = \hat{P}^{2}_{m} = 0 \qquad \hat{P}_{n}\hat{P}^{+}_{n} + \hat{P}^{+}_{n}\hat{P}_{n} = 1 \qquad 1.8.$$

$$\hat{P}^{+}_{n}\hat{P}_{n} = \hat{a}^{+}_{nf}\hat{a}_{nf} = \hat{n}_{f} = 0, 1, 2 \ldots\ldots \infty$$

INDEKS f NE PIŠEMO DALJE KOD $\hat{P}_n, \hat{P}^{+}_n$ JER IMAMO SAMO JEDNO VIŠE-STANJE - f

Pokažimo sada da prvi član iz 1.5. daje $\sum_n \left[E_n^0 \hat{a}_{n0}^+ \hat{a}_{n0} + E_n^f \hat{a}_{nf}^+ \hat{a}_{nf}\right] =$

$$= \sum_n E_n^0 + \sum_n (E_n^f - E_n^0)\hat{a}_{nf}^+ \hat{a}_{nf} = NE_n^0 + \sum_n (E_n^f - E_n^0)\hat{P}_n^+ \hat{P}_n$$

Smena operatora i u ostalim članovima 1.5. daje hamiltonijan u pauli slici:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_n \Delta \hat{P}_n^+ \hat{P}_n + \sum_{nm}{}' \alpha_{nm} \hat{P}_n^+ \hat{P}_m +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' \beta_{nm} \left(\hat{P}_n^+ \hat{P}_m^+ + \hat{P}_m \hat{P}_n \right) + \qquad 1.9.$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' W_{nm} \hat{P}_n^+ \hat{P}_m^+ \hat{P}_m \hat{P}_n$$

,gde su: $H_0 = NE_n^0 + \frac{1}{2} \sum_{nm} V_{nm}(0,0,0,0)$

$$\Delta = E_n^f - E_n^0 - \sum_m V_{nm}(0,0,0,0) \sim 3\text{-}5\,\mathrm{eV}.$$

$$W_{nm} = V_{nm}(0,0,0,0) + V_{nm}(f,f,f,f) - 2\delta_{nm} \sim 0{,}1\,\mathrm{eV}. \qquad 1.10.$$

$$\alpha_{nm} \sim \beta_{nm} \sim \delta_{nm} \sim 0{,}1\,\mathrm{eV}.$$

Pokažimo još da Δ ne zavisi od n.

$$\sum_m V_{nm}(0,0,0,0) = \sum_m V_{n-m}(0,0,0,0) = \sum_{l} V_l(0,0,0,0)$$

$$n - m = l$$
$$m = n - l$$

$$\Delta = E_n^f - E_n^0 - \sum_l V_l(0,0,0,0)$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial n} = 0$$

Hamiltonijan nije dijagonalan zbog operatora uz β_{nm} tj. nije ermitski pa da bi ga lakše dijagonalizovali preći ćemo na boze--operatore smenama:

$$\hat{P}_n^+ = \hat{B}_n^+ \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} \hat{B}_n^{+\nu} \hat{B}_n^{\nu} \right]^{1/2}$$

$$\hat{P}_n = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} \hat{B}_n^{+\nu} \hat{B}_n^{\nu} \right]^{1/2} \hat{B}_n \qquad 1.11.$$

$$\hat{P}_n^+ \hat{P}_n = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(1+\nu)!} \hat{B}_n^{+\,\nu+1} \hat{B}_n^{\nu+1}$$

B^+ - kreacioni boze-operatori,

B - anihilacioni boze-operatori.

Za njih važe komutacione relacije 1.12.

$$\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ - \hat{B}_m^+ \hat{B}_n^+ = 0 \qquad \hat{B}_n \hat{B}_m - \hat{B}_m \hat{B}_n = 0$$

$$\hat{B}_n \hat{B}_m^+ - \hat{B}_m^+ \hat{B}_n = \delta_{nm} \qquad \hat{B}_n^+ \hat{B}_n = N_B = 0,1,2,3,4 \ldots \infty$$

1.12.

gde je $\hat{N}_B$ operator broja bozeovih kvazičestica tj. bozonski okupacioni broj. Razvijanjem izraza 1.11. u red i odbacivanjem boze-operatora višeg reda od trećeg dobijamo, za naša razmatranja, dovoljno tačne smene za pauli-operatore, oblika:

$$\hat{P}_n = \hat{B}_n - \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n \; ; \; \hat{P}_n^+ = \hat{B}_n^+ - \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n$$

$$\hat{P}_n^+ \hat{P}_n = \hat{B}_n^+ \hat{B}_n - \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n = \hat{L} \qquad 1.13.$$

$$\hat{L} = \hat{N}_B - \hat{N}_B(\hat{N}_B - 1) + \frac{2}{3} \hat{N}_B(\hat{N}_B - 1)(\hat{N}_B - 2) + \ldots\ldots$$

$$\hat{N}_B = 0,1,2 \ldots \infty \qquad \hat{L} = 0,1$$

Ako zamenimo operatore /1.13./ u izraz 1.9. i ako odbacimo boze-operatore višeg, od četvrtog reda, svodjenjem na normalne produkte dobijamo hamiltonijan u boze-reprezentaciji:

$$\hat{H}_{TOT} = \hat{H}_0 + \hat{H}_2 + \hat{H}_4 \qquad 1.14.$$

gde je:

$$\hat{H}_2 = \sum_n \Delta \hat{B}_n^+ \hat{B}_n + \sum_{nm}{}' \alpha_{nm} \hat{B}_n^+ \hat{B}_m + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' \beta_{nm} \left[\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ + \hat{B}_m \hat{B}_n\right]$$

$$\hat{H}_4 = -\sum_n \Delta \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n - \sum_{nm}{}' \alpha_{nm} \left(\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m \hat{B}_m + \hat{B}_m^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_m\right) \qquad 1.15.$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{nm}{}' \beta_{nm} \left[\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m + \hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n \hat{B}_n + \hat{B}_m^+ \hat{B}_m \hat{B}_m \hat{B}_n\right] +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' W_{nm} \left[\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m \hat{B}_n\right]$$

Po metodi P.D.K. odbacujemo anharmonijski deo hamiltonijana tj. $\hat{H}_4$ pa zatim dijagonalizujemo hamiltonijan $\hat{H}_2$. Ovo je potrebno zato što ni harmonijski deo hamiltonijana tj. $\hat{H}_2$ne komutira sa operatorom totalnog broja kvazičestica, pa hamiltonijan nije ermitski, a broj kvazi-čestica nije konstanta kretanja /ne održava se/. $[\hat{H}, N_B] \neq 0$

U tom cilju izvršimo Furije transformacije ravnim talasom, tipa:

$$\hat{B}_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{B}_k^+ e^{-ikn} \qquad \hat{B}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{B}_k e^{ikn} \qquad 1.16.$$

gde je N kao i ranije totalni broj molekula. Ovde uvodimo smenu

$$\alpha_k = \sum_\ell \alpha_\ell e^{-ik\ell} \qquad 1.17. \qquad \beta_k = \sum_\ell \beta_\ell e^{-ik\ell}$$

i dobijamo:

$$\hat{H}_2=\sum_K(\Delta+\alpha_K)\hat{B}_K^+\hat{B}_K+\frac{1}{2}\sum_K\beta_K\left(\hat{B}_K^+\hat{B}_{-K}^++\hat{B}_K\hat{B}_{-K}\right) \qquad 1.18.$$

Dijagonalizaciju vršimo standardnim transformacijama:

$$\hat{B}_K=U_K\hat{C}_K+V_K\hat{C}_{-K}^+ \qquad \hat{B}_K^+=U_K\hat{C}_K^++V_K\hat{C}_{-K} \qquad 1.19.$$

gde su $\hat{C}_K^+$, $\hat{C}_K$ takodje boze-operatori, koji moraju zadovoljavati iste komutacione relacije, odakle sledi uslov:

$$1=U_K^2-V_K^2 \qquad U_K=U_{-K} \qquad V_K=V_{-K} \qquad 1.2o.$$

Tako dobijemo:

$$\hat{H}_2=\sum_K\left[\Delta_K\left(U_K^2+V_K^2\right)+2\beta_KU_KV_K\right]\hat{C}_K^+\hat{C}_K+$$

$$+\sum_K\left[\Delta_KU_KV_K+\frac{1}{2}\beta_K\left(U_K^2+V_K^2\right)\right]\left(\hat{C}_K^+\hat{C}_{-K}^++\hat{C}_{-K}\hat{C}_K\right)+ \qquad 1.21.$$

$$+\underbrace{\sum_K\left[\Delta_KV_K^2+\beta_KU_KV_K\right]}$$

OVO ULAZI U $\hat{H}_0$ I DAJE $\hat{H}_0^{POPRAV.}$

Iz zahteva da funkcija ispred nedijagonalnog operatora bude jednaka nuli dobijamo nepoznate transformacione funkcije, korišćenjem izraza 1.2o.

$$U_K^2=\frac{1}{2}\left[\frac{\Delta_K}{\sqrt{\Delta_K^2-\beta_K^2}}+1\right] \qquad V_K^2=\frac{1}{2}\left[\frac{\Delta_K}{\sqrt{\Delta_K^2-\beta_K^2}}-1\right] \qquad 1.22.$$

Treba napomenuti da su funkcije U, V parne i realne kao što su i α_K i β_K. Ovim hamiltonijan postaje dijagonalan:

$$\hat{H}=\hat{H}_0^P+\sum_K\sqrt{\Delta_K^2-\beta_K^2}\,\hat{C}_K^+\hat{C}_K \qquad \Delta_K=\Delta+\alpha_K \qquad 1.23.$$

Pošto $\hat{C}^{+}_{k}\hat{C}_{k}$ nije ništa drugo do N_{e} - okupacioni broj to direktno čitamo zakon disperzije za eksitone:

$$E_{k} = \sqrt{\Delta_{k}^{2} - \beta_{k}^{2}} \tag{1.24.}$$

Ovako dobijena energija eksitona sadrži popravku drugog reda. Medjutim, može se pokazati da ova popravka nije dovoljna jer iz anharmonijskog hemiltonijana $\hat{H}_{4}$ možemo dobiti kontribuciju istog reda veličine kao što je β_{k}^{2} .

