UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET-GRUPA FIZIKA

DIPLOMSKI RAD

Tema: BIEKSITONI U SLOŽENIM KRISTALNIM STRUKTURAMA

DIMIĆ Š. SMILJA

Zahvaljujem se prof.Dr.Bratislavu Tošiću na pomoći ukazanoj pri izradi ovog rada.

SADRŽAJ:

UVOD

GLAVA I

Elementi teorije eksitona i bieskitona

§ 1 - Frenkelov eksiton . . . . str. 1

§ 2 - Frenkelov eksiton u kristalu sa dve podrešetke i davidovljevsko razdvajanje zona . . . . str. 12

§ 3 - Bieksiton u kristalu sa prostom rešetkom . . . . str. 20

GLAVA II

Bieksitoni u kristalu sa dve podrešetke

§ 1 - Formiranje opšte jednačine za dvočestičnu funkciju Grina . . . . str. 31

§ 2 - Polovi funkcije Grina za jednodimenzione strukture str. 38

§ 3 - Bieksitonske zone i davidovljevsko razdvajanje bieksitonskih zona . . . . str. 47

ZAKLJUČAK . . . . str. 53

Matematički dodatak

1 - Elementi teorije dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina . . . . str. 55

2 - Integralne jednačine sa separabilnim jezgrima . . . str. 59

LITERATURA

БИБЛИОТЕКА Природно-математичког факултета НОВИ САД

UVOD

Cilj ovog rada je da se ispitaju vezana stanja dva Frenkelova eksitona u molekularnom kristalu sa složenom kristalnom rešetkom. Do sada su bieksitoni bili teorijski analizirani u kristalima sa prostom podrešetkom,ali ako se uzme u obzir da praktično svi molekularni kristali imaju složene kristalne rešetke sastavljene od najmanje dve podreštke,onda je jasno da ispitivanje bieksitona u kristalima sa složenom strukturom ima veći praktični značaj.

U ovom radu mi ćemo se ograničiti na sistem sa dve podrešetke i analitičko rešenje za energije bieksitona tražiti za slučaj dve jednodimenzione strukture,koje se uzajamno prožimaju. Rešenje za višedimenzione strukture može se takodje naći ali samo uz upotrebu računara. Ne treba misliti da jednodimenzioni problem ima samo metodološki značaj,jer upravo u teoriji eksitona i ove strukture treba analizirati,pošto polimeri i mnoge biološke strukture koje su jednodimenzione pokazuju svojstva optičkog pobudjivanja.

Analiza koju ćemo izvršiti ima i čisto metodološki značaj pošto u kristalu sa više podrešetki prilikom analize vezanih stanja ne može direktno da se upotrebi metod koji se standardno koristi za proste rešetke. Radi se o tome da kod proste rešetke jednačine za funkcije Grina mogu da se formiraju u konfiguracionom prostoru pa da se posle njihove Furije transformacije rešenje problema traži kao pol Furije lika konfiguracione funkcije Grina. U slučaju dve podrešetke ovakav postupak doveo bi do greške u računu jer energije slobodnih eksitacija ne bi bile dobro definisane. Poznata je stvar da se u kristalu sa složenom strukturom dijagonalizacije hamiltonijana,koja nam daje ispravne energije slobodnih eksitacija vrši u dve etape. Prvo se vrši Furije transformacija koordinata- impuls a zatim se u impulsnom prostoru vrši još jedna dijagonalizacija po raznim tipovima operatora. Zbog toga stvarne funkcije Grina čiji će nam polovi davati energije bieksitona moraju biti izraženi preko onih operatora koji kreiraju i anihiliraju realne slobodne eksitacije sistema,a to su oni operatori u kojima je završena i druga etapa napred pomenute dijagonalizacije. Ovakav metod je korišćen u ovom radu .

GLAVA I

ELEMENTI TEORIJE EKSITONA I BIEKSITONA

§1 Frenkelov eksiton

§2 Frenekelov eksiton u kristalu sa dve podrešetke i davidovljevsko razdvajanje zona

§3 Bieksiton u kristalu sa prostom rešetkom

I. §. 1. Frenkelov eksiton

Prvu teoriju optičkih pobudjenja u kristalima dali su Frenkel i Pajerls. Ovaj tip optičkih pobudjenja koji se javlja u molekularnim kristalima naziva se Frenkelov eksiton ili ponekad kulonovski eksiton. Osim ovakvih eksitona postoje u poluprovodnicima eksitoni Vanije-Mot-a. Osnovna razlika izmedju ova dva tipa eksitona sastoji se u tome što kod eksitona Frenkela par elektron-šupljina indukovan upadnom svetlošću ostaje u samom molekulu,koji je pogodjen kvantom svetlosti, dok kod eksitona Vanije-Mot a svetlost izbacuje elektron u provodnu zonu ali tako da je on vezan kulonovskim silama privlačenja sa šupljinom,koja se stvorila u popunjenoj zoni. Dogod je sila kulonovskog privlačenja dovoljno jaka da drži na okupu elektron i šupljinu kao elektro neutralni kompleks-Motov eksiton- u poluprovodniku ne teče struja. Da bi se dobila struja treba nekim spoljašnjim poljem raskinuti vezu izmedju elektrona i šupljine i tada,kada se razgradi Motov eksiton u poluprovodniku počinje da teče struja.

Ovaj rad biće posvećen nekim pitanjima teorije Frenkelovih eksitona i zato ćemo u daljem izlaganju izložiti detaljnije teoriju ovih ementarnih eksitacija.

Kao što je već napomenuto Frenkelovi eksitoni se pojavljuju u molekluranim kristalima. Glavni predstavnici molekularnih kristala su antracen,naftalin, benzol u čvrstom stanju i plementi gasovi takodje u čvrstom stanju.

Osnovna karakteristika ovih kristala je da su im molekuli jako izraženi dipoli, da je stoga glavni tip interakcije izmedju molekula kristala takozvana dipol dipolna električna interakcija. Potencijal dipol dipolne interakcije ima sledeći oblik:

$$V_{\vec{n}\vec{m}} = e^2 \frac{\vec{R}^2_{\vec{n}\vec{m}} - 3(\vec{R}^2_{\vec{n}\vec{m}}\vec{r}_{\vec{n}})(\vec{R}_{\vec{n}\vec{m}}\vec{r}_{\vec{m}})}{|R_{\vec{n}\vec{m}}|^5} \qquad I\ 1.1$$

U poslednjem izrazu upotrebljene su sledeće oznake: e je naelektrisanje elektrona $\vec{n}$ i $\vec{m}$ su vektori kristalne rešetke, $\vec{r}_n$ i $\vec{r}_m$ su vektori dipola u čvorovima $\vec{n}$ i $\vec{m}$ a $\vec{R}_{\vec{n}\vec{m}} = \vec{n} - \vec{m}$

Upadna svetlost može da ekscitira molekul na dva načina: da dovede do promene stanja elektrona u molekulu i da dovede do promene stanja unutrašnjih vibracija u molekulu. Eksitoni koji nastaju usled promene stanja unutrašnjih molekularnih vibracija nazivaju se vibroni i ove dalje nećemo analizirati.

Prema tome predmet naših istraživanja biće eksitoni koji nastaju usled promene stanja elektronskog podsistemau molekularnom kristalu.

Sam nastanak eksitona kao kolektovne kristalne eksitacije može se slikovito pretstaviti na sledeći način. Pre osvetljavanja svi molekuli kristala nalaze se u osnovnom stanju,tj.u stanju najniže energije. Pretpostavimo da kvant scetlosti na jednom molekulu u kristalnoj rešetci preveden jedan od elektrona iz osnovnog u neko pobudjeno stanje. Pošto su molekuli u kristalu povezani,ostali molekuli reagovaće na ovo pobudjenje jednoga od njih,tj. zbog izmene matričnih elemenata interakcije u osnovnom i pobudjenom stanju ekscitiraće se i neki sledeći molekul. Ekscitacija se sa njega prenosim na njegovog suseda i tako dalje.

Posle izvesnog vremena veliki broj molekula u kristalu će biti ekscitiran. Ovaj talas pobudjenja čiji se izvor nalazi samo u jednom molekulu naziva se Frenkelov eksiton.

Ovde ćemo izložiti elementarnu teoriju Frenkelovih eksitona za kristal sa prostom rešetkom i uz pretpostavku da upadna svetlost izaziva elektronska pobudjenja samo jednog tipa.

Hamiltonijan molekularnog kristala može se predstaviti u sledećm obliku:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}\vec{m}} \qquad I\,1.2$$

gde je $H_{\vec{n}}$ hamiltonijan izolovanog molekula, a $V_{\vec{n}\vec{m}}$ operator dipol dipolne interakcije.

Pošto ćemo se dalje interesovati interakcijom elektronskog podsistema,hamiltonijan/I.1.2/ predstavićemo u reprezentaciji druge kvantizacije preko Fermi operatora kreacije i anihilacije elektrona na zadatom čvoru rešetke i u datom kvantnom stanju f .

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

U poslednjem izrazu indeksi f su simbolične oznake za kvantna stanja elektrona, operator $a^+_{\vec n f}$ predstavlja operator kreacije elektrona na čvoru $\vec n$ u stanju f, dok su $E_{\vec n f}$ i $V_{\vec n \vec m}(f_1 f_2 f_3 f_4)$ matrični elementi operatora $H_{\vec n}$ i $V_{\vec n \vec m}$ po svojstvenim funkcijama operatora $H_{\vec n}$ tj.

$$E_{\vec n f} = \int \varphi^*_{\vec n f}\, H_{\vec n}\, \varphi_{\vec n f}\, d\tau_{\vec n}$$

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

funkcije $\varphi_{\vec n f}$ su svojstvene funkcije $H_{\vec n}$ tj. rešenja problema:

$$H_{\vec n}\, \varphi_{\vec n f} = E_{\vec n f}\, \varphi_{\vec n f}$$

Osnovno stanje molekula označićemo indeksom 0.

Da bismo uprostili situaciju predpostavićemo da monohromatska svetlost, koja pada na kristal može da pobudjuje elektrone u samo jednom stanju, koje ćemo okarakterisati indeksom λ . Tada na svakom molekulu elektroni imaju na raspolaganju samo dva stanja. To su stanja sa indeksom a / osnovno stanje / i jedno pobudjeno stanje sa indeksom λ . Zbog Paulijevog principa sasvim je očigledno da uz gornju predpostavku na svakom molekulu mogu da se realizuju samo sledeća kvantno-mehanička stanja.

$$h_1 \equiv (|0.0\lambda>;|1.1\lambda>)$$

$$h_2 \equiv (|1.0\lambda>;|0.1\lambda>) \qquad I1.5$$

iz matematičkih, a više iz fizičkih razloga umesto elektronskih operatora a i a^+ zgodnije je uvesti kvazičestične operatore P^+ i P, koji se definišu na sledeći način:

$$P^+_{\vec n} = a^+_{n\lambda} a_{\vec n 0} \qquad P_{\vec n} = a_{\vec n 0} a_{\vec n \lambda} \qquad I1.6$$

Fizički smisao P je očigledan. Operator P^+ odgovara procesu u kome je nestao elektron u osnovnom stanju 0 i pojavio se u ekcitiranom stanju λ. Prema tome operator P kreira kvant ekcitovanja molekula pri čemu je energija ovog kvanta $E_\lambda - E_0$. Operator P odgovara procesu u kome je iščezao elektron u pobudjenom /ekcitovnom stanju /λ i kreira se u osnovnom stanju 0, pa prema tome operator P odgovara procesu uništenja kvanta ekcitovanja sa energijom $E_\lambda - E_0$.

Operatori P^+ i P indentički su jednaki 0 u podprostoru h_1, dok u podprostoru h_2 deluju na funkcije stanja na taj način što uvek daju funkcije iz tog istog podprostora.

Sam hamiltonijan I- 1.3 tako je formulisan da ostaje zatvoren u podprostoru h_2.

U prostoru h_2 očigledno važi relacija

$$\overset{+}{a}_{\vec n_0} a_{\vec n_0} + \overset{+}{a}_{\vec n\lambda} a_{\vec n\lambda} = 1$$

Na osnovu ove relacije i na osnovu komutacionih relacija za Fermi operatore

$$\{a_{\vec n f}, \overset{+}{a}_{\vec m f'}\} = \delta_{\vec n\vec m}\,\delta_{ff'} \quad ; \quad \overset{+}{a}_{\vec n f}\, a_{\vec n f} = 0 \text{ ili } 1 \qquad I\,1.8$$

$$\overset{+}{a}_{\vec n f}{}^2 = a_{\vec n f}^2 = 0 \qquad \{a_{\vec n f}, a_{\vec m f}\} = \{\overset{+}{a}_{\vec n f}, \overset{+}{a}_{\vec m f'}\} = 0$$

Nije teškopokazati da operatori $\overset{+}{P}$ i P zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[P_{\vec n}, P^{+}_{\vec m}] = (1 - 2P^{+}_{\vec n} P_{\vec n})\,\delta_{\vec n\vec m} \qquad P^{+2}_{\vec n} = P^{2}_{\vec n} = 0$$

$$I.\,1.9$$

$$[P^{+}_{\vec n} P^{+}_{\vec m}] = [P_{\vec n}, P_{\vec n}] = 0 \ ; \quad P^{+}_{\vec n} P_{\vec n} = 0 \text{ ili} ; \ P^{+}_{\vec n} P_{\vec n} = \overset{+}{a}_{\vec n\lambda}\, a_{n\lambda}$$

Operatori sa ovakvim komutacionim relacijama,koje pred stavljaju kombinaciju bozonskih i fermionskih komutacionih relacija,nazivaju se Pauli operatori.