I. §2. Korekcija spektra dobijena metodom P.D.K.

Prvo vršimo aproksimaciju izraza za energiju i funkcije U_K i V_K kako bi izbegli stepen $\frac{1}{2}$ što mnogo olakšava rad, a ne čini veliku grešku. Razvijanjem izraza 1.22. i 1.24. u red, i uvodjenjem simbola za male parametre:

$$\nu_{1K} = \frac{\alpha_K}{2\Delta} \qquad \nu_{2K} = \frac{\beta_K}{2\Delta} \tag{2.1.}$$

dobijamo:

$$U_K = 1 + \frac{1}{2}\nu_{2K}^2 \qquad V_K = -\nu_{2K} + 2\nu_{2K}\nu_{1K}$$

$$E_K = \Delta + \alpha_K - \beta_K \nu_{2K} \tag{2.2}$$

Ovde smo išli samo do prvog i drugog reda veličine po malim parametrima ν_{1K} i ν_{2K}.

Vratimo se na anharmonijski hamiltonijan $\hat{H}_4$.

$$\hat{H}_4 = -\sum_n \Delta \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n - \sum_{nm}{}' \alpha_{nm} \left(\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m \hat{B}_m + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_m\right) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' W_{nm} \left(\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m \hat{B}_n\right) - \tag{2.3}$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' \beta_{nm} \left(\hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_n + \hat{B}_n^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m^+ \hat{B}_m + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n \hat{B}_m + \hat{B}_m^+ \hat{B}_m \hat{B}_m \hat{B}_n\right)$$

Pre svega, i ovde moramo izvršiti Furije transformacije 1.16. Lako je proveriti da je:

$$N\delta_{K_1,K} = \sum_n e^{in(K-K_1)} \tag{2.4.}$$

što smo i ranije koristili pri sredjivanju operatora posle transformacije 1.16. Na taj način dobijamo anharmonijski ham. $\hat{H}_4$, koji je pogodan za transformaciju 1.19.

$$\hat{H}_4 = -\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \Delta\, \hat{B}^+_{K_1}\hat{B}^+_{K_2}\hat{B}_{K_3}\hat{B}_{K_1+K_2-K_3} -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3}\left(\alpha_{K_1}+\alpha_{K_3}-\frac{1}{2}W_{K_1-K_3}\right)\hat{B}^+_{K_1}\hat{B}^+_{K_2}\hat{B}_{K_3}\hat{B}_{K_1+K_2-K_3} + \qquad 2.5.$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3}\beta_{K_1}\left(\hat{B}^+_{K_1}\hat{B}^+_{K_2}\hat{B}^+_{K_3}\hat{B}_{K_1+K_2+K_3}+\hat{B}^+_{K_1+K_2+K_3}\hat{B}_{K_3}\hat{B}_{K_2}\hat{B}_{K_1}\right)$$

Operatoru $B^+_{K_1}B^+_{K_2}B_{K_3}B_{K_1+K_2-K_3}$ odgovara dogadjaj kreacije dva bozona sa inpulsima P_1 i P_2 i anihilacije dva bozona sa impulsima P_3 i $(P_1+P_2-P_3)$, vidimo da i za ostale operatore ovog tipa važe zakoni održanja impulsa, što opravdava naziv elementarnih eksitacija - - kvazičestice.

Uvrštavanjem transformacionih funkcija 2.2. u izraz 1.19. dobijemo:

$$\hat{B}^+_{K_1} = \left(1+\frac{1}{2}V^2_{2K_1}\right)\hat{C}^+_{K_1} + \left(-V_{2K_1}+2V_{1K_1}V_{2K_1}\right)\hat{C}_{-K_1}$$

$$\hat{B}^+_{K_2} = \left(1+\frac{1}{2}V^2_{2K_2}\right)\hat{C}^+_{K_2} + \left(-V_{2K_2}+2V_{1K_2}V_{2K_2}\right)\hat{C}_{-K_2}$$

$$\hat{B}_{K_3} = \left(1+\frac{1}{2}V^2_{2K_3}\right)\hat{C}_{K_3} + \left(-V_{2K_3}+2V_{1K_3}V_{2K_3}\right)\hat{C}^+_{-K_3} \qquad 2.6.$$

$$\hat{B}_{K_4} = \left(1+\frac{1}{2}V^2_{2K_4}\right)\hat{C}_{K_4} + \left(-V_{2K_4}+2V_{1K_4}V_{2K_4}\right)\hat{C}^+_{-K_4}$$

$$K_4 = K_1+K_2-K_3 \qquad K_6 = K_1+K_2+K_3$$

, a ako odbacimo male parametre drugog reda, dobijamo:

$$\hat{B}^+_K = \hat{C}^+_K - V_{2K}\hat{C}_{-K} \qquad \hat{B}_K = \hat{C}_K - V_{2K}\hat{C}^+_{-K} \qquad 2.7.$$

Prvi član ham. $\hat{H}_4$ je proporcionalan Δ te ćemo njegov operator transformisati sa tačnošću malih parametra drugog reda $V_K^2 \sim \sim V_{1K}V_{2K}$. U ostalim članovima dovoljno je izvršiti transformaciju 2.7. jer svi oni operatori deluju na matrične elemente interakcije tj. na β_K, α_K i $W_{K'}$, koji su mali.

Na ovaj način se u našem hamiltonijanu $\hat{H}_4$ javljaju operatori $\hat{C}_K$ četvrtog reda, koji svodjenjem preko komutacionih relacija 1.12., na normalne produkte daju operatore $\hat{C}_K$ drugog reda. Posle sredjivanja operatora po talasnim vektorima $K_1K_2K_3$ i odbacivanja operatora četvrtog reda svedenih na normalne produkte, dobijamo hamiltonijan koji očigledno daje prinos totalnom broju kvazičestica - - eksitona.

$$
\begin{aligned}
{}^2\hat{H}_4 = & \overbrace{-\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2} 2\Delta V_{2K_2}^2 \hat{C}_{K_1}^+ \hat{C}_{K_1}}^{I} + \overbrace{\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2}\left(2\beta_{K_1}V_{2K_1} - 2\Delta V_{2K_1}^2\right)\hat{C}_{K_2}^+ \hat{C}_{K_2}}^{II} + \\
& \overbrace{+\frac{1}{N}\sum_{K_1K_3} 2\beta_{K_1}V_{2K_1}\hat{C}_{K_3}^+ \hat{C}_{K_3}}^{III} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{K_1K_3}\left(\alpha_{K_3} - 2\Delta V_{1K_3} - \frac{1}{2}W_{K_1-K_3}\right)V_{2K_3}\hat{C}_{K_1}^+ \hat{C}_{-K_1}^+ + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{K_1K_3}\left(\alpha_{K_1} - 2\Delta V_{1K_1} - \frac{1}{2}W_{K_1-K_3}\right)V_{2K_1}\hat{C}_{K_3}\hat{C}_{-K_3}
\end{aligned}
\qquad 2.8.
$$

I indeks 2 označava da je to samo deo anharmonijskog ham. Lako je pokazati da su poslednja dva člana zanemarljiva.

Smenom indeksa u prvom članu $/K_1 \to K_2/$ dobijamo isti član kao drugi, ali sa suprotnim znakom. Ukoliko u preostalom, trećem članu, izvršimo smenu indeksa $K_3 \to K$ i $K_1 \to q$, konačno dobijamo ${}^2\hat{H}_4$:

$$ {}^2\hat{H}_4 = \frac{1}{N} \sum_{\mathcal{L}} \frac{\beta_{\mathcal{L}}^2}{\Delta} \sum_K \hat{C}_K^+ \hat{C}_K \qquad 2.9. $$

Ako sada pripojimo totalnom hamiltonijanu ${}^2\hat{H}_4$, na prvi pogled ovaj rezultat /2.9./ nam se čini nebitan, jer se ceo izraz deli sa N koje je reda Avogadrovog broja. Ali, uočimo razliku u indeksima izmedju jednačine 1.23. i jednačine 2.9. što nam omogućava drukčije tretiranje matričnog elementa $\beta_{\mathcal{L}}$.

Pravilo prelaska sume po q u integral dato je izrazom

$$ \sum_{\mathcal{L}} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathcal{L} $$

Setimo se da smo sa K zamenili indekse koji su označavali čvorove m i n; sada tu ulogu igra q, pa suma mora obuhvatiti sve čvorove u kristalnoj rešetki. Dimenzionost mora biti održana, pa ako integraciju vršimo po celoj zapremini prve briluelove zone i po svim čvorovima, ispred integrala ćemo imati faktor:

$$ \frac{Na^3}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} \qquad a - \text{PARAMETAR ELEM. ĆELIJE} $$

gde je V zapremina kristala. Dakle:

$$ \frac{1}{N} \sum_{\mathcal{L}} \frac{\beta_{\mathcal{L}}^2}{\Delta} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N\Delta} \int \beta_{\mathcal{L}}^2 d\mathcal{L} $$

Izvršimo smenu 1.17., gde je sad $l = n - m$:

$$ \beta_{\mathcal{L}} = \sum_{nm} \beta_{n-m} e^{iK(n-m)} \qquad 2.10. $$

Pošto za prostu kubnu strukturu važi uslov centrosimetričnosti,

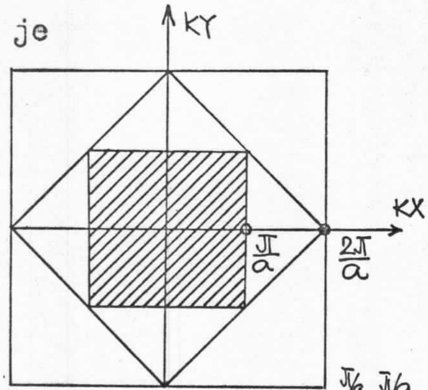
$$ \beta_{\mathcal{L}} = \sum_{n=1}^{6} \beta_{n-0} e^{iKn} \qquad m = 0 $$