U slučaju da kristal ima centar inverzije i da se taj centar inverzije poklapa sa centrom inverzije izolovanog molekula svi matrični elementi $V_{\vec n\vec m}(f_1 f_2 f_3 f_4)$, koji imaju neparan broj indeksa ravan je nuli,jednaki su nuli,iz razloga što hamiltonijan mora biti invarijantan u odnosu na trensformaciju $\vec r \to -\vec r$. Uzimajući ovo u obzir iz hamiltonijana

I- 1.3. Izdvojićemo članove u kojima je paran broj indeksa različit od nule i to po sledećoj šemi

f_1	f_2	f_3	f_4
0	0	0	0
λ	λ	0	0
λ	0	λ	0
λ	0	0	λ
0	λ	λ	0
0	λ	0	λ
0	0	λ	λ
λ	λ	λ	λ

Razvijajući hamiltonijan I 1.3 po ovoj šemi i koristeći formulu I 1.7 i I 1.9 dolazimo do hamiltonijana izraženog u kvazičestičnim Pauli operatorima.

$$H = H_0 + H_2 + H_2' + H_4 \qquad I\ 1.10$$

gde je :

$$H_0 = \sum_{\vec{n}} \left\{ E_{\vec{n}0} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0,0,0) \right\}$$

$$H_2 = \sum_{\vec{n}} \Delta P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}} \qquad I\ 1.11$$

$$H_2' = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} \left(P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}}^{+} + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \right)$$

$$H_4 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}}^{+} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}$$

Ovde su upotrebljene oznake:

$$\Delta = E_{\vec{n}\lambda} - E_{\vec{n}0} - \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0,00) + \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda,0;0\lambda) +$$
$$+ \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda,\lambda 0)$$

$$\alpha_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2}\left[V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,\lambda 0) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda\ 0\lambda)\right] \qquad I\ 1.12$$

$$\beta_{\vec{n}\vec{m}} = \left[V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda;00) + V_{\vec{n}\vec{m}}(00,\lambda\lambda)\right]$$

$$\gamma_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{1}{2}\left[V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda\lambda\lambda\lambda) + V_{\vec{n}\vec{m}}(00,00) - V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda 0,0\lambda) - V_{\vec{n}\vec{m}}(0\lambda;\lambda 0)\right]$$

Veličina Δ ne zavisi od indeksa čvora, zato što su svi molekuli kristala medjusobno indentični.

Da bi smo izvršili dalju analizu hamiltonijana I.1.11. odbacićemo član H_2' jer on daje male popravke energije eksitona, zahvaljujući činjenici da je veličina Δ reda 5 eV / energija upadne svetlosti / dok su matrični elementi V_{nm} reda veličine o,l-o,ol eV.

Prema tome efektivni hamiltonijan za dalju analizu uzećemo u obliku

$$H_{eff} = \sum_{\vec{n}} \Delta P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \qquad I\ 1.13$$

Metod približne druge kvantizacije, koja nam daje eksitonski spektar u harmoni skoj aproksimaciji, sastoji se u tome da se Pauli operatori iz I.1.13 zamene Boze operatorima $\overset{+}{B}$ i B po približnim formulama :

$$P^+_{\vec n} \cong B^+_{\vec n} \; ; \; P_{\vec n} \cong B_{\vec n} \; ; \; P^+_{\vec n} P_{\vec n} \cong B^+_{\vec n} B_{\vec n} \qquad I\ 1.14$$

i da se istovremeno iz hamiltonijana izbace članovi četvrtog reda po Boze operatorima. U ovoj aproksimaciji formula I.1.13 postaje :

$$H_{\text{ПДК}} = \sum_{\vec n} \Delta B^+_{\vec n} B_{\vec n} + \sum_{\vec n \vec m} \alpha_{\vec n \vec m} B^+_{\vec n} B_{\vec m} \qquad I\ 1.15$$

Ako izvršimo Furije transformaciju Boze operatora

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

U:

$$\sum_{\vec n} e^{i(\vec k_1 - \vec k_2)\vec n} = N \delta_{\vec k_1, \vec k_2}$$

nalazimo da je hamiltonijan našeg sistema u impulsnom prostoru:

$$H_{\text{ПДК}} = \sum_{\vec k} (\Delta + \alpha_{\vec k}) B^+_{\vec k} B_{\vec k} \qquad I\ 1.17$$

gde je:

$$\alpha_{\vec k} = \sum_{\vec m} \alpha_{\vec n \vec m}\, e^{\pm i \vec k (\vec n - \vec m)} \qquad I\ 1.18$$

Zakon disperzije za eksitone u harmoničnoj aproksimaciji dobijamo po formuli:

$$E_e |\vec k| = \frac{\partial H_{\text{ПДК}}}{\partial B^+_{\vec k} B_{\vec n}} = \Delta + \alpha_{\vec k} \qquad I\ 1.19$$

Ako se ograničimo prostom kubnom strukturom/najbližih šest suseda/ aproksimacijom najbližih suseda i aproksimacijommalih talasnih vektora onda je

$$\alpha_{\vec k} = 2\alpha\,(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \cong 6\alpha - \alpha k^2 a^2 \qquad I\ 1.20$$

gde je :

a- konstanta rešetke

α - matrični elementi dipol-dipola ne interakcije za najbli že susede.

U ovoj aproksimaciji energiju eksitona možemo napisati na sledeći način:

$$E_e |\vec{k}| = \Delta + 6\alpha + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \; ; \quad m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2\alpha} \qquad I.\ 1.\ 21$$

Kao što vidimo u oblasti malih impulsa eksiton~~a~~ ima kvadratni zakon disperzije.,.To znači da se eksiton ponaša kao slobodna čestica,čija je kinetička energija oblika

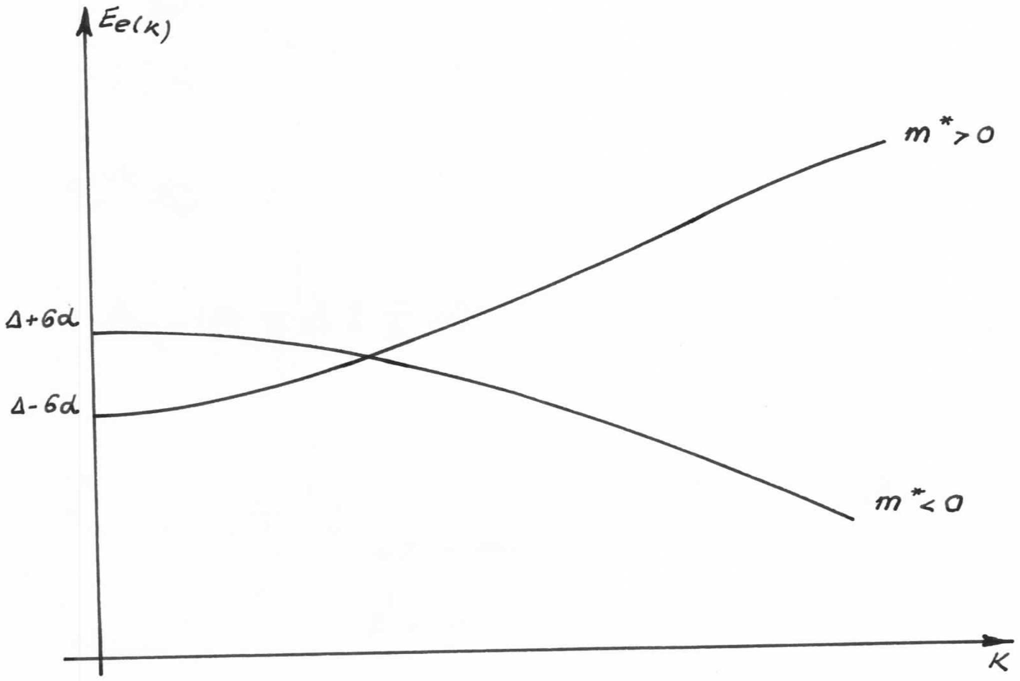
$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

U ovom slučaju stvarnu masu ~~xxxxx~~ čestice zamenjuje efektivna masa

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

koja kao što vidimo zavisi od kristalne strukture / konstanta rešretke a / i od veličine i znaka interakcije izmedju molekula.

U slučaju da je $\alpha<0$ efektivna masa je pozitivna i na jeziku klasične optike imamo takozvanu pozitivnu disperziju na kristalu.
Ako je $\alpha>0$ efektivna masa je negativna i to odgovara klasičnom slučaju negativne disperzije.
Grafički se zakon disperzije za eksiton može predstaviti na sledeći način:



SL. 2

I. §. 2. Frenkelov eksiton u kristalu sa dve pod rešetke i davidovljevsko razdvajanje zona

Da bismo ispitali ponašanje Frenkelovog eksitona u kristalu sa složenom rešetkom poći ćemo od hamiltonijana I.1.13

$$H_{eff} = \sum_{\vec n} \Delta P^{+}_{\vec n} P_{\vec n} + \sum_{\vec n \vec m} \alpha_{\vec n \vec m} P^{+}_{\vec n} P_{\vec m} + \sum_{\vec n \vec m} \gamma_{\vec n \vec m} P^{+}_{\vec n} P_{\vec n} P^{+}_{\vec m} P_{\vec m} \qquad I\,2.1$$

U ovoj formuli vektori $\vec n$ i $\vec m$ predstavljaju vektore elementarnih ćelija kristala,koja sadrži u sebi samo jedan molekul. Ukoliko elementarna ćelija sadrži više molekula/ kristal se sastoji od više podrešetki / taj faktor se matematički odražava " usložnjavanjem" vektora $\vec n$ i $\vec m$ i to na sledeći način:

$$\vec n \to \vec n + \vec r_a \equiv \vec n_a \quad ; \quad \vec m \to \vec m + \vec r_b \equiv \vec m_b \qquad I\,2.2$$

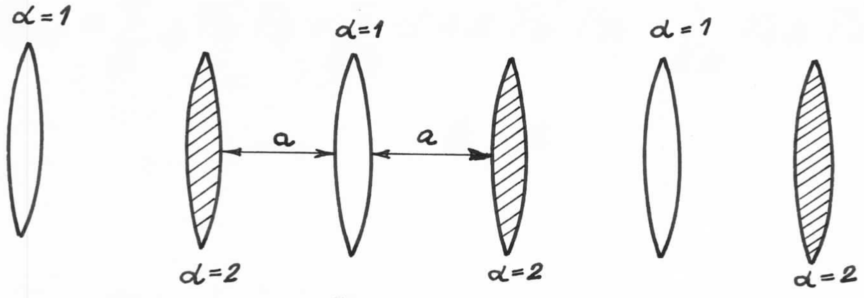
gde indeksi a i b prebrojavaju molekule unutar jedne elementarne ćelije. Pošto ćemo mi u daljem izlaganju posmatrati kristal sa dve podrešetke,a i b uzimaće se samo dve vrednosti 1 i 2. Znači hamiltonijan kristala sa dve podrešetke dobićemo iz formule I.2.1. stavljajući umesto $\vec n$ i $\vec m$, $\vec n_a$ i $\vec m_b$. Tako dobijamo :v

$$H_{eff} = \sum_{\vec n_a} \Delta a\, P^{+}_{\vec n_a} P_{\vec n_a} + \sum_{\vec n_a \vec m_a} \alpha_{\vec n_a \vec m_b} P_{\vec n_a} P_{\vec m_b} +$$

$$+ \sum_{\vec n_a \vec m_b} \gamma_{\vec n_a \vec m_b} P^{+}_{\vec n_a} P_{\vec n_a} P^{+}_{\vec m_b} P_{\vec m_b} \qquad I\,2.3$$

$$a, b = 1,2$$

Da bismo urpostili račun mi ćemo predpostaviti da se kristal sastoji od dve proste kubne podrešetke,koje se tako prožimaju da su za molekul date podrešetke najbliži susedi,atomi iz druge podrešetke. Ovo ćemo za jednodimenzionu strukturu predstaviti na slici 1.



Sl. 1.

Ako se ograničimo aproksimacijom najbližih suseda i predpostavimo da se molekul obe podrešetke pobudjuju do iste energije, u hamiltonijanu I.2.3. možemo izvršiti sledeće aproksimacije:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta \qquad \alpha_{\vec{n}_1\vec{m}_1} = \alpha_{\vec{n}_2\vec{m}_2} = \gamma_{\vec{n}_1\vec{m}_1} = \gamma_{\vec{n}_2\vec{m}_2} \cong 0$$

$$\alpha_{\vec{n}_1;\,\vec{n}+\vec{\lambda};\,2} = \alpha_{\vec{n}_2;\,\vec{n}+\vec{\lambda};\,1} \equiv \frac{1}{2} V \qquad I.1.24$$

$$\gamma_{\vec{n}_1;\,\vec{n}+\vec{\lambda};\,2} = \gamma_{\vec{n}_2;\,n+\lambda,\,1} \equiv W$$

$\vec{\lambda}$ - vektor koji spaja najbliže susede za dati čvor n

Tada formula I.1.3. postaje

$$H_{eff} = \Delta \sum_{\vec{n}} \left(P^{+}_{1\vec{n}} P_{1\vec{n}} + P^{+}_{2\vec{n}} P_{2\vec{n}} \right) + \frac{1}{2} V \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} \left(P^{+}_{1\vec{n}} P_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} + P^{+}_{2\vec{n}} P_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}} \right) +$$

$$+ W \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} P^{+}_{1\vec{n}} P_{1\vec{n}} P^{+}_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} P_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} \qquad I\ 2.5$$

Ako želimo hamiltonijan I.2.5 da analiziramo u aproksimaciji približne druge kvantizacije, onda ćemo Pauli operatore zameniti Boze operatorima

$$P_{1\vec{n}} \cong B_{1\vec{n}} \qquad P_{2\vec{n}} = B_{2\vec{n}}$$

$$P^{+}_{1\vec{n}} \cong B^{+}_{1\vec{n}} \qquad P^{+}_{2\vec{n}} = B^{+}_{2\vec{n}} \qquad I\ 2.5$$

i istovremeno odbaciti treći član u formuli I.2.5. koji sadrži četiri operatora. Prema tome, urpošćeni hamiltonijan ima oblik:

$$H^{n\Delta K}_{eff} = \Delta \sum_{\vec{n}} \left(B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} + B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} \right) + \frac{1}{2} U \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} \left(B^{+}_{1\vec{n}} B_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} + B^{+}_{2\vec{n}} B_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}} \right. \qquad I\ 2.6$$

Posle Furije transformacije operatora

$$B_{1\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{1\vec{k}}\, \ell^{i\vec{k}\vec{n}} \quad ; \quad B_{2\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{2\vec{k}}\, \ell^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad I\ 2.7$$

Hamiltonijan I.2.6. postaje

$$H^{n\Delta K}_{eff} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \Delta \left(B^{+}_{1\vec{k}} B_{1\vec{k}} + B^{+}_{2\vec{k}} B_{2\vec{k}} \right) + \frac{1}{2} V_{\vec{k}} \left(B^{+}_{1\vec{k}} B_{2\vec{k}} + B^{+}_{2\vec{k}} B_{1K} \right) \right\} \qquad I.2.8$$

gde je :

$$U_{\vec{k}} = 2U \sum_{\vec{\lambda}>0} \cos \vec{k}\vec{\lambda} \qquad I\,2.9$$

Da bismo hamiltonijan I.2.8. dijagonizovali dovoljno je analizirati kvadratnu formu pod znakom sume, tj.

$$h_{\vec{k}} = \Delta \left(B^{+}_{1\vec{k}} B_{1\vec{k}} + B^{+}_{2\vec{k}} B_{2\vec{k}} \right) + \frac{1}{2} U_{\vec{k}} \left(B^{+}_{1\vec{k}} B_{2\vec{k}} + B^{+}_{2\vec{k}} B_{1\vec{k}} \right) \equiv$$

$$\equiv \sum_{ss'=1} M_{ss'} B^{+}_{s} B_{s'} \qquad I\,2.10$$

gde je :

$$M_{11} = M_{22} = \Delta \; ; \; M_{12} = M_{21} = \frac{1}{2} U_{\vec{k}} \qquad I\,2.11$$

Kvadratnu formu I.2.10. možemo napisati u matričnom obliku na sledeći način:

$$h_{\vec{k}} = \left| B^{+}_{1} \; B^{+}_{2} \right| \left\| \begin{matrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{matrix} \right\| \left| \begin{matrix} B_{1} \\ B_{2} \end{matrix} \right| \qquad I\,2.12$$

Pošto su matrični elementi $M_{ss'}$ realni dijagonalizaciju kvadratne forme I.2.12. izvršićemo pomoću ortogonalne matrice.

$$\hat{O} = \left| \begin{matrix} X & -Y \\ Y & X \end{matrix} \right| \; ; \; X^{2} + Y^{2} = 1 \; ; \; \hat{O} = \hat{O}^{-1} \qquad I\,2.13$$

Tada $\mathcal{L}_{\vec{k}}$ postaje:

$$\mathcal{L}_{\vec{k}} = (B_1^+ B_2^+) \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix}^{-1} \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} B_1 \\ B_2 \end{vmatrix}$$

Ako uvedemo smenu:

$$\begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} B_1 \\ B_2 \end{vmatrix} ; \qquad \begin{vmatrix} B_1 \\ B_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x & y \\ -y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} \qquad \text{I 2.14}$$

onda je usled ortogonalnosti matrice $\hat{O}$

$$|B_1^+ B_2^+| \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix}^{-1} = |C_1^+ C_2^+|$$

pa $\mathcal{L}_{\vec{k}}$ postaje:

$$\mathcal{L}_{\vec{k}} = (C_1^+ C_2^+) \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix}^{-1} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} \qquad \text{I.2.15}$$

Koeficijente x i y ortogonalne matrice odredićemo tako da forma I.2.15 bude dijagonalna novim Boze operatorima C_1 i C_2 tj. postavićemo uslov :

$$(C_1^+ C_2^+) \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix}^{-1} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} = (C_1^+ C_2^+) \begin{vmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix}$$

odakle sledi:

$$\begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix} \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x & -y \\ y & x \end{vmatrix}$$

što se svodi na sledeće sisteme jednačina:

$$(\Delta - \lambda)x - \frac{1}{2} V_{\vec{k}} y = 0 \qquad (\Delta - \lambda)x + \frac{1}{2} V_{k} y = 0$$

$$-\frac{1}{2} V_{\vec{k}} x + (\lambda - \Delta) y = 0 \;^{(A)} \qquad \frac{1}{2} V_{\vec{k}} x + (\Delta - \lambda) y = 0 \;^{(B)}$$

Sistemi jednačina A i B su sistemi homogenih linearnih jednačina po nepoznatim x i y .

Da bi ovi sistemi imali netrivijalno rešenje,njihove determinante moraju biti ravne nuli. Determinante sistema (A) i sistema (B) izjednačene sa nulom daju iste vrednosti za λ i to :

$$\lambda_{1,2|\vec{k}|} = \Delta \pm \frac{1}{2} V_{\vec{k}} \qquad I\ 2.16$$

Iz prve jednačine sistema A nalazimo $\lambda = \lambda_1$

$$-x = y$$

što uz uslov $x^2 + y^2 = 1$ daje:

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad y = -\frac{1}{\sqrt{2}} \qquad I\ 2.17$$

To znači, da se linearnom transformacijom operatora:

$$\begin{vmatrix} B_1 \\ B_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix}$$

kvadratna forma $L_{\vec{k}}$ dijagonalizuje na oblik:

$$L_{\vec{k}} = \lambda_{1|\vec{k}|} C^{+}_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}} + \lambda_{2|\vec{k}|} C^{+}_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}} \qquad I\ 2.19$$

Konačan oblik dijagonalizovanog hamiltonijana /I.2.8/ je :

$$H^{\text{пдк}}_{eff} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \left(\Delta + \frac{1}{2} V_{\vec{k}}\right) C^{+}_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}} + \left(\Delta - \frac{1}{2} V_{\vec{k}}\right) C^{+}_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}} \right\} \qquad I\,2.20$$

Kao što vidimo u kristalu sa dve podrešetke imamo dva zakona disperzije za elementarne eksitacije:

$$E^{|e|}_{1|\vec{k}|} = \frac{\partial H^{\text{пдк}}_{eff}}{\partial C^{+}_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}}} = \Delta + \frac{1}{2} V_{\vec{k}} \; ; \quad E^{|e|}_{2|\vec{k}|} = \frac{\partial H^{\text{пдк}}_{eff}}{\partial C^{+}_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}}} = \Delta - \frac{1}{2} V_{\vec{k}} \qquad I\,2.21$$

to drugim rečima znači da u kristalu sa dve podrešetke imamo dva tipa eksitona sa zakonom disperzije E 1 i E2 iz formule I.2.21. Očigledno je da su njihove efektivne mase suprotnog znaka. Eksitoni tipa 1 imaju efektivnu masu

$$m_1^{*} = \frac{-\hbar^2}{a^2 V} \qquad I\,2.22$$

dok eksitoni tipa 2 imaju efektivnu masu

$$m_2^{*} = \frac{\hbar^2}{a^2 V} \qquad I\,2.23$$

To drugim rečima znači ,ako eksitoni u jednoj podrešetci imaju pozitivnu disperziju,eksitoni u drugoj imaju negativnu disperziju.

Formule / I.2.21./ predstavljaju dve različite eksitonske zone i ovaj efekat,da u kristalu sa dve podrešetke imamo dva tipa eksitona ili dve različite eksitonske zone naziva se davidovljevsko razdvajanje zona. Širina ovog razdvajanja definiše se kao :

$$\Delta E_{|\vec{k}|} = E^{|e|}_{1(\vec{k})} - E^{|e|}_{2(\vec{k})} \qquad I\,2.24$$

U našem slučaju s obzirom na / I.2.21/ i / I.2.24/ širina razdvajanja zona je :

$$\Delta E_{(K)} = V_K \qquad I\,2.25$$

kao što vidimo širina razdvajanja ravna je Furije liku interakcije izmedju molekula dve različite podrešetke.

I. §. 3. Bieksiton u kristalu sa prostom rešetkom

Ako u kristal ubacimo toliko energije da se istovremeno ekscitiraju dva molekula,onda mogu da nastupe dva slučaja:

1- od svakog ekscitiranog molekula prostire se po jedan slobodni eksitonski talas sa energijom definisanom u I.1.

2- deo ubačene energije troši se na čvršće vezivanje para molekula tako da se talasi ekscitacije prenose kroz kristal tako da se uvek ekscitiraju po~~d~~ dva molekula odjednom.

Ovaj talas koji se sastoji u sinhronizovanom pobudjivanju para molekula naziva se bieksiton.Na osnovu onoga što je napred rečeno očigledno je da bieksiton morao imati nešto manju energiju nego što je suma dva slobodna eksitona. Deo ubačene energije u kristalu troši se na vezivanje molekula u parove.

Da bismo izvršili teorijsku analizu bieksitona u prostoj rešetci poćićemo od formuleI.1.15 tj. od hamiltonijana H_{eff} napisanog paulionskoj reprezentaciji

$$H_{eff} = \sum_{\vec{n}} \Delta P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \tag{I.3.1}$$

Formulu / I.3.1./ napisaćemo u aproksimaciji najbližih suseda na sledeći način:

$$H_{eff} = \underset{\vec{n}}{\Delta} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} + \alpha \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}+\lambda} + \gamma \sum_{\vec{n}\lambda} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} P_{\vec{n}+\lambda}^{+} P_{\vec{n}+\lambda} \qquad I\,3.2$$

gde su α i γ matrični elementi dipol-dipolne interakcije za najbliže susede, a vektor $\vec{\lambda}$ povezuje najbliže susede za dati čvor $\vec{n}$. Predpostavićemo da kristal ima prostu kubnu strukturu.

Energiju bieksitona mogli bismo da tražimo ispitujući polove dvočestične paulionske funkcije Grina.

$$\mathcal{D}(\vec{n},\vec{m}) = \sum_{\vec{n}_1 \vec{m}_1} \langle\langle P_{\vec{n}_1} P_{\vec{m}_1} | P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}}^{+} \rangle\rangle \qquad I\,3.3$$

Medjutim,pošto je $P_{\vec{n}}^{+2} = 0$ ova funkcija je nepodesna jer je za čitav niz od N vrednosti ravna nuli. Drugim rečima pri $\vec{m} = \vec{n}$ jednačine kretanja ostaju nedefinisane, pa se ova nedefinisanost mora regulisati uvodjenjem nekog dopunskog uslova.

Da bismo ovo izbegli,mi ćemo od Pauli operatora preći na Boze operatore i hamiltonijan / I.3.2./ napisati u Boze reprezentaciji sa tačnošću dovoljnom za ispitivanje dvočestičnih stanja, a to znači da ćemo se zadržati do članova četvrtog reda,zaključno, u ekvivalentnom bozonskom hamiltonijanu. Ovi članovi moraju biti napisani u obliku normalnog produkta.

Da bismo ovo postigli koristićemo egzaktnu bozoneku reprezentaciju za Pauli operatore koja glasi :

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

$$P_{\vec{n}}^{+}=B_{\vec{n}}^{+}\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B_{\vec{n}}^{+\nu}B_{\vec{n}}^{\nu}\right]^{1/2} \qquad I\ 3.4$$

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

Operatorske funkcije na desnoj strani jednačine konstruisane su tako da u prostoru bozonskih stanja zadovoljavaju sve komutacione relacije za Pauli operatore.

S obzirom da nam je potreban ekvivalentan bozonski hamiltonijan sa tačnošću do četvrtog reda po Boze operatorima, mi ćemo umesto tačnih formula / I.3.4/ koristiti približne, koje iz njih slede, i to :

$$P_{\vec{n}}\cong B_{\vec{n}}-B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}B_{\vec{n}}$$

$$P_{\vec{n}}^{+}\cong B_{\vec{n}}^{+}-B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}} \qquad I\ 3.5$$

$$P_{\vec{n}}^{+}P_{\vec{n}}\cong B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}-B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}B_{\vec{n}}$$

Ako formulu / I.3.5./ uvrstimo u hamiltonijan /I.3.2/ i zadržimo samo članove četvrtog reda po Boze operatorima dobijamo ekvivalentni bozonski operator u obliku:

$$H_B=\Delta\sum_{\vec{n}}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}+\alpha\sum_{\vec{n}\lambda}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}-\Delta\sum_{\vec{n}}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}}B_{\vec{n}}-$$

$$-\alpha\sum_{\vec{n}\lambda}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+}B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}-\alpha\sum_{\vec{n}\vec{\lambda}}B_{n}^{+}B_{n}^{+}B_{\vec{n}}B_{\vec{n}+\lambda}+$$

$$+\gamma\sum_{\vec{n}\vec{\lambda}}B_{\vec{n}}^{+}B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+}B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}B_{\vec{n}} \qquad I\ 3.6$$

Problem vezanih stanja zgodnije je rešavati odmah u impulsnom prostoru,pa ćemo zbog toga izvršiti Furije transformaciju Boze operatora::

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \; ; \quad \overset{+}{B}_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum B_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} \qquad \text{I 3.7}$$

posle čega H_B postaje:

$$H_B = \sum_{\vec{k}} (\Delta + \alpha_{\vec{k}}) \overset{+}{B}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum (\Delta + \alpha_{\vec{k}_1} + \alpha_{\vec{k}_3} - \gamma_{\vec{k}_1 - \vec{k}_3}) \overset{+}{B}_{\vec{k}_1} \overset{+}{B}_{\vec{k}_2} B_{K_3} B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} \qquad \text{I 3.8}$$

gde je:

$$\alpha_{\vec{k}} = 2\alpha \sum_{\vec{\lambda}>0} \cos \vec{k}\vec{\lambda} \; ; \quad \gamma_{\vec{n}} = 2\gamma \sum_{\vec{\lambda}>0} \cos \vec{k}\vec{\lambda} \qquad \text{I 3.9}$$

Vezana stanja ispitivaćemo pomoću jednačine za dvočestičnu bozonsku funkciju Grina napisanu u impulsnom prostoru. Ova funkcija ima oblik:

$$G(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \sum_{\vec{q}_3} \langle\langle B_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 - \vec{q}_3} B_{\vec{q}_3} \,|\, \overset{+}{B}_{\vec{q}_1} \overset{+}{B}_{\vec{q}_2} \rangle\rangle \qquad \text{I 3.10}$$

gde su $\vec{q}_1, \vec{q}_2 \, i \, \vec{q}_3$ talasni vektori. Treba naglasiti da simbol $\langle\langle \cdots \rangle\rangle$ označava srednju vrednost po bozonskom vakumu, pa zbog toga svi ispušteni članovi ekvivalentnog bozonskog hamiltonijana, a to su članovi šestog i višeg reda, ne daju nikakav doprinos pri izračunavanju funkcije tipa /I.3.lo./