Naše β_ℓ u aproksimaciji najbližih suseda može da se napiše kao

$$\beta_\ell = \beta_a\, 2(\cos K_x a + \cos K_y a + \cos K_z a) \qquad 2.11.$$

što smo dobili Ojlerovim transformacijama,

te je



$$\frac{1}{N}\sum_\ell \frac{\beta_\ell^2}{\Delta} = \frac{Na^3}{(2\pi)^3}\,\frac{4}{N\Delta}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \beta_a^2(\cos K_x a+\cos K_y a+\cos K_z a)^2\, dK_x\, dK_y\, dK_z$$

$$K_x a = X \qquad K_y a = Y \qquad K_z a = Z \qquad \frac{1}{a^3}dX\,dY\,dZ = dK_x\, dK_y\, dK_z$$

$$\frac{1}{N}\sum_\ell \frac{\beta_\ell^2}{\Delta} = \frac{\beta_a^2}{2\pi^3\Delta}\underbrace{\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}(\cos X+\cos Y+\cos Z)\,dX\,dY\,dZ}_{I}$$

$$I = 12\pi^3$$

$$\frac{1}{N}\sum_\ell \frac{\beta_\ell^2}{\Delta} = 6\,\frac{\beta_a^2}{\Delta} \qquad 2.12.$$

$${}^2\hat{H}_4 = \sum_K 6\,\frac{\beta_a^2}{\Delta}\,\hat{C}_K^+\hat{C}_K \qquad 2.13.$$

$${}^2\hat{H}_4 = \sum_K 6\,\beta_a V_{20}\,\hat{C}_K^+\hat{C}_K \;; \qquad V_{20} = \frac{\beta_a}{\Delta}$$

Napomenimo, na kraju, da odbačeni deo $\hat{H}_4$ sadrži i jedan član pro- procionalan Δ koje je veliko, te ćemo ga napisati radi kasnijeg korišćenja.

$${}_{max}\hat{H}_4^0 = -\frac{\Delta}{N}\sum_{K_1K_2K_3}\hat{C}_{K_1}^+\hat{C}_{K_2}^+\hat{C}_{K_3}\hat{C}_{K_4} \qquad 2.14.$$

Ostali članovi odbačenog dela $\hat{H}_4$ pogodnim presumiranjem ili daju 0, ili pak zanemarljivo male veličine.

Kao što vidimo totalnu energiju kristala sada možemo predstaviti sa:

$$\hat{H}_{TOT} = \hat{H}_0^{POP.} + \hat{H}_2^{EKS.} + \hat{H}_4^{EKS.} = \hat{H}_0^{POP.} + \hat{H}_2^{POPR.}$$

i na osnovu 2.2. sledi

$$\hat{H}_2^{POP.} = \sum_K \sqrt{\Delta_K^2 - \beta_K^2}\, \hat{C}_K^+ \hat{C}_K + 6\beta a \frac{\beta a}{\Delta} \sum_K \hat{C}_K^+ \hat{C}_K$$

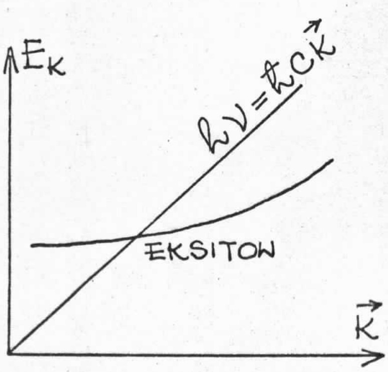
$$\hat{H}_2^{POP} = \sum_K \left(\Delta + \alpha_K - \beta_K \frac{\beta_K}{2\Delta} + 6\beta a \frac{\beta a}{\Delta} \right) \hat{C}_K^+ \hat{C}_K$$

odakle čitamo korektan zakon disperzije za eksitone

2.15.

$$E_K^{eks.} = \Delta + \alpha_K - \beta_K V_{2K} + 6\beta a V_{20}$$

Na kraju treba napomenuti da je $\beta a \cong \beta_K$, zbog toga što β_K opada sa trećim stepenom rastojanja; smatrajući da uzimanjem u obzir interakciju uočenog n-tog molekula, sa najbližim susedima, ne činimo bitnu grešku. Grafički prikaz zakona disperzije za eksitone izgleda ovako:



GLAVA II

KOREKTAN POLARITONSKI SPEKTAR U OBLASTI REZONANCE

II. § 3. Metod P.D.K. u teoriji polaritona

Ako bi bilo ostvarljivo trenutno prekidanje snopa monohromatske svetlosti, dobijeni rezultat u predhodnoj glavi bi imao punu važnost. Medjutim, eksitoni, nastali dejstvom svetlosti, se kreću u polju fotona koji stalno nailaze zbog nemogućnosti trenutnog isključenja izvora monohromatskog zračenja. Eksperimenti pokazuju da eksitonski zakon disperzije ima više teoretskog značaja. Naime, pri snimanju spektara ovakvih eksitacija pojavljuje se još jedna grana u zakonu disperzije. Uzrok tome je što u kristalu egzistira smeša dve kvazičestice - eksitona i fotona. Ove kvazičestice medjusobno intereaguju svojim poljima. Smešu energije eksitona, fotona i interakcije /eks,,fot./ nazvaćemo harmonijska energija. Ovoj energiji odgovara nova kvazičestica koja se zove polariton. Eksiton ima sve karakteristike jakog dipola, te njegov dipolni momenat intereaguje sa vektorskim potencijalom elektromagnetnog polja fotona i daje nam kvazičesticu - polariton. Dakle, hamiltonijan kristala kao sistema u ovom slučaju glasi

$$\hat{H}_{TOT} = \hat{H}_o + \hat{H}_{POLARITONA} = \hat{H}_o + \hat{H}_{EKS} + \hat{H}_{FOT.} + \hat{H}_{INTER.} \qquad 3.1.$$

i
$$\hat{H}_{EKS} = \sum_K E^e_K \hat{C}^+_K \hat{C}_K \qquad \hat{H}_{FOT.} = \sum_{\ell} \hbar c \ell\, \hat{a}^+_{\ell} \hat{a}_{\ell} \qquad \hbar\omega = \hbar c \ell \qquad 3.2.$$

Napomenimo da posmatramo samo jednu fotonsku granu. Iz klasične elektro dinamike imamo izraz za impuls elektrona: /u polju/

$$\vec{P}_e = \vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}$$

gde je $\vec{A}$ vektorski potencijal elektro magnetnog polja, a $\vec{P}$ impuls elektrona pre dejstva fotonskog polja./Posmatramo elektron pobudjenog molekula/. Tada se kinetička energija ovakvog elektrona može pokazati sa izrazom:

$$E^{EL.}_{KIN} = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e^2}{2m_e c^2}\vec{A}^2 - \frac{2e}{2cm_e}\vec{p}\vec{A}$$

Za razmatranje prvi deo nije bitan jer ulazi u $\hat{H}_0$, a drugi član možemo odbaciti mereći od njega energiju fotona. Pa je

$$\hat{H}_{INTER.} = \sum_n E^{EL.} = \sum_n -\frac{e}{m_e c}\hat{\vec{p}}\hat{\vec{A}} \qquad 3.3.$$

Operator impulsa u kvantnoj mehanici glasi

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

što u reprezentaciji druge kvantizacije dobija oblik

$$\hat{\vec{p}}_n = \sum_{f_1 f_2} \underbrace{\left[\int \varphi_n^{*f_1}(-i\hbar\nabla_{\vec{r}}^{n})\varphi_n^{f_2}\,d^3\vec{r}\right]}_{I} \hat{a}^{+}_{nf_1}\hat{a}_{nf_2} \qquad 3.4.$$

gde je

$$\varphi_n^{*f_1} = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}'}^{f_1} e^{-i\vec{r}\vec{k}'}\frac{1}{\sqrt{6}} \qquad 6\text{-FAKTOR NORMIRANJA}$$

$$\varphi_n^{f_2} = \frac{1}{\sqrt{6}}\sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}^{f_2} e^{i\vec{r}_n\vec{k}}$$

$$I = \frac{1}{6}\sum_{\vec{k}\vec{k}'}\int \varphi_{\vec{k}'}^{*f_1}(-i\hbar\nabla_{\vec{r}_n})\varphi_{\vec{k}}^{f_2} e^{i\vec{r}_n(\vec{k}-\vec{k}')}d^3\vec{r} \qquad 3.5.$$

$$I = \frac{1}{6}\sum_{\vec{k}\vec{k}'}\varphi_{\vec{k}'}^{*f_1}\varphi_{\vec{k}}^{f_2}\int(-i\hbar\nabla_{\vec{r}_n})e^{i\vec{r}_n(\vec{k}-\vec{k}')}d^3\vec{r}$$

$$I = \frac{1}{6}\sum_{\vec{k}\vec{k}'}\vec{k}\hbar\,\varphi_{\vec{k}'}^{*f_1}\varphi_{\vec{k}}^{f_2}e^{i\vec{r}_n(\vec{k}-\vec{k}')} = \hbar\vec{P}$$

Ovde je $\vec{P}$ dipolni momenat eksitovanog molekula

Smenom u 3.3. imamo

$$\hat{H}_{INTER.} = -\frac{e}{m_e c}\hbar\sum_{\vec{n}f_1f_2}\hat{a}^{+}_{\vec{n}f_1}\hat{a}_{\vec{n}f_2}\vec{P}\hat{\vec{A}}_{\vec{n}} \;;\quad \mu_B=\frac{e\hbar}{2m_e c}$$

Kao što je poznato boks-kvantizacija fotona daje sledeći operator vektorskog potencijala

$$\hat{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}j}\mathcal{D}_{\vec{k}j}\vec{l}_{j\vec{k}}\left[a_{j\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{r}} + a^{+}_{j\vec{k}}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right] \qquad 3.6.$$

$\vec{l}_{\vec{k}j}$ - vektor polarizacije za fotone.

$\mathcal{D}_{\vec{k}j}$ - faktor normiranja koji u našem slučaju jedne grane fotona unutar kristala glasi:

$$\mathcal{D}'_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{N\omega_{\vec{k}}}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathcal{D}_{\vec{k}}$$

te je

$$\hat{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}}\frac{1}{\sqrt{N}}\mathcal{D}_{\vec{k}}\vec{l}_{\vec{k}}\left[a_{\vec{k}}e^{+i\vec{k}\vec{n}} + a^{+}_{-\vec{k}}e^{+i\vec{k}\vec{n}}\right]$$

i

$$\hat{H}_{INT} = -2\frac{\mu_B}{\sqrt{N}}\sum_{nf_1f_2}\sum_{k}\vec{P}\mathcal{D}_{\vec{k}}\vec{l}_{\vec{k}}(\hat{a}^{+}_{nf_1}\hat{a}_{nf_2})(\hat{a}_{\vec{k}}+\hat{a}^{+}_{-\vec{k}})e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad 3.7.$$

podrazumevajući pod $\vec{q}$ talasni vektor, a $\vec{n}$ radijus uočenog molekula. Bilo koji molekul, u našem slučaju, kao i ranije, može imati samo dva stanja

f_1	0	0	f	f
f_2	0	f	0	f

$|1_0 0_f\rangle$ i $|0_0 1_f\rangle$

Zamenom kvazi-pauli-operatora posle razvoja 3.7. po svim stanjima dobijamo

$$\hat{H}_{INT} = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{kn}2\mu_B\vec{P}\mathcal{D}_{\vec{k}}\vec{l}_{\vec{k}}\left(1+\hat{P}^{+}_{n}+\hat{P}_{n}\right)(\hat{a}_{k}+\hat{a}^{+}_{-k})e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

Uvedimo oznaku za matrični element eksiton-fotonske interakcije

$$T_{\vec{\ell}} = 2\mu_B \vec{P}\mathcal{D}_{\vec{\ell}}\vec{\ell}_{\vec{\ell}} \qquad 3.8.$$

Napomenimo bitnu činjenicu da je T_{ℓ} zavisno od ugla izmedju dipola molekula i vektora polarizacija fotona. Dalje je

$$\hat{H}_{INT} = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\ell n} T_{\ell}(\hat{P}_n^+ + \hat{P}_n)(\hat{a}_{\ell} + \hat{a}_{-\ell}^+)e^{+i\ell n} + \hat{H}_1^{INTER.}$$

$$\hat{H}_1^{INTER} = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\ell} T_{\ell}(\hat{a}_{\ell} + \hat{a}_{-\ell}^+)\sum_n e^{i\vec{\ell}\vec{u}} = 0$$

$$\hat{H}_{INT.} = \tilde{H}_{INT} = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\ell n} T_{\ell}(\hat{P}_n^+ + \hat{P}_n)(\hat{a}_{\ell} + \hat{a}_{-\ell}^+)e^{i\ell n}$$

3.9.

Da bi mogli izraziti 3.9. preko istih operatora - bozeovih koristimo ponovo relacije 1.13., ali paralelno vršimo Furije transformacije

3.1o.

$$\hat{P}_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_K \hat{P}_K^+ e^{-ikn} \qquad \hat{P}_n = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_K \hat{P}_{-K} e^{-ikn}$$

$$\hat{\tilde{H}}_{INT.} = \frac{-1}{\sqrt{N}\sqrt{N}}\sum_{\ell} T_{\ell}(\hat{a}_{\ell} + \hat{a}_{-\ell}^+)\sum_K(\hat{P}_K^+ + \hat{P}_{-K})\sum_n e^{in(\ell-k)}$$

$$N\delta_{\ell,K} = \sum_n e^{in(\ell-k)}$$

konačno

$$\hat{\tilde{H}}_{INT.} = -\sum_{\ell} T_{\ell}\left[\hat{P}_{\ell}^+\hat{a}_{\ell} + \hat{a}_{\ell}^+\hat{P}_{\ell} + \hat{P}_{\ell}^+\hat{a}_{-\ell}^+ + \hat{P}_{\ell}\hat{a}_{-\ell}\right]$$

3.11.

Korišćenjem 3.1o. i pogodnim izborom K-ova u 1.16. posle kraćeg računa dobijamo 3.12.

$$\hat{P}_{\mathcal{L}} = \hat{B}_{\mathcal{L}} - \frac{1}{N}\sum_{K_1K_2} \hat{B}^{+}_{K_2} \hat{B}_{K_1} \hat{B}_{\mathcal{L}+K_2-K_1}$$

$$\hat{P}^{+}_{\mathcal{L}} = \hat{B}^{+}_{\mathcal{L}} - \frac{1}{N}\sum_{K_1K_2} \hat{B}^{+}_{\mathcal{L}+K_2-K_1} \hat{B}^{+}_{K_1} \hat{B}_{K_2} \qquad 3.12.$$

što smenom u 3.11. daje

$${}_2\hat{\tilde{H}}_{INT.} = \sum_{\mathcal{L}} T_{\mathcal{L}} \left[\hat{B}^{+}_{\mathcal{L}}\hat{a}_{\mathcal{L}} + \hat{a}^{+}_{\mathcal{L}}\hat{B}_{\mathcal{L}} + \hat{B}^{+}_{\mathcal{L}}\hat{a}^{+}_{-\mathcal{L}} + \hat{a}_{-\mathcal{L}}\hat{B}_{\mathcal{L}}\right]$$

$${}_4\hat{\tilde{H}}_{INT.} = -\frac{1}{N}\sum_{\mathcal{L}} T_{\mathcal{L}} \left[\hat{B}^{+}_{\mathcal{L}+K_2-K_1}\hat{B}^{+}_{K_1}\hat{B}_{K_2}\hat{a}_{\mathcal{L}} + \hat{a}^{+}_{\mathcal{L}}\hat{B}^{+}_{K_2}\hat{B}_{K_1}\hat{B}_{\mathcal{L}+K_2-K_1} + \right. \qquad 3.13.$$

$$\left. + \hat{a}^{+}_{-\mathcal{L}}\hat{B}^{+}_{\mathcal{L}+K_2-K_1}\hat{B}^{+}_{K_1}\hat{B}_{K_2} + \hat{B}^{+}_{K_2}\hat{B}_{K_1}\hat{B}_{\mathcal{L}+K_2-K_1}\hat{a}_{-\mathcal{L}}\right]$$

$$\hat{\tilde{H}}_{INT} = {}_2\hat{\tilde{H}}_{INT.} + {}_4\hat{\tilde{H}}_{INT.}$$

Metod P.D.K., kao i ranije, zanemaruje kompletan ham.. ${}_4\hat{\tilde{H}}_{INT.}$

Potražimo spektar polaritona, na osnovu 3.1., 3.2. i 3.13 sledi

$${}_2\hat{H}_{HARM.} = \hat{H}_{EKS} + \hat{H}_{FOT} + {}_2\hat{\tilde{H}}_{INTER.} = \hat{H}_{POLAR.}$$

$${}_2\hat{H}_{HAR} = \sum_{K} \left[E^{e}_{K}\hat{C}^{+}_{K}\hat{C}_{K} + E^{FOT.}_{K}\hat{a}^{+}_{K}\hat{a}_{K} + T_{K}\left(\hat{B}^{+}_{K}\hat{a}_{K} + \hat{a}^{+}_{K}\hat{B}_{K} + \right.\right. \qquad 3.14.$$

$$\left.\left. + \hat{B}^{+}_{K}\hat{a}^{+}_{-K} + \hat{a}_{-K}\hat{B}_{K}\right)\right]$$

$$\hat{C}_{K} = \hat{B}_{K}$$

Uvedimo oznake za ove dve vrste boze-operatora

$$\hat{b}_1 = \hat{B}_K \qquad \hat{b}_2 = \hat{a}_K$$

EKSITONSKI FOTONSKI

pa

$${}_2\hat{H}_{HARM.} = \sum_K \Big[\sum_{ss'=1}^{2} M_{ss'} \hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'} + \frac{1}{2} \sum_{ss'=1}^{+2} N_{ss'} \left(\hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'}^+ + \hat{b}_{s'} \hat{b}_s \right) \qquad 3.15.$$

što je indentično sa jednačinom 3.14., ako pogodno izaberemo $M_{ss'}, N_{ss'}$ tj.

$$M_{11} = E_K^e \qquad M_{22} = E_K^F \qquad M_{12} = M_{21} = T_K$$

$$N_{11} = 0 \qquad N_{22} = 0 \qquad N_{12} = N_{21} = T_K$$

Ovaj hamiltonijan bi mogli dijagonalizovati na isti način kao i ranije, ali bi nas to odvelo do rešavanja sistema od osam jednačina. Zato ćemo iskoristiti Hajzembergove jednačine kretanja i izvršiti dijagonalizaciju po Tjablikovu, koja direktno daje zakon disperzije polaritona.