Na osnovu opšte jednačine za funkciju Grina/ vidi dodatak/ možemo napisati:

$$E\sum_{\vec{q}_3} \langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{q}_3} B_{\vec{q}_3} | B^+_{\vec{q}_1} B^+_{\vec{q}_2} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\sum_{\vec{q}_3} \langle [B_{\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{q}_3} B_{\vec{q}_3}, B^+_{\vec{q}_1} B^+_{\vec{q}_2}] \rangle -$$

$$-\sum_{\vec{q}_3} \langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{q}_3} B_{\vec{q}_3} | [B^+_{\vec{q}_1} B^+_{\vec{q}_2}, H_B] \rangle\rangle \qquad I\ 3.11$$

posle nalaženja komutatora koji figurišu u / I.3.11/ ova jednačina se svodi na :

$$(E-2\Delta-\alpha_{\vec{q}_1}-\alpha_{\vec{q}_2})G(\vec{q}_1,\vec{q}_2) = \frac{i}{\pi} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}(2\Delta + 2\alpha_{\vec{k}_1} + \alpha_{\vec{q}_1} + \alpha_{\vec{q}_2} -$$

$$- \gamma_{\vec{k}_1-\vec{q}_1} - \gamma_{\vec{k}_1-\vec{q}_2})\, G(\vec{k}_1 . \vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{k}_1) \qquad I\ 3.12$$

Da bi se ova jednačina zatvorila na funkciji Grina jednog tipa uvešćemo sledeće smene za talasne vektore:

$$\vec{q}_1 = \frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\ ; \qquad \vec{q}_2 = \frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}\ ; \qquad \vec{k}_1 = \frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\,' \qquad I\ 3.13$$

Ovakve smene za talasne vektore odgovaraju prelasku na sistem centra masa u konfiguracionom prostoru. S obzirom na ove smene funkcija Grina postaje :

$$G(\vec{q}_1;\vec{q}_2) = \sum_{\vec{q}_3} \langle\langle B_{\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{q}_3} B_{\vec{q}_3} | B^+_{\vec{q}_1} B^+_{\vec{q}_2} \rangle\rangle =$$

$$= \sum_{\vec{q}_3} \langle\langle B_{\vec{Q}-\vec{q}_3} B_{\vec{q}_3} | B^+_{\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}} B_{\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}} \rangle\rangle \equiv \Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}) \qquad I\ 3.14$$

Pošto dva kreaciona Boze operatora komutiraju očigledno je da je Γ parna funkcija tj.

$$\Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}) = \Gamma_{\vec{Q}}(-\vec{q}) \qquad I\ 3.15$$

Posle upotrebljene smene / I.3.13./ jednačina /I.3.12/ postaje

$$\left[E-2\Delta-\alpha_{\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}}-\alpha_{\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}}\right]\Gamma_{Q}(\vec{q})=\frac{i}{\pi}-$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}\,'}\left\{2\Delta+2\alpha_{\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\,'}+\alpha_{\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}}+\alpha_{\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}}-\gamma^{\Lambda}_{\vec{q}\,'-\vec{q}}-\gamma^{\Lambda}_{\vec{q}\,'+\vec{q}}\right\}\Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}\,')$$

$$I\ 3.16$$

U daljem računu ograničićemo se na slučaj jednodimenzionalnog lanca molekula, jer se dvo i trodimenzionalni problemi ne mogu rešiti bez kompjutera. Ne treba misliti da račun za jednodimenzionu strukturu nema nikakvog praktičnog značaja jer baš u teoriji eksitona, polimeri i neke biostrukture pokazuju sve osobine jednodimenzionog lanca molekula.

Za slučaj jedne dimenzije jednačina za funkciju Grina glasi :

$$\left(E-2\Delta-4\alpha D_Q\cos qa\right)\Gamma_Q(qa)=\frac{i}{\pi}-\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}\,'}\left\{2\Delta+4\alpha D_Q\cos q'a+\right.$$

$$\left.+4\alpha D_Q\cos qa-4\gamma^{\Lambda}\cos qa\cos q'a\right\}\Gamma_Q(q'a) \qquad I\ 3.17$$

gde je :

$$D_Q=\cos\frac{Qa}{2} \qquad I\ 3.18$$

Treba napomenuti da je pri dobijanju jednačine /I.3.17/ iz / I.3.16/ iskorišćena činjenica da je funkcija Γ parna funkcija talasnog vektora $\vec{q}$ i da suma ima simetrične granice.

Ako u formuli / I.3.17/ predjemo sa sume na integral po formuli:

$$\frac{1}{N}\sum_{q} = \frac{Q}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dq \qquad I\ 3.19$$

posle zamene $q_a = x$ i $q_a' = y$ za funkciju Γ dobijamo sledeću integralnu jednačinu.

$$\left(D_Q \cos x + \frac{2\Delta - E}{4\alpha}\right)\Gamma_{Q(x)} = -\frac{\dot{\imath}}{4\pi\alpha} +$$

$$+\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left[\frac{\Delta}{2\alpha} + D_Q \cos x + \left(D_Q - \frac{\gamma}{\alpha}\cos x\right)\cos y\right]\Gamma_{Q(y)}\, dy \qquad I\ 3.20$$

Integralna jednačina /I.3.20./ ima separabilno jezgro i može se svesti na sistem / vidi dodatak/ linearnih algebarskih jednačina. U datom slučaju imamo :

$$\Gamma_{(x)} = \frac{-\dot{\imath}}{4\pi\alpha(D\cos x + R)} + \frac{D\cos x + S}{D\cos x + R}C_1 + \frac{-T\cos x - D}{D\cos x + R}C_2 \qquad I\ 3.21$$

gde su uvedene oznake:

$$D \equiv D_Q\ ; \quad \frac{2\Delta - E}{4\alpha} = R\ ; \quad \frac{\Delta}{2\alpha} = S\ ; \quad \frac{\gamma}{\alpha} = T \qquad I\ 3.22$$

i

$$C_1 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dy\, \Gamma_{(y)} \qquad C_2 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dy\, \Gamma_{(y)}\cos y \qquad I\ 3.23$$

Množeći jednačinu /I.3.21/ sa $\frac{dx}{2\pi}$ i integraleći u granicama od $-\pi$ do π , a zatim množeći istu jednačinu sa $\frac{dx\cos x}{2\pi}$ integraleći u granicama od $-\pi$ do π, dobijamo sledeći sistem nehomogenih ~~diferencijalnih~~ jednačina po nepoznatim C_1 i C_2.

$$\left\{1-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{D\cos x+S}{D\cos x+R}\,dx\right\}C_1+\left\{-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{-T\cos x+D}{D\cos x+R}\,dx\right\}C_2=\frac{-i}{8\pi^2\alpha}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dx}{D\cos x+R}$$

$$\left\{-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{D\cos^2x+S\cos x}{D\cos x+R}\,dx\right\}C_1+\left\{1-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{-T\cos^2x+D\cos x}{D\cos x+R}\right\}C_2=$$

$$=-\frac{i}{8\pi^2\alpha}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dx\cos x}{D\cos x+R} \qquad I\ 3.24$$

Odavde nalazimo :

$$C_1=\frac{\delta_1}{\delta} \qquad C_2=\frac{\delta_2}{\delta} \qquad I\ 3.25$$

gde je :

$$\delta=\begin{vmatrix}1-J_{11} & -J_{12}\\ -J_{21} & 1-J_{22}\end{vmatrix} \qquad I\ 3.26$$

$$\delta_1=\begin{vmatrix}j_1 & -J_{12}\\ j_2 & 1-J_{22}\end{vmatrix} \qquad I.\ 3.27$$

$$\delta_2=\begin{vmatrix}1-J_{11} & j_1\\ -J_{21} & j_2\end{vmatrix} \qquad I\ 3.28$$

$$J_{11}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{D\cos x+S}{D\cos x+R}\,dx\ ;\quad J_{12}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{-T\cos x+D}{D\cos x+R}\,dx$$

$$I\ 3.29$$

$$J_{21}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{D\cos^2x+S\cos x}{D\cos x+R}\,dx\ ;\quad J_{22}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{-T\cos^2x+D\cos x}{D\cos x+R}\,dx$$

$$j_1=\frac{-i}{8\pi^2\alpha}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dx}{D\cos x+R}$$

$$I\ 3.30$$

$$j_2=-\frac{i}{8\pi^2\alpha}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\cos x}{D\cos x+R}\,dx$$

To znači da je tražena funkcija Grina /I.3.21/ oblika

$$\Gamma(x)=\frac{-i}{4\pi\alpha(D\cos x+R)}+\frac{D\cos x+S}{D\cos x+R}\frac{\delta_1}{\delta}+\frac{-T\cos x+D}{D\cos x+R}\frac{\delta_2}{\delta} \qquad I\ 3.31$$

Polove ove funkcije, tj. one tačke u kojim funkcija postaje beskonačna dobićemo očigledno iz sledećih uslova:

$$\mathcal{D}\cos x + \mathcal{R} = 0 \qquad I\ 3.32$$

$$\delta = 0 \qquad I\ 3.33$$

Ako se eksplicitno reši integral I.3.29 uslov I.3.33 glasi:

$$\begin{vmatrix} (\mathcal{R}-s)\Omega & \frac{T}{\mathcal{D}} - \mathcal{D}\Omega - \frac{\mathcal{R}T\Omega}{\mathcal{D}} \\ (\mathcal{R}-s)\left(\frac{1}{\mathcal{D}} - \frac{\mathcal{R}\Omega}{\mathcal{D}}\right) & -\frac{\mathcal{R}T}{\mathcal{D}^2} + \mathcal{R}\Omega + \frac{\mathcal{R}^2T\Omega}{\mathcal{D}^2} \end{vmatrix} = 0 \qquad I\ 3.34$$

gde je:

$$\Omega = (\mathcal{R}^2 - \mathcal{D}^2)^{-1/2} \qquad I\ 3.35$$

Rešavajući uslov I.3.32 eksplicitno po energiji dobijamo rezultat:

$$E_{2f} = 2\Delta + 4\alpha\cos\frac{Qa}{2}\cos qa \qquad I\ 3.36$$

i ovaj pol Grinove funkcije predstavlja sumu energija dva slobodna eksitona, čiji su talasi interferirali. Ako bi smo se vratili na smene:

$$Q = q_1 + q_2 \ ; \quad q = \frac{q_1 - q_2}{2}$$

izraz I.3.36 bi glasio:

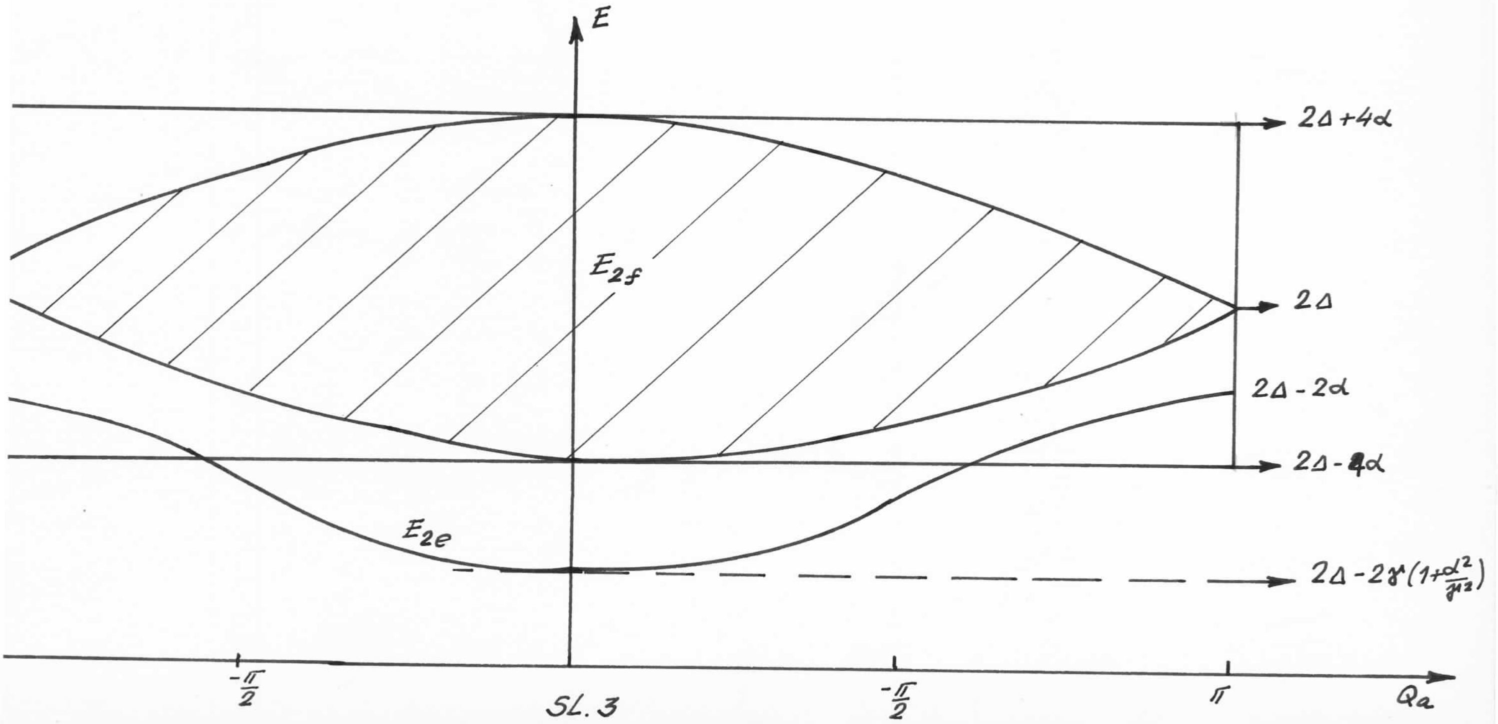
$$E_{2f} = 2\Delta + 2\alpha\cos q_1 a + 2\alpha\cos q_2 a \qquad I\ 3.37$$

odakle je očiglednije da je ovo rešenje suma energija dva slobodna eksitona.