Hajzenbergova jednačina kretanja /ekvivalent Šredingerovoj jednačini/ za ma koji ermitski operator neke fizičke veličine glasi

$$i\hbar \frac{d\hat{F}}{dt} = [\hat{F}, \hat{H}]$$

kod nas $i\dot{\hat{b}}_s = [\hat{b}_s, \hat{H}]$ 3.16.

u sistemu $\hbar = 1$. Potražimo komutatore $[\hat{b}_\lambda, \hat{H}] = ?$

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'}] = \hat{b}_{s'} \delta_{\lambda s} + \hat{b}_s^+ \hat{b}_\lambda \hat{b}_{s'} - \hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'} \hat{b}_\lambda = \hat{b}_{s'} \delta_{\lambda s}$$

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'}^+] = \hat{b}_{s'}^+ \delta_{\lambda s} + \hat{b}_s^+ \hat{b}_\lambda \hat{b}_{s'}^+ - \hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'}^+ \hat{b}_\lambda = \hat{b}_{s'}^+ \delta_{\lambda s} + \hat{b}_s^+ \delta_{\lambda s'} +$$

$$+ \hat{b}_{s'}^+ \hat{b}_{\lambda s'}^+ \hat{b}_\lambda - \hat{b}_s^+ \hat{b}_{s'}^+ \hat{b}_\lambda = \hat{b}_{s'}^+ \delta_{\lambda s} + \hat{b}_s^+ \delta_{\lambda s'}$$

$$\hat{b}_\lambda \hat{b}_{s'} \hat{b}_s - \hat{b}_{s'} \hat{b}_s \hat{b}_\lambda = 0 \qquad [\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{s'} \hat{b}_s] = 0$$

$$[\hat{b}_\lambda, {}_2\hat{H}_{HAR}] = \sum_{ss'} M_{ss'} [\hat{b}_\lambda, \hat{b}^+_s \hat{b}_{s'}] + \frac{1}{2} \sum_{ss'} W_{ss'} \Big\{ [\hat{b}_\lambda, \hat{b}^+_s \hat{b}^+_{s'}] +$$
$$+ [\hat{b}_\lambda, \underbrace{\hat{b}_s \hat{b}_{s'}}_{0}] \Big\}$$

Primenimo ove komutatore na ${}_2\hat{H}_{HAR}$ i dobijemo

$$[\hat{b}_s, {}_2\hat{H}_{HAR}] = \sum_{s'} \left(M_{ss'} \hat{b}_{s'} + W_{ss'} \hat{b}^+_{s'} \right) \tag{3.17.}$$

Time smo uveli naš hamiltonijan u Hajzenbergove jednačine kretanja. Pošto $\langle \hat{b}_s \rangle$ nije konstanta kretanja, nije ni $[\hat{b}_s \hat{H}] = 0$. Zbog toga uvodimo smenu boze-operatora ekvivalentnu smeni 1.19., s tim što ova mora sadržati kako operatore "eksitona", tako i operatore "fotona"

$$\hat{b}_s(t) = \sum_{\alpha=1}^{2} \left[U_{s\alpha} \hat{S}_\alpha e^{-iEt} + V^*_{s\alpha} \hat{S}^+_\alpha e^{iEt} \right]$$

$$\hat{b}_{s'}(t) = \sum_{\alpha=1}^{2} \left[U_{s'\alpha} \hat{S}_\alpha e^{-iEt} + V^*_{s'\alpha} \hat{S}^+_\alpha e^{iEt} \right] \tag{3.18.}$$

ustvari boze-operatori $\hat{S}_\alpha$, $\hat{S}^+_\alpha$ su polaritonski operatori. Ukoliko njih smenimo u Hajzenbergovu jednačinu 3.16., E će biti energija polaritona. Diferenciranjem 3.18. po vremenu dobijamo

$$i\dot{\hat{b}}_s = \sum_{\alpha=1}^{2} E \left[U_{s\alpha} \hat{S}_\alpha e^{-iEt} - V^*_{s\alpha} \hat{S}^+_\alpha e^{iEt} \right]$$

a to je drugi deo relacije 3.16., koju sada možemo napisati u obliku

$$\sum_{\alpha=1}^{2} E \left[U_{s\alpha} \hat{S}_\alpha e^{-iEt} - V^*_{s\alpha} \hat{S}^+_\alpha e^{iEt} \right] = \sum_{\alpha=1}^{2} \Big[\sum_{s'} (M_{ss'} U_{s'\alpha} + W_{ss'} V_{s'\alpha}) \Big] \hat{S}_\alpha e^{-iEt}$$
$$+ \sum_{\alpha=1}^{2} \Big[\sum_{s'} (M_{ss'} V^*_{s'\alpha} + W_{ss'} U^*_{s'\alpha} \Big] \hat{S}^+_\alpha e^{iEt}$$

Izjednačavanjem koeficijenata, uz odgovarajuće, operatore dobijamo

$$E U_{s\alpha} = \sum_{s'=1}^{2} \left(M_{ss'} U_{s'\alpha} + N_{ss'} V_{s'\alpha} \right)$$

$$-E V_{s\alpha}^{*} = \sum_{s'=1}^{2} \left(M_{ss'} V_{s'\alpha}^{*} + N_{ss'} U_{s'\alpha}^{*} \right)$$

što, s obzirom na realnost energije E, kao i realnost transformacionih funkcija $U_{s\alpha}$ i $V_{s\alpha}$ / $U_{s\alpha} = U_{s\alpha}^{*}$; $V_{s\alpha} = V_{s\alpha}^{*}$; $M_{ss'} = M_{ss'}^{*}$; $N_{ss'} = N_{ss'}^{*}$ /,

Konačno GLASI:

$$E U_{s\alpha} = \sum_{s'=1}^{2} \left(M_{ss'} U_{s'\alpha} + N_{ss'} V_{s'\alpha} \right)$$

$$-E V_{s\alpha} = \sum_{s'=1}^{2} \left(M_{ss'} V_{s'\alpha} + N_{ss'} U_{s'\alpha} \right) \qquad 3.19.$$

što u razvijenom obliku glasi

$$S=1 \qquad E U_{1\alpha} = M_{11} U_{1\alpha} + M_{12} U_{2\alpha} + N_{11} V_{1\alpha} + N_{12} V_{2\alpha}$$

$$- E V_{1\alpha} = M_{11} V_{1\alpha} + M_{12} V_{2\alpha} + N_{11} U_{1\alpha} + N_{12} U_{2\alpha}$$

$$S=2 \qquad E U_{2\alpha} = M_{21} U_{1\alpha} + M_{22} U_{2\alpha} + N_{21} V_{1\alpha} + N_{22} V_{2\alpha}$$

$$- E V_{2\alpha} = M_{21} V_{1\alpha} + M_{22} V_{2\alpha} + N_{21} U_{1\alpha} + N_{22} U_{2\alpha}$$

radi jednostavnosti pišimo dalje:

$$X = U_{1\alpha} \qquad Y = U_{2\alpha} \qquad Z = V_{1\alpha} \qquad W = V_{2\alpha}$$

zatim

$$M_{11} = A \qquad M_{22} = B \qquad N_{11} = N_{22} = 0 \qquad 3.20.$$

$$M_{12} = M_{21} = N_{12} = N_{21} = T_K = T$$

te, posle sredjivanja sistema 3.19., sledi:

$$
\begin{aligned}
&(E-A)X - TY - OZ - TW = 0\\
&-TX + (E-B)Y - TZ - OW = 0\\
&OX + TY + (E+A)Z + TW = 0\\
&TX + OY + TZ + (E+B)W = 0
\end{aligned}
\qquad 3.21.
$$

da bi ovaj sistem imao rešenja po x,y,z i w, različita od nule, moramo determinantu izjednačiti sa 0-om. tj.:

$$
\begin{vmatrix}
(E-A) & -T & O & -T\\
-T & (E-B) & -T & O\\
O & T & (E+A) & T\\
T & O & T & (E+B)
\end{vmatrix} = 0
$$

čije je rešenje

$$E^4 - (A^2+B^2)E^2 + (A^2B^2 - 4ABT^2) = 0$$

Snizimo red smenom $E^2 = H$ te imamo

$$H_{1,2} = \frac{A^2+B^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{A^2-B^2}{2}\right) + 4ABT^2} \qquad 3.22.$$

odnosno

$$E_{1,2,3,4} = \pm\sqrt{\frac{A^2+B^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{A^2-B^2}{2}\right)^2 + 4ABT^2}} = \mathcal{E}_\alpha$$

Pošto energija mora biti pozitivna veličina dobijamo kao konačno rešenje zakon disperzije polaritona /3.23./. Očigledno, pojavile su se dve vrednosti energije za svaki talasni vektor $\vec{K}$, / A ≠ B i T /

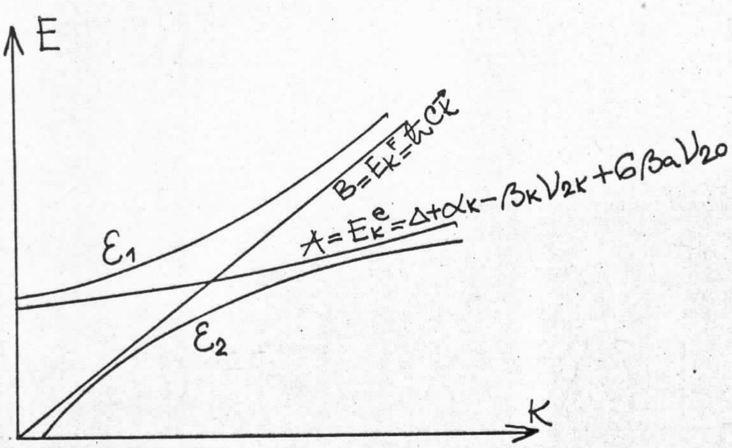
su takodje funkcije talasnog vektora.

$$\mathcal{E}_1 = \sqrt{\frac{A_K^2+B_K^2}{2} + \sqrt{\left(\frac{A_K^2-B_K^2}{2}\right) + 4A_K B_K T_K^2}} = E_1 \qquad 3.23.$$

$$\mathcal{E}_2 = \sqrt{\frac{A_K^2+B_K^2}{2} - \sqrt{\left(\frac{A_K^2-B_K^2}{2}\right)^2 + 4A_K B_K T_K^2}} = E_2$$

Dakle, energija polaritona se cepa na dve grane što se može shvatiti kao pozitivna, odnosno, negativna interferencija fotonskog i eksitonskog talasa,

Grafički prikaz zakona disperzije.