Uslov I.3.33 daje dva nivoa i to $E_0 = 0$ koje nema fizičkog smisla i :

$$E_{2e} = 2\Delta + 2\gamma'\left(1 + \frac{\alpha^2}{\gamma'^2}\cos^2\frac{Qa}{2}\right) \qquad I.3.38$$

Ovo drugo rešenje zavisi samo od jednog talasnog vektora Q ,koji je suma q_1 i q_2 i pretstavlja ukupni talasni vektor vezanih stanja. Prema tome I.3.38 pretstavlja traženu energiju vezanih stanja dva eksitona,tj.energiju bieksitona.Lako je videti da samo ako je $\gamma' < 0$ I.3.39 energija bieksitona ima manju vrednost nego suma energije dva slobodna eksitona. Kao što smo napred rekli bieksiton mora imati manju energiju nego dva slobodna eksitona,pa je obrazovanje bieksitona moguće jedino onda ako je $\gamma' < 0$, tj.ako je takozvana dinamička interakcija sistema privlačna. Grafička rešenja I.3.37 i I.3.38 se mogu predstaviti na sledeći način:



SL. 3

Na slici 2 uzeto je da je $\gamma<0$ i da je $\alpha>|\gamma|$
Kao što vidimo u jednodimenzionoj strukturi bieksiton je definisan za sve vrednosti svoga talasnog vektora Q . Na kraju treba napomenuti da u dvodimenzionoj i trodimenzionoj strukturi bieksiton postaje samo zab velike vrednosti talasnog vektora Q , tj. za one vrednosti koje su bliže krajevima Briluenove zone.

GLAVA II

BIEKSITONI U KRISTALU SA DVE PODREŠETKE

§1 Formiranje opšte jednačine za dvočestičnu funkciju Grina
§2 Polovi funkcije Grina za jednodimenzione strukture
§3 Bieksitonske zone i davidovljevsko razdvajanje bieksitonskih zona

II. §. 1. Formiranje opšte jednačine za dvočestičnu funkciju Grina.

Problem vezanih stanja u sistemu sa dve podrešetke proste kubne strukture,koje se uzajamno prožimaju tako da su najbliži susedi za molekul jedne podrešetke 6 molekula druge podrešetke.

Za ovaj slučaj,ako se ograničimo aproksimacijom najbližih suseda,hamiltonijan je dat formulom I.2.5 i ima oblik:

$$H_{eff} = \Delta \sum_{\vec{n}} \left(P^{+}_{1\vec{n}} P_{1\vec{n}} + P^{+}_{2\vec{n}} P_{2\vec{n}} \right) + \frac{1}{2} V \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} \left(P^{+}_{1\vec{n}} P_{2\vec{n}+\vec{\lambda}} + P^{+}_{2\vec{n}} P_{1\vec{n}+\vec{\lambda}} + \right.$$

$$+ W_{\vec{n}\vec{\lambda}} \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} P^{+}_{1\vec{n}} P_{1\vec{n}} P^{+}_{2\vec{n}+\vec{\lambda}} P_{2\vec{n}+\vec{\lambda}} \qquad \underline{II}\ 1.1$$

Kao i u slučaju kada smo analizirali bieksitone u prostoj rešetci, u formuli II.1.1 zamenićemo Pauli operatore Boze operatorima u istoj onoj aproksimaciji koja je učinjena u trećem paragrafu prve glave.

$$P_{1\vec{n}} \cong B_{1\vec{n}} - B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} \quad ; \quad P_{2\vec{n}} \cong B_{2\vec{n}} - B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}}$$

$$P^{+}_{1\vec{n}} \cong B^{+}_{1\vec{n}} - B^{+}_{1\vec{n}} B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} \quad ; \quad P^{+}_{2\vec{n}} \cong B^{+}_{2\vec{n}} - B^{+}_{2\vec{n}} B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}}$$

$$P^{+}_{1\vec{n}} P_{1\vec{n}} \cong B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} - B^{+}_{1\vec{n}} B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} ; P^{+}_{2\vec{n}} P_{2\vec{n}} \cong B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} -$$

$$- B^{+}_{2\vec{n}} B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} \qquad \mathrm{II}\ 1.2$$

Ako u II.1.1 izvršimo zamene II.1.2 dobijamo ekvivalentni bozonski hamiltonijan u obliku :

$$H_B = \Delta \sum_{\vec{n}} B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} + \Delta \sum_{\vec{n}} B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} + \frac{1}{2} U \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} \left(B^{+}_{1\vec{n}} B_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} + \right.$$

$$\left. + B_{2\vec{n}} B_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}} \right) - \Delta \sum_{\vec{n}} B^{+}_{1\vec{n}} B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} - \Delta \sum_{\vec{n}} B^{+}_{2\vec{n}} B^{+}_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} B_{2\vec{n}} -$$

$$- \frac{1}{2} U \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} B^{+}_{1\vec{n}} B^{+}_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} B_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} B_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} + B^{+}_{1\vec{n}} B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} B_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} +$$

$$+ B^{+}_{2\vec{n}} B^{+}_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}} B_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}} B_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}} + B^{+}_{2\vec{n}} B^{+}_{2n} B_{2\vec{n}} B_{1,\vec{n}+\vec{\lambda}}) +$$

$$+ W \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} B^{+}_{1\vec{n}} B_{1\vec{n}} B^{+}_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} B_{2,\vec{n}+\vec{\lambda}} \qquad \underline{II}\ 1.3$$

Posle Furije-transformacije Boze operatora:

$$B_{1\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{1\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \ ; \quad B_{2\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{2\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad \underline{II}\ 1.4$$

hamiltonijan /II.1.3/ postaje:

$$H_B = H_B^{(2)} + H_B^{(4)} \qquad \underline{II}\ 1.5$$

gde je

$$H_B^{(2)} = \Delta \sum_{\vec{k}} B^{+}_{1\vec{k}} B_{1\vec{k}} + \Delta \sum_{\vec{k}} B^{+}_{2\vec{k}} B_{2\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} \left(B^{+}_{1\vec{k}} B_{2\vec{k}} + B^{+}_{2\vec{k}} B_{1\vec{k}} \right)$$

$$\underline{II}\ 1.6$$

$$H_B^{(4)} = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} \left\{ \Delta B^{+}_{1\vec{k}_1} B^{+}_{1\vec{k}_2} B_{1\vec{k}_3} B_{1\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} + \Delta B^{+}_{2\vec{k}_1} B_{2\vec{k}_2} \overset{B_2K_3}{\vee} B_{2,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \right.$$

$$+ \frac{1}{2} U_{\vec{k}_3} \left(B^{+}_{1\vec{k}_1} B^{+}_{1\vec{k}_2} B_{2\vec{k}_3} B_{1,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} + B^{+}_{2\vec{k}_1} B^{+}_{2\vec{k}_2} B_{1\vec{k}_3} B_{2,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \right)$$

$$+ \frac{1}{2} U_{\vec{k}_1} \left(B^{+}_{1\vec{k}_1} B^{+}_{2\vec{k}_2} B_{2\vec{k}_3} B_{2,\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} + B^{+}_{2,\vec{k}_1} B^{+}_{1\vec{k}_2} B_{1\vec{k}_3} B_{1\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \right) -$$

$$- W_{\vec{k}_1-\vec{k}_3} B^{+}_{1\vec{k}_1} B^{+}_{2\vec{k}_2} B_{1\vec{k}_3} B_{2\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \qquad \underline{II}\ 1.7$$

$$U_{\vec{k}} = 2U \sum_{\vec{\lambda}>0} \cos \vec{k}\vec{\lambda} \ ; \quad W_{\vec{k}} = 2W \sum_{\vec{\lambda}>0} \cos \vec{k}\vec{\lambda} \qquad \underline{II}\ 1.8$$

Kao što smo videli u drugom paragrafu prve glave hamiltonijan $H_B^{(2)}$ može se dijagonalizovati prelaskom na nove Boze operatore C putem linearnih transformacija sledećeg oblika:

$$B_{1\vec{k}} = \frac{C_{1\vec{k}} - C_{2\vec{k}}}{\sqrt{2}} \qquad B_{2\vec{k}} = \frac{C_{1\vec{k}} + C_{2\vec{k}}}{\sqrt{2}}$$

što je zgodnije napisati u sledećem obliku:

$$B_{1\vec{k}} = \sum_{\alpha=1}^{2} \theta_\alpha C_{\alpha\vec{k}} \qquad B_{2\vec{k}} = \sum_{\alpha=1}^{2} \omega_\alpha C_{\alpha\vec{k}}$$

$$\theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \theta_2 = - \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\omega_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \omega_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Transfornacije / II.1.9./ svode hamiltonijan na na sledeći oblik:

$$H_B^{(2)} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \lambda_1(\vec{k}) C^+_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}} + \lambda_2(\vec{k}) C^+_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}} \right\} \qquad \underline{II}\ 1.10$$

$$\lambda_{1(\vec{k})} = \Delta + \frac{1}{2} U_{\vec{k}} \quad ; \quad \lambda_{2(\vec{k})} = \Delta - \frac{1}{2} U_{\vec{k}} \qquad \underline{II}\ 1.11$$

Ako zamene /II.1.9./ izvršimo u hamiltonijanu $H_B^{(4)}$ on se može napisati :

$$H_B^{(4)} = -\frac{1}{N} \sum_{\substack{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \\ \vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3}} \Big\{ \Delta\, \theta_{\alpha_1} \theta_{\alpha_2} \theta_{\alpha_3} \theta_{\alpha_4} + \Delta\, \omega_{\alpha_1} \omega_{\alpha_2} \omega_{\alpha_3} \omega_{\alpha_4} +$$

$$+ \frac{1}{2} U_{\vec{k}_3} \left(\theta_{\alpha_1} \theta_{\alpha_2} \omega_{\alpha_3} \theta_{\alpha_4} + \omega_{\alpha_1} \omega_{\alpha_2} \theta_{\alpha_3} \omega_{\alpha_4} \right) +$$

$$+ \frac{1}{2} U_{\vec{k}_1} \left(\theta_{\alpha_1} \omega_{\alpha_2} \omega_{\alpha_3} \omega_{\alpha_4} + \omega_{\alpha_1} \theta_{\alpha_2} \theta_{\alpha_3} \theta_{\alpha_4} \right) -$$

$$- W_{\vec{k}_1 - \vec{k}_3}\, \theta_{\alpha_1} \omega_{\alpha_2} \theta_{\alpha_3} \omega_{\alpha_4} \Big\} C^{+}_{\alpha_1, \vec{k}_1} C_{\alpha_2 \vec{k}_2} C_{\alpha_3 \vec{k}_3} C_{\alpha_4, \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} \qquad \underline{II}\ 1.12$$

$$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 = 1,2$$

Da bi smo ispitali vezana stanja dva eksitona u sistemu opisanom hamiltonijanom H_B mi ćemo potražiti dvobozonsku funkciju Grina sledećeg oblika:

$$\sum_{i_3 i_4 \vec{q}_3} \langle\langle C_{i_4, \vec{q}_1 + \vec{q}_2 - \vec{q}_3} C_{i_3, \vec{q}_3} \,|\, C^{+}_{i_1, \vec{q}_1} C^{+}_{i_2, \vec{q}_2} \rangle\rangle\, G_{i_1 i_4}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$$

$$\underline{II}\ 1.13$$

$$i_1, i_2, i_3, i_4 = 1,2$$

Na osnovu opšte teorije, jednačina za funkciju Grina glasi:

$$E \langle\langle A / B \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [A,B] \rangle - \langle\langle A / [B, H_B] \rangle\rangle \qquad \underline{II}\ 1.14$$

Treba uzeti u obzir da se ovde usrednjavanje vrši po bozonskom vakumu. Pošto nadjemo komutator naznačen u II.1.14 tj. komutator para operatora $C^{+}_{i_1 \vec{q}_1} C^{+}_{i_2 \vec{q}_2}$ sa H_B za funkciju Grina $G_{i_1 i_2}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ dobijamo sledeću jednačinu :

$$\left[E-\lambda_{i_1}(\vec{q}_1)-\lambda_{i_2}(\vec{q}_2)\right]G_{i_1 i_2}(\vec{q}_1,\vec{q}_2)=\frac{i}{\pi}-$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\alpha_1\alpha_2}\Big\{\Phi_{\alpha_1\alpha_2 i_2 i_1}(\vec{k}_1\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{K}_1,\vec{q}_2)+$$

$$+\bar{\Phi}_{\alpha_1\alpha_2 i_1 i_2}(\vec{K}_1,\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{k}_1.\vec{q}_1)\Big\}G_{\alpha_1\alpha_2}(\vec{K}_1.\vec{q}_1+\vec{q}_2-\vec{K}_1) \qquad \underline{II}\ 1.15$$

gde je :

$$\Phi_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4}(\vec{K}_1,\vec{K}_2,\vec{K}_3)=$$

$$=\Delta\,\theta_{\alpha_1}\theta_{\alpha_2}\theta_{\alpha_3}\theta_{\alpha_4}+\Delta\,\omega_{\alpha_1}\omega_{\alpha_2}\omega_{\alpha_3}\omega_{\alpha_4}+\frac{1}{2}U_{\vec{K}_3}(\theta_{\alpha_1}\theta_{\alpha_2}\omega_{\alpha_3}\theta_{\alpha_4}+$$

$$+\omega_{\alpha_1}\omega_{\alpha_2}\theta_{\alpha_3}\omega_{\alpha_4})+\frac{1}{2}U_{\vec{K}_1}(\theta_{\alpha_1}\omega_{\alpha_2}\omega_{\alpha_3}\omega_{\alpha_4}+\omega_{\alpha_1}\theta_{\alpha_2}\theta_{\alpha_3}\theta_{\alpha_4})-$$

$$-W_{\vec{K}_1-\vec{K}_3}\theta_{\alpha_1}\omega_{\alpha_2}\theta_{\alpha_3}\omega_{\alpha_4} \qquad \underline{II}\ 1.16$$

Ako u jednačini / II.1.15./ predjemo od talasnih vektora $\vec{q}_1,\vec{q}_2$ i $\vec{K}_1$ na nove talasne vektore $\vec{Q},\vec{q}$ i $\vec{q}'$ i to na sledeći način:

$$\vec{q}_1=\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\ ;\quad \vec{q}_2=\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}\ ;\quad \vec{K}_1=\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\,' \qquad \underline{II}\ 1.17$$

onda funkcija Grina $G_{ij}(\vec{q},\vec{q}_2)$ postaje :

$$G_{ij}(\vec{q}_1,\vec{q}_2)=\sum_{i'j'\vec{q}_3}\langle\langle C_{j'\,\vec{Q}-\vec{q}_3}\,C_{i'\vec{q}_3}\,|\,C^{+}_{i,\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}}\,C^{+}_{j,\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}}\rangle\rangle\equiv$$

$$\equiv\Gamma^{ij}_{\vec{Q}|\vec{q}|} \qquad \underline{II}\ 1.18$$

Pošto operatori $C^{+}_{i},\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}$ $C^{+}_{j},\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}$ komutiraju očigledno je da funkcija Grina ima sledeća svojstva simetrije:

$$\Gamma^{ij}_{\vec{Q}(\vec{q})} = \Gamma^{ij}_{\vec{Q}(-\vec{q})} \qquad \text{za } j=i$$

$$\Gamma^{ji}_{\vec{Q}(\vec{q})} = \Gamma^{ij}_{\vec{Q}(-\vec{q})} \qquad \text{zo } j\neq i \qquad \underline{II}\ 1.19$$

$$i,j=1,2$$

Ako u jednačini II.1.15 izvršimo zamenu II.1.17 i II.1.18, eksplicitno ispišemo funkcije Φ, za funkciju $\Gamma^{ij}_{\vec{Q}(\vec{q})}$ dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$\Big[E-\lambda_i\Big(\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\Big)-\lambda_j\Big(\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}\Big)\Big]\Gamma^{ij}_{\vec{Q}(\vec{q})} = \frac{i}{\pi} -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{i'j'\vec{q}'} 2\Delta(\theta_{i'}\theta_{j'}\theta_i\theta_j+\omega_{i'}\omega_{j'}\omega_i\omega_j)+$$

$$+U_{\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}}(\theta_{i'}\omega_{j'}\omega_i\omega_j+\omega_{i'}\theta_{j'}\theta_i\theta_j)+\frac{1}{2}V_{\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}}(\theta_{i'}\theta_{j'}\omega_i\theta_j+$$

$$+\omega_{i'}\omega_{j'}\theta_i\omega_j)+\frac{1}{2}V_{\frac{\vec{Q}}{2}-\vec{q}}(\theta_{i'}\theta_{j'}\theta_i\omega_j+\omega_{i'}\omega_{j'}\omega_i\theta_j)-$$

$$-W_{\vec{q}+\vec{q}'}\theta_{i'}\omega_{j'}\omega_i\theta_j-W_{\vec{q}-\vec{q}'}\theta_{i'}\omega_{j'}\theta_i\omega_j\Big\}\Gamma^{i'j'}_{\vec{Q}(\vec{q}')} \qquad \underline{II}\ 1.20$$

$$i,j,i',j'=1,2$$

Sistem jednačina II.1.20. pretstavlja sistem nehomogenih integralnih Fredholmovih jednačina sa separabilnim jezgrima i kao takav može se svesti na odgovarajući sistem linearnih algebarskih jednačina. Problem pretstavlja rešavanje determinante algebarskog sistema jednačina. Kao što je poznato / vidi § 3 / izjednačavanje determinante sa nulom daje nam polove funkcije Grina, koji odgovaraju vezanim stanjima bieksitona . U slučaju dvo i trodimenzionog kristala ova jednačina se ne može analitički rešiti, pa prema tome, energije bieksitona možemo naći isključivo numerički. U slučaju jednodimenzione strukture ovakva teškoća se ne pojavljuje, pa ćemo zato rešiti samo ovaj slučaj.

II.§.2. Polovi funkcije Grina za jednodimenzione strukture.

Da bi smo ispitali energije bieksitona za slučaj dve proste jednodimenzione kubne podreštke,poći ćemo od sistema jednačina / II.1.20./. U ovom sistemu Q i q za dati slučaj neće biti vektorske već skalarne veličine. Osim toga možemo pisati :

$$U_k = 2U\cos ka \quad ; \quad W_k = 2W\cos ka \qquad II\ 2.1$$

gde je a konstanta izmedju podrešetki,tj. rastojanje izmedju dva susedna atoma,koji pripadaju različitim pod rešetkama. Ako u/II.1.20./ uzmemo u obzir da se sumira po jednodiemnzionalnim impulsima,onda od sume možemo preći na integral po sledećem pravilu:

$$\frac{1}{N}\sum_{q} = \frac{Na}{2\pi N}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq = \frac{a}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dx \qquad II\ 2.2$$

$$x = aq$$

Uzimajući ovo u obzir a takodje i svojstvo simetrije / /II.1.19/ za funkcije Γ ,posle davanja indeksima i i j u /II.1.20./ sledećih parova vrednosti : $|11|, |12|, |21|$ i $|22|$ dobijamo sledeće sisteme integralnih jednačina:

$$\left(E - 2\Delta - 2UD_Q\cos x\right)\Gamma^{11}_{Q(x)} = \frac{i}{\pi} -$$

$$-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Big\{\left[\Delta + UD_Q\cos y + UD_Q\cos x - W\cos x\cos y\right]\Gamma^{11}_{Qy} +$$

$$+\left[\Delta - UD_Q\cos y + UD_Q\cos x + W\cos x\cos y\right]\Gamma^{22}_{Q(y)}\Big\}dy \qquad II.2.3$$

$$\left(E-2\Delta+2UD_Q\cos x\right)\Gamma_{Q(x)}^{22}=\frac{i}{\pi}-$$

$$-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Big\{\left[\Delta+UD_Q\cos y-UD_Q\cos x+W\cos x\cos y\right]\Gamma_{Q(y)}^{11}+$$

$$+\left[\Delta-VD_Q\cos y-UD_Q\cos x+W\cos x\cos y\right]\Gamma_{Q|y|}\Big\}dy$$

II 2.4

$$\left(E-2\Delta+2F_QU\sin x\right)\Gamma_{Q(x)}^{12}=\frac{i}{\pi}-$$

$$-\frac{1}{2}\int_{-\pi}^{\pi}\Big\{\left[\Delta+UD_Q\cos y-UF_Q\sin y-UF_Q\sin x-W\sin x\sin y\right]\Gamma_{Q(y)}^{12}+$$

$$+\left[\Delta-UD_Q\cos y+UF_Q\sin y-UF_Q\sin x+W\sin x\sin y\right]\Gamma_{Q(y)}^{21}\Big\}dy$$

II 2.5

$$\left(E-2\Delta-2F_QU\sin x\right)\Gamma_{Q(x)}^{21}=\frac{i}{\pi}$$

$$-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Big\{\left[\Delta+UD_Q\cos y-UF_Q\sin y+W\sin x\sin y+UF_Q\sin x\right]\Gamma_{Q(y)}^{12}+$$

$$+\left[\Delta-UD_Q\cos y+UF_Q\sin y+UF_Q\sin x-W\sin x\sin y\right]\Gamma_{Q(y)}^{21}\Big\}dy$$

II 2.6

gde je :

$$D_Q=\cos\frac{Qa}{2}\qquad F_Q=\sin\frac{Qa}{2}\qquad \text{II } 2.7$$

Kao što vidimo, dobili smo dva razdvojena sistema jednačine od kojih /II.2.3./ i /II.2.4./ sadrže u sebi samo funkcije Γ^{11} i Γ^{22} dok /II.2.5/ i /II.2.6/ sadrže samo funkcije $\Gamma^{12}; \Gamma^{21}$

Ako u jednačini /II.2.6./ izvršimo zamenu $x \rightarrow -x$ i uzmemo u obzir da je na osnovu /I.2.19/

$\Gamma_{Q(-x)}^{21}=\Gamma_{(x)}^{12}$ dobijamo tačno jednačinu /II.2.5./

Prema tome jednačine / II.2.5./ i /II.2.6./ nisu dve različite jednačine već jedna ista / pa ćemo u daljem rešavati samo jednu od njih,recimo jednačinu /II.2.5./

Posle prostih transformacija jednačinu /II.2.5./ možemo napisati u sledećem obliku

$$2(F_Q \sin x - \eta)\, \Gamma^{12}_{Q(x)} = \frac{i}{\pi U} - (\mu - F_Q \sin x)\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)}\, dy -$$

$$- D_Q \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)} \cos y\, dy + (F_Q + \nu \sin x)\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)} \sin y\, dy -$$

$$-(\mu - F_Q \sin x)\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{21}_{Q(y)}\, dy + D_Q \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{21}_{Q(y)} \cos y\, dy -$$

$$-(F_Q + \nu \sin x)\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{21}_{Q}(y) \sin y\, dy \qquad \text{II 2.8}$$

Koristeći činjenicu da je $\Gamma^{21}_{Q(-y)} = \Gamma^{12}_{Q(y)}$

vidimo da je :~~x~~

$$\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{21}_{Q(y)}\, dy = -\int_{\pi}^{-\pi} \Gamma^{21}_{Q(-y)}\, dy = -\int_{\pi}^{-\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)}\, dy = \int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)}\, dy$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{21}_{Q(y)} \cos y\, dy = -\int_{\pi}^{-\pi} \Gamma^{21}_{Q(-y)} \cos y\, dy = -\int_{\pi}^{-\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)} \cos y\, dy = \int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)} \cos y\, dy$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{21}_{Q(y)} \sin y\, dy = \int_{\pi}^{-\pi} \Gamma_{Q(-y)} \sin y\, dy = \int_{\pi}^{-\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)} \sin y\, dy = -\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma_{Q(y)} \sin y\, dy$$

pa se / II.2.8/ svodi na :

$$2(F_Q \sin x - \eta)\, \Gamma^{12}_{Q(x)} = \frac{i}{\pi U} - 2(\mu - F_Q \sin x)\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)}\, dy +$$

$$+ 2(F_Q + \nu \sin x)\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma^{12}_{Q(y)} \sin y\, dy \qquad \text{II.2.9}$$

gde je :

$$\eta = \frac{2\Delta - E}{2U} \; ; \quad \mu = \frac{\Delta}{U} \; ; \quad \nu = \frac{W}{U} \qquad \text{II. 2.10}$$

uvodeći oznake :

$$C_{1Q} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma_{Q(y)}^{12}\, dy \quad ; \quad C_{2Q} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Gamma_{Q(y)}^{12} \sin y \, dy \qquad \text{II.2.11}$$

jednačinu /II.2.9./ možemo napisati u obliku:

$$\Gamma_{Q(x)}^{12} = \frac{i}{2\pi U(F_Q \sin x - \eta)} + \frac{F_Q \sin x - \mu}{F_Q \sin x - \eta} C_{1Q} + \frac{\nu \sin x + F_Q}{F_Q \sin x - \eta} C_{2Q} \qquad \text{II 2.12}$$

Ako jednačinu /II.2.12/ pomnožimo sa $\frac{dx}{2\pi}$ i integralno u granicama od $-\pi$ do π po x a zatim istu jednačinu pomnožimo sa $\frac{dx \sin x}{2\pi}$ i integralimo od $-\pi$ do π, za konstante C_{1Q} i C_{2Q} dobijamo sledeći sistem nehomogenih jednačina:

$$C_{1Q}\left\{1 - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{F_Q \sin x - \mu}{F_Q \sin x - \eta}\right\} + C_{2Q}\left\{-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\nu \sin x + F_Q}{F_Q \sin x - \eta}\, dx\right\} = \frac{i}{(2\pi)^2 U}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{F_Q \sin x - \eta}$$

$$C_{1Q} = \left\{-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{F_Q \sin^2 x - \mu \sin x}{F_Q \sin x - \eta}\, dx\right\} + C_{2Q}\left\{1 - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\nu \sin^2 x + F_Q \sin x}{F_Q \sin x - \eta}\right\} = \frac{i}{(2\pi)^2 U}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx \sin x}{F_Q \sin x - \eta}$$

II.2.13

Rešenja ovog sistema su:

$$C_{1Q} = \frac{\mathcal{D}_{1Q}}{\mathcal{D}_Q} \quad ; \quad C_{2Q} = \frac{\mathcal{D}_{2Q}}{\mathcal{D}_Q} \qquad \text{II.2.14}$$

gde je :

$$\mathcal{D}_Q = \begin{vmatrix} 1 - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{F_Q \sin x - \mu}{F_Q \sin x - \eta}\, dx & -\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\nu \sin x + F_Q}{F_Q \sin x - \eta}\, dx \\ -\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{F_Q \sin^2 x - \mu \sin x}{F_Q \sin x - \eta}\, dx & 1 - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\nu \sin^2 x + F_Q \sin x}{F_Q \sin x - \eta}\, dx \end{vmatrix} \qquad \text{II 2.15}$$

$$\mathcal{D}_{1Q} = \begin{vmatrix} \frac{i}{(2\pi)^2 U} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{F_Q \sin x - \eta} & -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{\nu \sin x + F_Q}{F_Q \sin x - \eta} dx \\ \frac{i}{(2\pi)^2 U} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx \sin x}{F_Q \sin x - \eta} & 1 - \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{\nu \sin^2 x + F_Q \sin x}{F_Q \sin x - \eta} dx \end{vmatrix} \qquad \text{II } 2.16$$

$$\mathcal{D}_{2Q} = \begin{vmatrix} 1 - \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{F_Q \sin x - \mu}{F_Q \sin x - \eta} dx & \frac{i}{(2\pi)^2 U} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{F_Q \sin x - \eta} \\ -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{F_Q \sin^2 x - \mu \sin x}{F_Q \sin x - \eta} & \frac{i}{(2\pi)^2 U} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx \sin x}{F_Q \sin x - \eta} \end{vmatrix} \qquad \text{II } 2.17$$

tako da jednačina /II.2.12/ postaje:

$$\Gamma_{Q(x)}^{12} = \frac{i}{2\pi U(F_Q \sin x - \eta)} + \frac{F_Q \sin x - \mu}{F_Q \sin x - \eta} \frac{\mathcal{D}_{1Q}}{\mathcal{D}_Q} + \frac{\nu \sin x + F_Q}{F_Q \sin x - \eta} \frac{\mathcal{D}_{2Q}}{\mathcal{D}_Q} \qquad \text{II } 2.18$$

Polove funkcije Γ_{12} dobijamo, očigledno, iz uslova :

$$F_Q \sin x - \eta = 0 \qquad \text{II } 2.19$$

$$\mathcal{D}_Q = 0 \qquad \text{II } 2.20$$

Uslov: /II.2.19/ svodi se na :

$$E_{12,21} = 2\Delta - 2U \sin \frac{Qa}{2} \sin qa \qquad \text{II } 2.21$$

i ovaj izraz predstavlja sumu energije dva slobodna eksitona od kojih svaki pripada drugoj podrešetci.