II. § 4. Korektan polaritonski spektar

Videli smo da korišćenje Hajzenbergovih jednačina kretanja omogućava nalaženje energije eksitona i bez poznavanja analitičkog izraza transformacionih funkcija $U_{s\alpha}$ i $V_{s\alpha}$ u izrazu 3.18.. Ipak, da bi pokazali da je hamiltonijan moguće dijagonalizovati istim transformacijama 3.18. stavimo da je $t = 0$ i [ako] izvedemo dopunske uslove koje moraju zadovoljavati transformacione funkcije. To su uslovi kanoničnosti transformacionih funkcija i mogu se izvesti iz komutatora $[\hat{b}_s, \hat{b}^+_s]$ Transformacije sada glase:

$$\hat{b}_s = \sum_{\alpha=1}^{1} \left(U_{s\alpha} \hat{S}_\alpha + V^*_{s\alpha} \hat{S}^+_\alpha \right)$$

$$\hat{b}^+_{s'} = \sum_{\alpha'=1}^{2} \left(U^*_{s'\alpha'} \hat{S}^+_{\alpha'} + V_{s'\alpha'} \hat{S}_{\alpha'} \right) \qquad 4.1.$$

Traženi uslovi se lako dobiju zamenom u pomenutom komutatoru i to su

$$\delta_{ss'} = \sum_\alpha \left(U_{s\alpha} U^*_{s'\alpha} - V^*_{s\alpha} V_{s'\alpha} \right)$$

$$0 = \sum_\alpha \left(U_{s\alpha} V^*_{s'\alpha} - V^*_{s\alpha} U_{s'\alpha} \right) \qquad 4.2.$$

$$0 = \sum_\alpha \left(U^*_{s\alpha} V_{s'\alpha} - V_{s\alpha} U_{s'\alpha} \right)$$

Prost račun pokazuje da, ako važe ovi uslovi, postoji inverzna transformacija operatora $\hat{S}_\alpha$ u $\hat{b}_s$ čime je ispunjen uslov kanoničnosti. Ovi uslovi omogućavaju i rešavanje sistema 3.21. po transformacionim funkcijama.

Na taj način, odredjeni izrazi za smenu operatora $\hat{b}_s$ u operator $\hat{S}$ ako se primene na harmonijski hamiltonijan $_2\hat{H}_{HAR.}$ on postaje ermitski. Ovo je tzv. dijagonalizacija po Tjablikovu.

Dakle, potražimo sada naše funkcije $U_{s\alpha}$ i $V_{s\alpha}$. Iz prvog uslova 4.2. dobijamo uslov normiranja oblika:

$$U_{s\alpha}^2 - V_{s\alpha}^2 = 1 \qquad 4.3.$$

Uvedemo li oznake

$$\rho_1 = \frac{X}{W} \quad \rho_2 = \frac{Y}{W} \quad \rho_3 = \frac{Z}{W}$$
$$\rho_1 = \frac{U_{1\alpha}}{V_{2\alpha}} \quad \rho_2 = \frac{U_{2\alpha}}{V_{2\alpha}} \quad \rho_3 = \frac{V_{1\alpha}}{V_{2\alpha}} \qquad 4.4.$$

i ako razvijemo 4.3. u indeksu s /s=1, s=2/, sledi:

$$(E-A)\rho_1 - C\rho_2 - C = 0$$
$$-C\rho_1 + (E-B)\rho_2 - C\rho_3 = 0$$
$$C\rho_2 + (E+A)\rho_3 + C = 0 \qquad 4.5$$
$$C\rho_1 + C\rho_2 + (E+B) = 0$$

GDE JE $E = \mathcal{E}_\alpha \quad \alpha = 1,2$

$$U_{1\alpha}^2 + U_{2\alpha}^2 - V_{1\alpha}^2 - V_{2\alpha}^2 = 1 \qquad 4.6.$$

gde je $C = T\kappa$.

Rešenja sistema 4.5. su

$$\frac{U_{1\alpha}}{V_{2\alpha}} = C\,\frac{\left[\left(\frac{\mathcal{E}_\alpha - B}{\mathcal{E}_\alpha + B}\right) - 1\right]}{\frac{\mathcal{E}_\alpha - B}{\mathcal{E}_\alpha + B}(\mathcal{E}_\alpha - A)}\ ; \quad \frac{U_{2\alpha}}{V_{2\alpha}} = -\frac{\mathcal{E}_\alpha + B}{\mathcal{E}_\alpha - B}$$

$$\frac{V_{1\alpha}}{V_{2\alpha}} = C\,\frac{\frac{\mathcal{E}_\alpha - A}{\mathcal{E}_\alpha + A}\left[1 - \frac{\mathcal{E}_\alpha - B}{\mathcal{E}_\alpha + B}\right]}{\frac{\mathcal{E}_\alpha - B}{\mathcal{E}_\alpha + B}(\mathcal{E}_\alpha - A)}\ ; \quad \left(\frac{U_{1\alpha}}{V_{2\alpha}}\right)^2 + \left(\frac{U_{2\alpha}}{V_{2\alpha}}\right)^2 - \left(\frac{V_{1\alpha}}{V_{2\alpha}}\right)^2 - 1 = \frac{1}{V_{2\alpha}} \qquad 4.7.$$

Algebarska rešenja dobijenog sistma jednačina daju vrlo komplikovane izraze za funkcije $U_{S\alpha}$ i $V_{S\alpha}$. Zato ćemo se, u daljem razmatranju ograničiti na oblast rezonancije u kojoj su $E^E \approx E^F$

$$A \approx B \gg T_K \qquad 4.8.$$

pa dodavanjem malog parametra T_K^2 u polaritonske energije dobijamo približno:

$$\mathcal{E}_1 \cong A+T \qquad \mathcal{E}_2 = \sqrt{A^2-2AT+T^2} = A-T \qquad 4.9.$$
$$\alpha=1 \qquad\qquad \alpha=2$$

tako izrazi 4.7. prelaze u

$$\frac{U_{1\alpha}}{V_{2\alpha}} = -T\,\frac{2A}{(\mathcal{E}_\alpha-A)^2} \qquad \frac{U_{2\alpha}}{V_{2\alpha}} = -\left(\frac{\mathcal{E}_\alpha+A}{\mathcal{E}_\alpha-A}\right)$$

$$\frac{V_{1\alpha}}{V_{2\alpha}} = T\,\frac{\left[1-\frac{\mathcal{E}_\alpha-A}{\mathcal{E}_\alpha+A}\right]}{\mathcal{E}_\alpha-A} \qquad 4.10.$$

Ako izvršimo zamene indeksa alfa dajući im konkretne vrednosti 1,2 i rešimo sistem 4.10. aprosimaktivno, u oba slučaja, zadržavajući se na kvadratnim članovima u uslovima normiranja, dobijamo kao približna rešenja transformacione funkcije $U_{S\alpha}$ i $V_{S\alpha}$:

$$\alpha=1 \qquad\qquad \alpha=2$$

$$U_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{1}{2}\delta\right) \qquad U_{12} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)$$

$$U_{21} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\delta\right) \qquad U_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)$$

$$V_{11} = \frac{\delta}{\sqrt{2}} \qquad V_{21} = -\frac{\delta}{\sqrt{2}} \qquad 4.11.$$

$$V_{21} = \frac{\delta}{\sqrt{2}} \qquad V_{22} = \frac{\delta}{\sqrt{2}} \qquad \delta = \frac{T}{2A} = \frac{T_K}{2E_K^e}$$

Razvojem 4.1. po svim indeksima dobijamo

$$\hat{b}_1^+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_1^+ - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_2^+ + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-1} - \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-2}$$

$$\hat{b}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_2 + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-1}^+ - \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-2}^+ \qquad 4.12.$$

$$\hat{b}_2^+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_1^+ + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_2^+ + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-1} + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-2}$$

$$\hat{b}_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_2 + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-1}^+ + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-2}^+$$

i još

$$\hat{b}_{-2}^+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_{-1}^+ + \frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_{-2}^+ + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_1 + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_2$$

$$\hat{b}_{-2} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_{-1} + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\hat{S}_{-2} + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_1^+ + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\hat{S}_2^+$$

indeks k se podrazumeva kod svakog operatora

Ako zamenimo 4.12. u razvijeni oblik jednačine 3.15. koji glasi:

$${}_2\hat{H}_{HAR.} = \sum_K \left[A\left(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2\right) + T\left(\hat{b}_1^+\hat{b}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_{-2}^+ + \hat{b}_{-2}\hat{b}_1\right)\right] \qquad 4.13.$$

i sredjivanjem koeficienata uz operatore $\hat{S}_\alpha$ i $\hat{S}_\alpha^+$/smatrajući da je hamiltonijan dijagonalan sa tačnošću do δ^2/ dobijamo

$${}_2\hat{H}_{HAR.} = \sum_K \underset{\text{IDE U } \hat{H}_0}{\left(2\delta^2 - 2\delta\right)} + \sum_K \left\{A\left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)^2 + \frac{\delta^2}{2} + \frac{\delta^2}{4}\right] + \right.$$

$$\left. + T\left[\frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta^2}{4}\right) + \frac{\delta^2}{2} + \frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta^2}{4}\right) + \frac{\delta^2}{2} - 4\frac{\delta}{2}\right]\right\}\hat{S}_1^+\hat{S}_1 +$$

$$+ \sum_K \left\{A\left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{\delta}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta}{2}\right)^2 + \frac{\delta^2}{2} + \frac{\delta^2}{2}\right] + T\left[-\frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta^2}{4}\right) - \frac{\delta^2}{2} - \frac{1}{2}\left(1-\frac{\delta^2}{4}\right) - \frac{\delta^2}{2} - \frac{4\delta}{2}\right]\right\}\hat{S}_2^+\hat{S}_2$$

odakle sledi

$$\mathcal{E}_1 = A + T - \frac{11}{8}\left(\frac{T^2}{2A}\right) \; ; \; \mathcal{E}_2 = A - T - \frac{11}{8}\left(\frac{T^2}{2A}\right) \qquad 4.14.$$

Ovo je, u stvari, još uvek rezultat koji daje metod P.D.K. s tim što važi u oblasti rezonancije.