Uslov / II.2.20./ svodi se na :

$$\mathcal{E}_{12,21} = 2\Delta + W\left(1 + \frac{U^2}{W^2} \sin^2 \frac{Qa}{2}\right) \qquad \text{II } 2.22$$

i ova energija predstavlja energiju bieksitonakoji je nastao kao vezano stanje dva slobodna eksitona u dve različite podrešetke.

Posle prostih transformacija jednačine/ II.2.3./ i / II.2.4./ mogao se napisati na sledeći način:

$$\Gamma^{11}_{Q(x)} = \frac{-i}{2\pi U(D_Q\cos x+\eta)} + \frac{1}{2}\frac{D_Q\cos x+\mu}{D_Q\cos x+\eta}\bar{C}_{1Q} + \frac{1}{2}\frac{-V\cos x+D_Q}{D_Q\cos x+\eta}\bar{C}_{2Q} +$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{D_Q\cos x+\mu}{D_Q\cos x+\eta}\bar{C}_{3Q} + \frac{1}{2}\frac{V\cos x-D_Q}{D_Q\cos x+\eta}\bar{C}_{4Q} \qquad \text{II } 2.23$$

$$\Gamma^{22}_{Q(x)} = \frac{i}{2\pi U(D_Q\cos x-\eta)} + \frac{1}{2}\frac{D_Q\cos x-\mu}{D_Q\cos x-\eta}\bar{C}_{1Q} + \frac{1}{2}\frac{-V\cos x-D_Q}{D_Q\cos x-\eta}\bar{C}_{2Q} +$$

$$\frac{1}{2}\frac{D_Q\cos x-\mu}{D_Q\cos x-\eta}\bar{C}_{3Q} + \frac{1}{2}\frac{V\cos x+D_Q}{D_Q\cos x-\eta}C_{4Q} \qquad \text{II } 2.24$$

gde je :

$$\bar{C}_{1Q} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Gamma^{11}_{Q(y)}dy \; ; \quad \bar{C}_{2Q} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Gamma^{11}_{Q(y)}\cos y\,dy$$

$$\text{II } 2.25$$

$$\bar{C}_{3Q} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Gamma^{22}_{Q(y)}dy \; ; \quad \bar{C}_{4Q} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Gamma_{Q(y)}\cdot\cos y\,dy$$

Jednačina/ III.2.23/ pomnožićemo sa $\frac{dx}{2\pi}$ i integraliti od $-\pi$ do π, a zatim $\frac{dx\cos x}{2\pi}$ i integraliti od $-\pi$ do π. Zatimćemo to istom uraditi sa jednačinom /II.2.24/. Kao rezultat ovih postupaka za konstante $\bar{C}_{1Q}, \bar{C}_{2Q}, \bar{C}_{3Q}$ i $\bar{C}_{4Q}$ dobijamo sledeći sistem nehomogenih algebarskih jednačina:

$$(J_{11}-1)\bar{C}_{1Q} + J_{22}\bar{C}_{2Q} + J_{11}C_{3Q} - J_{12}C_{4Q} = \varphi_{1Q}$$

$$J_{21}\bar{C}_{1Q} + (J_{22}-1)\bar{C}_{2Q} + J_{21}\bar{C}_{3Q} - J_{22}C_{4Q} = \varphi_{2Q}$$

$$\text{II}.2.26$$

$$J_{31}\bar{C}_{1Q} + J_{32}\bar{C}_{2Q} + (J_{31}-1)\bar{C}_{3Q} - J_{32}\bar{C}_{4Q} = \varphi_{3Q}$$

$$J_{41}\bar{C}_{1Q} + J_{42}C_{2Q} + J_{41}C_{3Q} - (J_{42}+1)C_{4Q} = \varphi_{4Q}$$

gde je :

$$J_{11} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{D_Q \cos x + \mu}{D_Q \cos x + \eta}\, dx \qquad J_{12} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{-\nu \cos x + D_Q}{D_Q \cos x + \eta}\, dx$$

$$J_{21} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{D_Q \cdot \cos^2 x + \mu \cos x}{D_Q \cos x + \eta}\, dx \qquad J_{22} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{-\nu \cos^2 x + D_Q \cos x}{D_Q \cos x + \eta}\, dx$$

$$J_{31} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{D_Q \cos x - \mu}{D_Q \cos x - \eta}\, dx \qquad J_{32} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{-\nu \cos x - D_Q}{D_Q \cos x - \eta}\, dx$$

$$J_{41} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{D_Q \cos^2 x - \mu \cos x}{D_Q \cos x - \eta}\, dx \qquad J_{42} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{-\nu \cos^2 x - D_Q \cos x}{D_Q \cos x - \eta}\, dx$$

$$\varphi_{1Q} = -\frac{i}{(2\pi)^2 U}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{D_Q \cos x + \eta} \qquad \varphi_{2Q} = \frac{-i}{(2\pi)^2 U}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx \cos x}{D_Q \cos x + \eta}$$

$$\varphi_{3Q} = \frac{i}{(2\pi)^2 U}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{D_Q \cos x - \eta} \qquad \varphi_{4Q} = \frac{i}{(2\pi)^2 U}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx \cos x}{D_Q \cos x - \eta}$$

II 2.27

Rešenja ovoga sistema su :

$$\bar{C}_{1Q} = \frac{\bar{\mathcal{D}}_{1Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q}\ ; \quad \bar{C}_{2Q} = \frac{\bar{\mathcal{D}}_{2Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q}\ ; \quad \bar{C}_{3Q} = \frac{\bar{\mathcal{D}}_{3Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q}\ ; \quad \bar{C}_{4Q} = \frac{\bar{\mathcal{D}}_{4Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q} \qquad \text{II 2.28}$$

gde je :

$$\bar{\mathcal{D}}_Q = \begin{vmatrix} J_{11}-1 & J_{12} & J_{11} & -J_{12} \\ J_{21} & J_{22}-1 & J_{21} & -J_{22} \\ J_{31} & J_{32} & J_{31}-1 & -J_{32} \\ J_{41} & J_{42} & J_{41} & -J_{42}-1 \end{vmatrix}$$

$$\bar{\mathcal{D}}_{1Q} = \begin{vmatrix} \varphi_{1Q} & J_{12} & J_{11} & -J_{12} \\ \varphi_{2Q} & J_{22}-1 & J_{21} & -J_{22} \\ \varphi_{3Q} & J_{32} & J_{31}-1 & -J_{32} \\ \varphi_{4Q} & J_{42} & J_{41} & -J_{42}-1 \end{vmatrix} \qquad \bar{\mathcal{D}}_{2Q} = \begin{vmatrix} J_{11}-1 & \varphi_{1Q} & J_{11} & -J_{12} \\ J_{21} & \varphi_{2Q} & J_{21} & -J_{22} \\ J_{31} & \varphi_{3Q} & J_{31}-1 & -J_{32} \\ J_{41} & \varphi_{4Q} & J_{41} & -J_{42}-1 \end{vmatrix}$$

$$\bar{\mathcal{D}}_{4Q} = \begin{vmatrix} J_{11}-1 & J_{12} & J_{11} & \varphi_{1Q} \\ J_{21} & J_{22}-1 & J_{21} & \varphi_{2Q} \\ J_{31} & J_{32} & J_{31}-1 & \varphi_{3Q} \\ J_{41} & J_{42} & J_{41} & \varphi_{4Q} \end{vmatrix} \qquad \bar{\mathcal{D}}_{3Q} = \begin{vmatrix} J_{11}-1 & J_{12} & \varphi_{1Q} & -J_{12} \\ J_{21} & J_{22}-1 & \varphi_{2Q} & -J_{22} \\ J_{31} & J_{32} & \varphi_{3Q} & -J_{32} \\ J_{41} & J_{42} & \varphi_{4Q} & -J_{42}-1 \end{vmatrix}$$

II.2.29

Jednačine /II.2.23/ i /II.2.24/ postaju:

$$\Gamma^{11}_{Q(x)} = \frac{-i}{2\pi U(D_Q \cos x + \eta)} + \frac{1}{2}\frac{D_Q \cos x + \mu}{D_Q \cos x + \eta} \cdot \frac{\bar{\mathcal{D}}_{1Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q} + \frac{1}{2}\frac{-V\cos x + D_Q}{D_Q \cos x + \eta} \cdot \frac{\bar{\mathcal{D}}_{2Q}}{\mathcal{D}_Q} +$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{D_Q \cos x + \mu}{D_Q \cos x + \eta} \cdot \frac{\bar{\mathcal{D}}_{3Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q} + \frac{1}{2}\frac{V\cos x - D_Q}{D_Q \cos x + \eta}\ \frac{\bar{\mathcal{D}}_{4Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q} \qquad \underline{II}\ 2.28$$

$$\Gamma^{22}_{Q(x)} = \frac{i}{2\pi(D_Q \cos x - \eta)} + \frac{D_Q \cos x - \mu}{D_Q \cos x - \eta}\ \frac{\bar{\mathcal{D}}_{1Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q} + \frac{1}{2}\frac{-V\cos x - D_Q}{D_Q \cos x - \eta} \cdot \frac{\bar{\mathcal{D}}_{2Q}}{\mathcal{D}_Q} +$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{D_Q \cos x - \mu}{D_Q \cos x - \eta} \cdot \frac{\bar{\mathcal{D}}_{3Q}}{\bar{\mathcal{D}}_Q} + \frac{1}{2}\frac{V\cos x + D_Q}{D_Q \cos x - \eta} \cdot \frac{\bar{\mathcal{D}}_{4Q}}{\mathcal{D}_Q} \qquad \underline{II}\ 2.29$$

Polovi Grinove funkcije /II.2.28/ dobijaju se iz uslova:

$$D_Q \cos x + \eta = 0 \qquad \underline{II}\ 2.30$$

$$\bar{\mathcal{D}}_Q = 0 \qquad \underline{II}\ 2.31$$

Prvi uslov daje:

$$E_{11} = 2\Delta + 2U \cos \frac{Q_a}{2} \cos qa \qquad \underline{II}\ 2.32$$

i drugi :

$$\mathcal{E}_{11,22} = 2\Delta + W\left(1 + \frac{U^2}{W^2} \cos^2 \frac{Q_a}{2}\right) \qquad \underline{II}.2.33$$

Izraz /II.2.32/ predstavlja sumu energija dva slobodna eksitona koji se prostiru kroz prvu podrešetku. Izraz/II.2.33/ je energijabieksitona koji je nastao vezivanjem dva slobodna eksitona iz prve podrešetke. Pošto/II.2.31/ daje istovremeno i pol Grinove funkcije $\Gamma^{22}_{Q(x)}$ to izraz /II.2.33/predstavlja istovremeno i energiju bieksitona koji je nastao vezivanjem dva slobodna eksitona iz druge podrešetke.

Iz / II.2.29/ vidi se da fukcija Grina $\Gamma^{22}_{Q(x)}$ osim pola /II.2.33./ ima i pol koji se dobija iz uslova:

$$D_Q \cos x - \eta = 0 \qquad \text{II } 2.34$$

što daje :

$$E_{22} = 2\Delta - 2U\cos\frac{Qa}{2}\cos qa \qquad \text{II } 2.35$$

Izraz/ II.2.35/ predstavlja sumu energije dva slobodna eksitona koji se prostiru kroz drugu podrešetku kristala.

II. §. 3. Bieksitonske zone i davidovljevsko razdvajanje bieksitonskih zona.

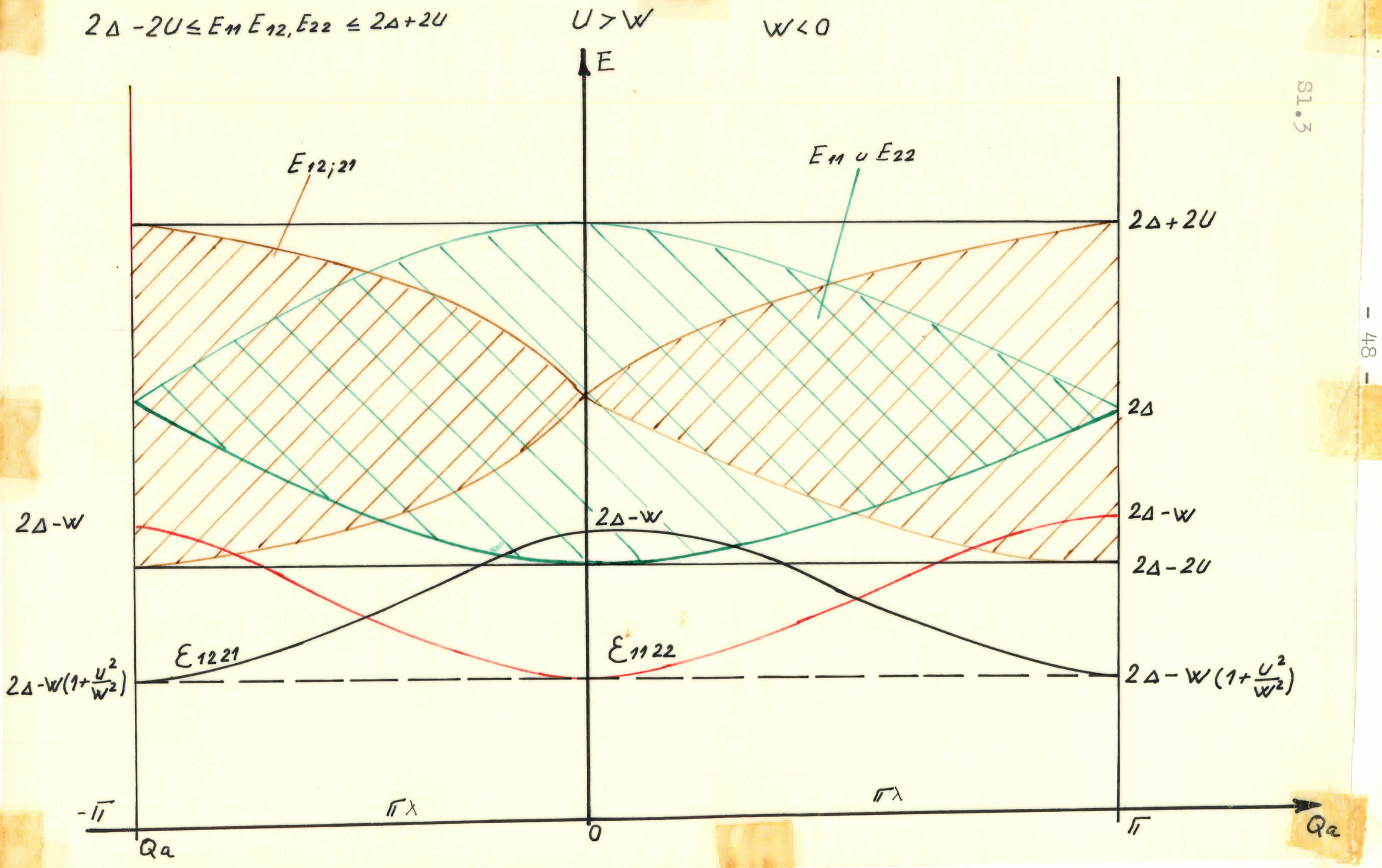
Nadjeni izraz za energije / II.2.21/ i /II.2.22/ predstavljaju, respektivno, kao što smo već videli, sumu energija dva slobodna eksitona, od kojih se jedan prostire kroz jednu podrešetku, a drugi kroz drugu i energijum vezanog stanja dva ovakva eksitona. Kao štosmo ranije razjasnili, energija vezanog stanja mora da bude manja od sume energija dva slobodna eksitona, a to je moguće samo onda ako je, prema formuli II.2.22., $W<0$.