U jednačini 3.14. nema anharmonijskog dela hamiltonijana-$_4\hat{\tilde{H}}_{INT}$ kao ni anharmonijskog dela eksitonskog hamiltonijana-$\hat{H}_4^o$. Sada ćemo pokazati da se ovi delovi ne mogu u potpunosti zanemariti. Možemo napisati da je

$$\hat{H}_{HARM.} = \hat{H}_{POLA.} = \hat{H}_{EKS} + \hat{H}_{FOT} + {}_2\hat{\tilde{H}}_{INT} + {}_4\hat{\tilde{H}}_{INT} + \hat{H}_4^o \qquad 4.15.$$

$$\hat{H}^{POP.}_{HARM.} = {}_2\hat{H}_{HAR.} + {}_4\hat{H}_{AHAR.} \; ; \; {}_4\hat{H}_{AHAR.} = \hat{H}_4^o + {}_4\hat{\tilde{H}}_{INT.}$$

Pogodnim presumiranjem izraz $_4\hat{\tilde{H}}_{INT}$ možemo prikazati sa

$$\begin{aligned} {}_4\hat{\tilde{H}}_{INT.} = &-\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} T_{K_4}\left[\hat{B}^+_{K_1}\hat{B}^+_{K_2}\hat{B}_{K_3}\hat{a}_{K_4} + \hat{B}^+_{K_1}\hat{a}^+_{K_2}\hat{B}_{K_3}\hat{B}_{K_4}\right] - \\ &-\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} T_{K_3}\left[\hat{B}^+_{K_1}\hat{B}^+_{K_2}\hat{a}^+_{K_3}\hat{B}_{K_6} + \hat{B}^+_{K_6}\hat{a}_{K_3}\hat{B}_{K_2}\hat{B}_{K_1}\right] \end{aligned} \qquad 4.16.$$

Izvršimo prelaz u ovoj jednačini na eksitonske operatore pomoću 2.7. može se pokazati da komutiranjem ne dobijamo operatore drugog reda, te ćemo zadržati samo eksitonske operatore proporcionalne jedinici sobzirom da $_4\hat{\tilde{H}}_{INT}$ figuriše već mala veličina T_{K_4}.

GDE SU $K_4 = K_1 + K_2 - K_3$; $K_6 = K_1 + K_2 + K_3$

pa je

$$
{}_4\hat{H}_{ANHAR} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{k_1k_2k_3} \hat{C}^+_{k_1}\hat{C}^+_{k_2}\hat{C}_{k_3}\hat{C}_{k_4} -
$$

$$
-\frac{1}{N}\sum_{k_1k_2k_3} T_{k_3}\left(\hat{C}^+_{k_1}\hat{C}^+_{k_2}\hat{a}^+_{k_3}\hat{C}_{k_6} + \hat{C}^+_{k_6}\hat{a}_{k_3}\hat{C}_{k_2}\hat{C}_{k_1}\right) \qquad 4.17.
$$

ili ako izvršimo smenu $\hat{C}=\hat{b}_1$ $\quad \hat{a}=\hat{b}_2$

$$
{}_4\hat{H}_{ANHAR.} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{k_1k_2k_3} {}^{k_1}\hat{b}^+_1\,{}^{k_2}\hat{b}^+_1\,{}^{k_3}\hat{b}_1\,{}^{k_4}\hat{b}_1 -
$$

$$
-\frac{1}{N}\sum_{k_1k_2k_3} T_{k_3}\left({}^{k_1}\hat{b}^+_1\,{}^{k_2}\hat{b}^+_1\,{}^{k_3}\hat{b}^+_2\,{}^{k_6}\hat{b}_1 + {}^{k_6}\hat{b}^+_1\,{}^{k_3}\hat{b}_2\,{}^{k_2}\hat{b}_1\,{}^{k_1}\hat{b}_1\right) \qquad 4.18.
$$

Ovde ćemo primeniti transformacije 4.12. s tim što sada moramo voditi računa o talasnim vektorima jer su oni različiti.

$$
{}^{k_1}\hat{b}^+_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta_k}{2}\right)^1\hat{S}^+_{k_1} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta_{k_1}}{2}\right)^2\hat{S}^+_{k_1} + \frac{\delta_{k_1}^{\;1}}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-k_1} - \frac{\delta_{k_1}^{\;2}}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-k_1}
$$

$$
{}^{k_2}\hat{b}^+_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta_{k_2}}{2}\right)^1\hat{S}^+_{k_2} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta_{k_2}}{2}\right)^2\hat{S}^+_{k_2} + \frac{\delta_{k_2}^{\;1}}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-k_2} - \frac{\delta_{k_2}^{\;2}}{\sqrt{2}}\hat{S}_{-k_2}
$$

$$
{}^{k_3}\hat{b}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta_{k_3}}{2}\right)^1\hat{S}_{k_3} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta_{k_3}}{2}\right)^2\hat{S}_{k_3} + \frac{\delta_{k_3}^{\;1}}{\sqrt{2}}\hat{S}^+_{-k_3} - \frac{\delta_{k_3}^{\;2}}{\sqrt{2}}\hat{S}^+_{-k_3}
$$

$$
{}^{k_4}\hat{b}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\delta_{k_4}}{2}\right)^1\hat{S}_{k_4} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\delta_{k_4}}{2}\right)^2\hat{S}_{k_4} + \frac{\delta_{k_4}^{\;1}}{\sqrt{2}}\hat{S}^+_{-k_4} - \frac{\delta_{k_4}^{\;2}}{\sqrt{2}}\hat{S}^+_{-k_4}
$$

čiji produkt daje posle odbacivanja malih parametara višeg od drugog reda i odbacivanjem operatora četvrtog reda :

$$ {}^{k_1}\hat{b}_1^{+}\,{}^{k_2}\hat{b}_2^{+}\,{}^{k_3}\hat{b}_1\,{}^{k_4}\hat{b}_1 = 2\delta_{k_2}^{2}\left[{}^1\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^1\hat{S}_{k_1} + {}^2\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^2\hat{S}_{k_1} + {}^1\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^2\hat{S}_{k_1} + {}^2\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^1\hat{S}_{k_1}\right] + $$

$$ + \frac{1}{4}\delta_{k_3}^{2}\left[\left({}^1\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^1\hat{S}^{+}_{-k_1} + {}^1\hat{S}_{-k_1}\,{}^1\hat{S}_{+k_1}\right) + \left({}^2\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^2\hat{S}^{+}_{-k_1} + {}^2\hat{S}_{-k_1}\,{}^2\hat{S}_{k_1}\right)\right] + $$

$$ + \frac{1}{4}\delta_{k_3}^{2}\left[\left({}^1\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^2\hat{S}^{+}_{-k_1} + {}^2\hat{S}_{-k_1}\,{}^1\hat{S}_{k_1}\right) + \left({}^2\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^1\hat{S}^{+}_{-k_1} + {}^1\hat{S}_{-k_1}\,{}^2\hat{S}_{k_1}\right)\right] $$

$$ \delta_{k_3} = \frac{T_{k_3}}{2A_{k_3}} $$

Sličnim postupkom sa operatorima u drugom članu jednačine 4.18. /u kome zadržavamo samo male parametre prvog reda, jer je T_k već malo/ i sredjivanjem koeficijenata uz iste operatore dobijamo ${}_4\hat{\tilde{H}}_{IWT}$

$$ {}_4\hat{\tilde{H}}_{IWT} = -\frac{1}{N}\sum_{k_1k_2k_3}\left[T_{k_3}\left(\hat{c}^{+}_{k_1}\,\hat{c}^{+}_{k_2}\,\hat{a}^{+}_{k_3}\,\hat{c}_{k_6}\right) + \right. $$

$$ \left. + T_{k_3}\left(\hat{c}^{+}_{k_6}\,\hat{a}_{k_3}\,\hat{c}_{k_2}\,\hat{c}_{k_1}\right)\right] = $$

$$ = 2T_{k_2}\delta_{k_2}\left[{}^1\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^1\hat{S}_{k_1} + {}^2\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^2\hat{S}_{k_1} + {}^1\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^2\hat{S}_{k_1} + {}^2\hat{S}^{+}_{k_1}\,{}^1\hat{S}_{k_1}\right] $$

DAKLE: $\quad K_3 \to \ell \quad K_2 \to \ell \quad K_1 \to K$

$$
\begin{aligned}
{}^{2}_{4}\hat{H}_{ANHAR.} = & -\frac{1}{N}\sum_{\ell K}\left[2\Delta\delta_\ell^2 + 2T_\ell\delta_\ell\right]\hat{S}^+_{1K}\hat{S}_{1K} \\
& -\frac{1}{N}\sum_{\ell K}\left[2\Delta\delta_\ell^2 + 2T_\ell\delta_\ell\right]\hat{S}^+_{2K}\hat{S}_{2K} - \\
& -\frac{1}{N}\sum_{\ell K}\left[2\Delta\delta_\ell^2 + 2T_\ell\delta_\ell\right]\hat{S}^+_{1K}\hat{S}_{2K} - \\
& -\frac{1}{N}\sum_{\ell K}\left[2\Delta\delta_\ell^2 + 2T_\ell\delta_\ell\right]\hat{S}^+_{2K}\hat{S}_{1K} - \\
& -\frac{1}{N}\cdot\frac{1}{2}\sum_{\ell K}\frac{1}{2}\delta_\ell^2\left[\hat{S}^+_{1K}\hat{S}^+_{1,-K} + \hat{S}_{1,-K}\hat{S}_{1K}\right] - \qquad 4.19. \\
& -\frac{1}{N}\cdot\frac{1}{2}\sum_{\ell K}\frac{1}{2}\delta_\ell^2\left[\hat{S}^+_{2K}\hat{S}^+_{2,-K} + \hat{S}_{2,-K}\hat{S}_{2K}\right] - \\
& -\frac{1}{N}\cdot\frac{1}{2}\sum_{\ell K}\frac{1}{2}\delta_\ell^2\left[\hat{S}^+_{1K}\hat{S}^+_{2,-K} + \hat{S}_{2,-K}\hat{S}_{1K}\right] - \\
& -\frac{1}{N}\frac{1}{2}\sum_{\ell K}\frac{1}{2}\delta_\ell^2\left[\hat{S}^+_{2K}\hat{S}^+_{1,-K} + \hat{S}_{1,-K}\hat{S}_{2K}\right]
\end{aligned}
$$

Izvršimo smene 4.2o.

$$T_0 = -\frac{1}{N}\sum_{\mathcal{L}} \frac{3}{2} T_{\mathcal{L}} \delta_{\mathcal{L}}$$

$$T_{\mathcal{L}}' = -\frac{1}{N}\sum_{\mathcal{L}} \frac{1}{2}\frac{T_{\mathcal{L}}^2}{4A^2} = -\frac{1}{N}\sum_{\mathcal{L}} \frac{1}{2}\delta_{\mathcal{L}}^2 \qquad 4.2o.$$

u 4.19., sledi

$$\begin{aligned} {}^2_4\hat{H}_{AWH.} &= \sum_K T_0 \hat{S}^+_{1K}\hat{S}_{1K} + \sum_K T_0 \hat{S}^+_{2K}\hat{S}_{2K} + \\ &+ \sum_K T_0 \hat{S}^+_{1K}\hat{S}_{2K} + \sum_K T_0 \hat{S}^+_{2K}\hat{S}_{1K} + \\ &+ \frac{1}{2}\sum_K T_{\mathcal{L}}' \left[\hat{S}^+_{1K}\hat{S}^+_{1,-K} + \hat{S}_{1,-K}\hat{S}_{1K}\right] + \\ &+ \frac{1}{2}\sum_K T_{\mathcal{L}}' \left[\hat{S}^+_{2K}\hat{S}^+_{-2K} + \hat{S}_{-2K}\hat{S}_{2K}\right] + \\ &+ \frac{1}{2}\sum_K T_{\mathcal{L}}' \left[\hat{S}^+_{1K}\hat{S}^+_{-2K} + \hat{S}_{-2K}\hat{S}_{1K}\right] + \\ &+ \frac{1}{2}\sum_K T_{\mathcal{L}}' \left[\hat{S}^+_{2K}\hat{S}^+_{-1K} + \hat{S}_{-1K}\hat{S}_{2K}\right] \end{aligned} \qquad 4.21.$$

Ako bi napisali ${}_2\hat{H}_{HAR.}$ u razvijenom obliku sa polaritonskim operatorima smatrajući ga dijagonalizovanim , videli bi da se sabiranjem sa jednačinom 4.21. /i skupljanjem koeficijenata uz iste operatore/ (videli bi da se) popravljeni harmonijski hamiltonijan može predstaviti jednačinom istog oblika kao i jednačina 3.15. samo je sada

$$\hat{H}^{popr.}_{HAR.} = \sum_{K}\left[\sum_{ss'=1}^{2}\tilde{M}_{ss'}\hat{S}^{+}_{s}\hat{S}_{s'} + \frac{1}{2}\sum_{ss'=1}^{2}\tilde{N}_{ss'}\left(\hat{S}^{+}_{s}\hat{S}^{+}_{-s'} + \hat{S}_{-s'}\hat{S}_{s}\right)\right]$$

$$R = \tilde{M}_{11} = \mathcal{E}_{1K} + T_{0} = \tilde{A} \qquad Q = \tilde{M}_{12} = \tilde{M}_{21} = T_{0}$$

$$P = \tilde{M}_{22} = \mathcal{E}_{2K} + T_{0} \qquad Q = -\frac{1}{N}\sum_{\mathcal{L}}\frac{3}{2}T_{\mathcal{L}}\cdot\frac{T_{\mathcal{L}}}{2A_{\mathcal{L}}} \qquad 4.22.$$

$$D = \tilde{N}_{11} = \tilde{N}_{22} = \tilde{N}_{21} = \tilde{N}_{12} = T'_{\mathcal{L}}$$

ovaj hamiltonijan nije dijagonalan, ali ga možemo dijagonalizovati potpuno istim postupkom kao i pre. Na njega možemo primeniti i Hajzenbergove jednačine, te za njega važi 3.19. uz izmenu odgovarajućih funkcija. Jednačina 3.19. u razvijenom obliku izgleda ovako

$$S=1 \qquad \begin{aligned} E\tilde{U}_{1\alpha} &= \tilde{M}_{11}\tilde{U}_{1\alpha} + \tilde{M}_{12}\tilde{U}_{2\alpha} + \tilde{N}_{11}\tilde{V}_{1\alpha} + \tilde{N}_{12}\tilde{V}_{2\alpha} \\ -E\tilde{V}_{1\alpha} &= \tilde{M}_{11}\tilde{V}_{1\alpha} + \tilde{M}_{12}\tilde{V}_{2\alpha} + \tilde{N}_{11}\tilde{U}_{1\alpha} + \tilde{N}_{12}\tilde{U}_{2\alpha} \end{aligned}$$

$$S=2 \qquad \begin{aligned} E\tilde{U}_{2\alpha} &= \tilde{M}_{21}\tilde{U}_{1\alpha} + \tilde{M}_{22}\tilde{U}_{2\alpha} + \tilde{N}_{21}\tilde{V}_{1\alpha} + \tilde{N}_{22}\tilde{V}_{2\alpha} \\ -E\tilde{V}_{2\alpha} &= \tilde{M}_{21}\tilde{V}_{1\alpha} + \tilde{M}_{22}\tilde{V}_{2\alpha} + \tilde{N}_{21}\tilde{U}_{1\alpha} + \tilde{N}_{22}\tilde{U}_{2\alpha} \end{aligned}$$

tj. $X = \tilde{U}_{1\alpha} \quad Y = \tilde{U}_{2\alpha} \quad Z = \tilde{V}_{1\alpha} \quad W = \tilde{V}_{2\alpha}$

$$\begin{aligned} (E-R)X - QY - DZ - DW &= 0 \\ -QX + (E+P)Y - DZ - DW &= 0 \\ DX + DY + (E+R)Z + QW &= 0 \\ DX + DY + QZ + (E+P)W &= 0 \end{aligned}$$

čija determinanta mora biti jednaka nuli da bi x,y,z,w bili različiti od nule.

te posle kraćeg skređivanja determinanta glasi

$$\begin{vmatrix} E-R & -Q & -D & -D \\ -Q & (E-P) & -D & -D \\ D & D & (E+R) & Q \\ D & D & Q & (E+P) \end{vmatrix} = 0$$

ako je razvijemo dobijemo:

$$E^4+(4\cancelto{0}{D}^2-2\cancelto{0}{Q}^2-R^2-P^2)E^2+R^2P^2-2RPQ^2+$$

$$+\left[4RQ+4PQ-2RP-P^2-4Q^2-2P^2-R^2\right]\cancelto{0}{D}^2=0 \qquad 4.23.$$

S obzirom na 4.2o. i 4.22. D^2 je proporcionalno četvrtom stepenu malog parametra ove teorije, tj,

$$D^2 \propto \frac{T_{\mathcal{L}}^4}{4A^4} \longrightarrow 0 \quad \text{ČAK i} \quad R^2D^2 \propto \frac{T_{\mathcal{L}}^4}{4A^2} \longrightarrow 0$$

pa imamo

$$E^4-(R^2+P^2)E^2+(R^2P^2-2RPQ^2)=0$$

$$K=E^2 \qquad Q^2RP=RPT_0^2 \propto T_{\mathcal{L}}^4$$

$$K_{12}=\frac{R^2+P^2}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{R^2-P^2}{2}\right)^2+2RPT_0^2}$$

Konačno dobijamo popravljen zakon disperzije za polaritone:

$$\tilde{\mathcal{E}}_1 = \sqrt{\frac{R^2+P^2}{2} + \sqrt{\left(\frac{R^2-P^2}{2}\right) + 2RPT_0^2}}$$

4.24.

$$\tilde{\mathcal{E}}_2 = \sqrt{\frac{R^2+P^2}{2} - \sqrt{\left(\frac{R^2-P^2}{2}\right)^2 + 2RPT_0^2}}$$

ovde su

$$R = A_K + T_K - \frac{\pi}{8}\frac{T_K^2}{2A_K} + T_0 = R_K$$

$$P = A_K - T_K - \frac{\pi}{8}\frac{T_K^2}{2A_K} + T_0 = P_K$$

Na kraju, posle razvijanja oba korena u red, zakon disperzije 4.24. glasi

$$A_K = E_K^{EKS.}$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_1 = R + \frac{1}{4}\frac{T_0^2}{T_K} \quad ; \quad \tilde{\mathcal{E}}_2 = P - \frac{1}{4}\frac{T_0^2}{T_K}$$

- o -

Z A K L J U Č A K

U radu je ispitan spektar polaritona u harmonijskoj aproksimaciji u oblasti eksiton-foton rezonance. Mali parametar teorije je odnos konstante eksiton-foton, interakcije i energije eksitona /fotona/. Treba napomenuti da je pomenuti mali parametar zaista mali samo u onim slučajevima kada su vektor polarizacije fotona i vektor dipolnog momenta prelaza u molekulu približno ortogonalni i leže u istoj ravni. Kao što je poznato, ovakav slučaj se praktično realizuje u kristalima naftalina i čvrstog benzola.

Za pomenuti slučaj nadjene su korekcije polaritonskog spektra, koji se dobija primenom metode P.D.K. i konstatovano je da ove korekcije proširuju energetski gep izmedju dve polaritonske grane i istovremeno vrše paralelni pomeraj spektra ka nižim energijama.

L I T E R A T U R A

/1/ Я.И.ФРЕНКЕЛЬ Phys. Rev. 37,17 /1931/

/2/ Я.И.ФРЕНКЕЛЬ Phys. Rev. 37,1276 /1931/

/3/ Я.И.ФРЕНКЕЛЬ Sow. Phys. 9,158 /1936/

/4/ R.E.Peierls Ann. Phys. 13/5/,905/1932/

/5/ В.М.АГРАНОВИЧ ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ «НАУКА» МОСКВА /1968/

/6/ Р.НОКС ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ «МИР» МОСКВА /1966/

/7/ В.М.АГРАНОВИЧ ЖЭТФ 37,430/1959/

/8/ U. Fano Phys. Rev. 103,1202/1956/

/9/ J.J.Hopfield Phys. Rev. 112,1555/1958/

/10/ В.М.АГРАНОВИЧ,Б.С.ТОШИЋ ЖЭТФ 53,149/1967/

/11/ N.N.Bogolyubov Lectures in Quantum statistics,Kiev /1949/

/12/ S.V.Tyablikov МЕТОДИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ «НАУКА» МОСКВА/1965/

/13/ D.I.Lalović, B.S.Tošić, R.B.Žakula Phys. Rev. 178,1472 /1969/

/14/ B.S.Tošić Phys. Stat.Sol. 48 K129/1971/