To znači da će do obrazovanja vezanih stanja doći samo onda ako je dinamička interakcija izmedju eksitona /koja je okarakterisana parametrom W / privlačna.

Izrazi /II.2.32./ i /II.2.35./ predstavljaju, respektivno, sumu energija slobodnih eksitona iz prve podrešetke i sumu energija dva slobodna eksitona iz druge podrešetke. Energije vezanih stanja dva eksitona iz prve podrešetke i dva eksitona iz druge podrešetke jednake su i date formulom /II.2.33./ . Energije vezanog stanja biće manje od ~~nule~~ sume energija dve slobodne eksitacije samo onda ako je $W<0$, što znači da i ovi bieksitoni mogu da se obrazuju samo u slučaju privlačne dinamičke interakcije.

Sve dobijene izraze možemo predstaviti grafički u ravni / E, Q / pri čemu se Q menja od $-\frac{\pi}{a}$ do $+\frac{\pi}{a}$

Sl.3


$2\Delta - 2U \leq E_{11} E_{12}, E_{22} \leq 2\Delta + 2U$
$U > W$
$W < 0$
E
$E_{12;21}$
$E_{11} \cup E_{22}$
$2\Delta + 2U$
2Δ
$2\Delta - W$
$2\Delta - W$
$2\Delta - W$
$2\Delta - 2U$
$\mathcal{E}_{1221}$
$\mathcal{E}_{1122}$
$2\Delta - W(1 + \frac{U^2}{W^2})$
$2\Delta - W(1 + \frac{U^2}{W^2})$
$-\pi$
$\pi\lambda$
$\pi\lambda$
0
π
Qa
Qa

Kao što vidimo,vezana stanja dva eksitona raznih tipova 1 i 2 / $\mathcal{E}_{12,21}$ / su rezonantna stanja za sumu energija dva slobodna eksitona tipa 11 i 22 /E_{11} i E_{22} / i to u oblasti malih impulsa. Vezana stanja eksitona tipa 11 i tipa 22 koja imaju iste energije rezonantna su za sumu energija dva slobodna eksitona tipa 1 i tipa 2 i to u oblasti velikih impulsa. Na kraju možemo razmotriti pitanje,kako stoji sa davidovljevskim razdvajanjem zona bieksitona.

Pošto su energije vezanih stanja,bieksitona tipa 11 i tipa 22 jednake tj.

$$\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E}_{22} \equiv \mathcal{E}_{12;21} = 2\Delta + W\left(1 + \frac{U^2}{W^2} \sin^2 \frac{Qa}{2}\right) \qquad \underline{II}\ 3.2$$

to je davidovljevsko razdvajanje zona za ova dva tipa bieksitona ravna nuli.

Energija bieksitona koji se dobijaju vezivanjem eksitona iz jedne i druge podrešetke su takodje medjusobno jednake tj.

$$\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E}_{21} \equiv \mathcal{E}_{12:21} = 2\Delta + W\left(1 + \frac{U^2}{W^2} \sin^2 \frac{Qa}{2}\right) \qquad \underline{II}\ 3.2$$

Ovo znači da je davidovljevsko razdvajanje zona za ovakve bieksitone takodje ravno nuli. Ovaj rezultat je ápriori očigledan,jer je potpuno jasno da je vezivanje eksitona tipa 1 sa eksitonom tipa 2 potpuno iste prirode kao i vezivanje eksitona tipa 2 sa tipom 1.

Očigledno je da davidovljevsko razdvajanje zona postoji samo za bieksitone tipa 11 ili 22 i tipa 12 ili tipa 21. Znači,različito od nule razdvajanje zone dobijamom kao :

$$\delta \mathcal{E}^{12,21}_{11;22} = \mathcal{E}_{11;22} - \mathcal{E}_{12;21} =$$

$$= 2\Delta + W\left(1+\frac{U^2}{W^2}\cos^2\frac{Qa}{2}\right) - 2\Delta - W\left(1+\frac{U^2}{W^2}\sin^2\frac{Qa}{2}\right)$$

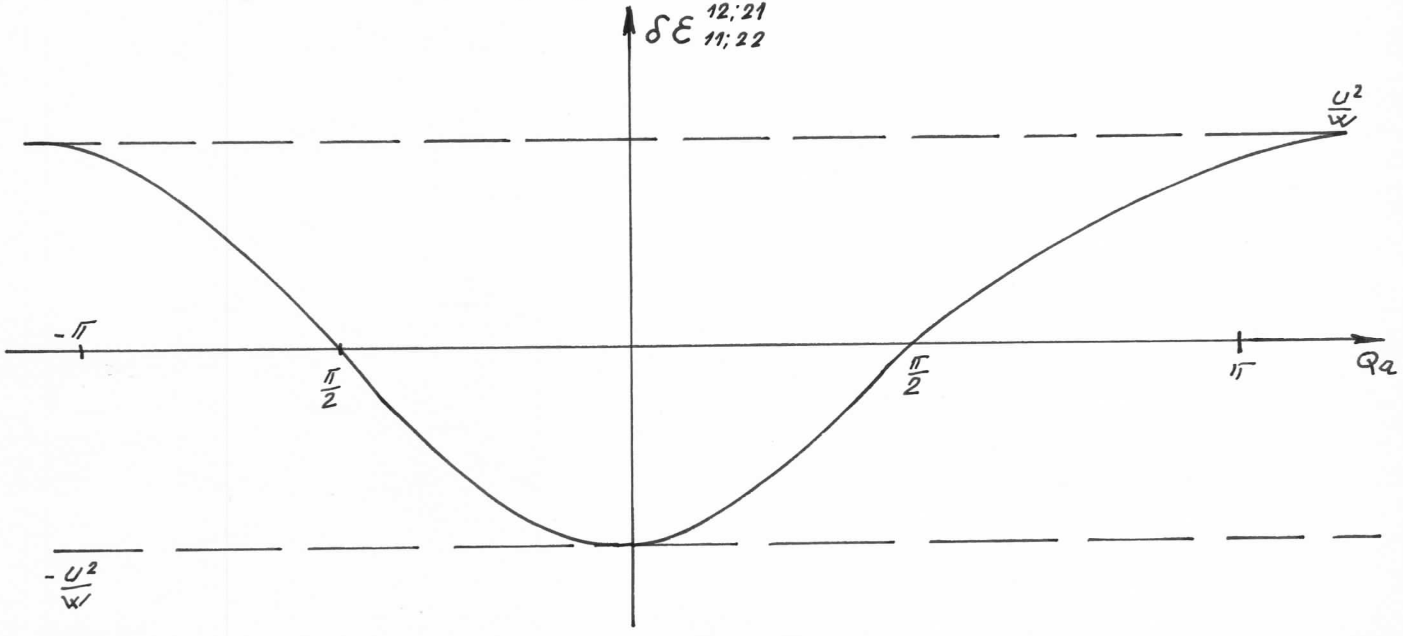
$$= \frac{U^2}{W}\left(\cos^2\frac{Qa}{2} - \sin^2\frac{Qa}{2}\right)$$

konačno :

$$\delta \mathcal{E}^{12,21}_{11,22} = \frac{U^2}{W}\cos Qa \qquad \text{II } 3.3$$

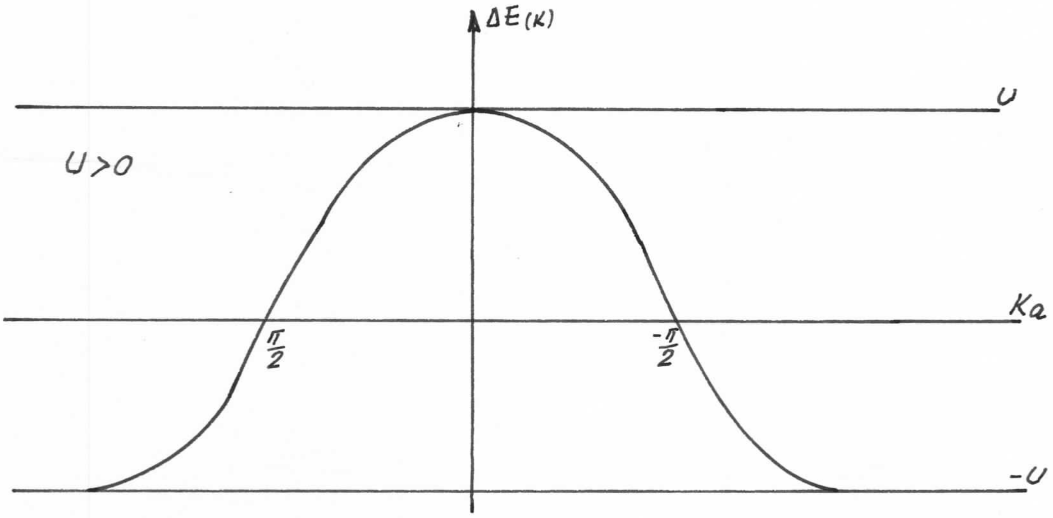
Pošto je $W<0$, to znači da je razdvajanje zona u oblasti malih impulsa $0 \leq Qa < \frac{\pi}{2}$ negativna veličina, dok je u oblasti velikih impulsa $\frac{\pi}{2} < Qa \leq \pi$ davidovljevsko razdvajanje zona pozitivna veličina.

Na sredini prve Briluenove zone $Qa = \frac{\pi}{2}$ davidovljvesko razdvajanje zona je ravno nuli.

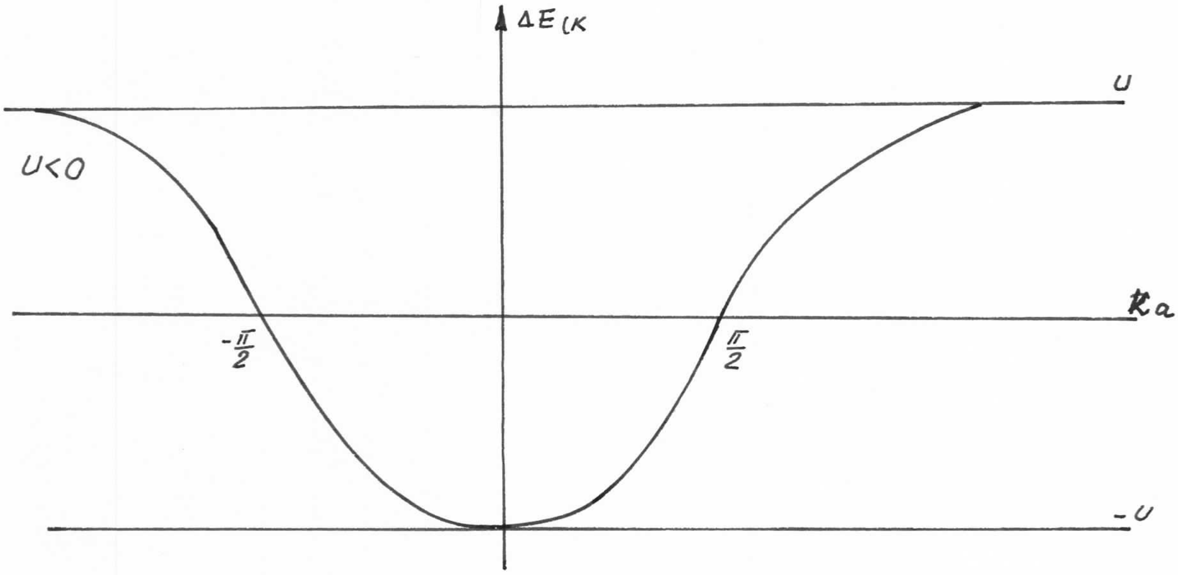


sl. 4

Ako ovaj izraz /II.3.3/ uporedimo sa izrazom /I.2.25/ koji predstavlja davidovljevsko razdvajanje zona za slobodne eksitone/ vidi slike 5 i 6 /



sl. 5



sl. 6

onda primećujemo da su u slučaju $U<0$ razdvajanja bieksitonskih zona i razdvajanja slobodnih eksitonskih zona istoga tipa. Takodje je jasno da je za $|U|>|W|$ razdvajanje bieksitonskih zona veće nego razdvajanje eksitonskih zona, dok u slučaju $|U|<|W|$ izrazitije je razdvajanje zona slobodnih eksitona.

Zaključak :

Za kristal sa dve podrešetke koje se uzajamno prožimaju tako da su za dati molekul jedne podrešetke najbliži susedi molekuli druge podrešetke ispitana su vezana stanja dve optičke eksitacije-bieksitoni. U računu se pretpostavilo da su obe podrešetke proste kubne / / i radilo se u aproksimaciji najbližih suseda. Osim toga račun je doveden do kraja za slučaj dve jednodimenzionalne podrešetke koje se uzajamno prožimaju. Za višedimenzione strukture date su samo opšte formule čija konačna rešenjamogu da se nadju samo numerički.

Za dobijeni slučaj dobijeni su sledeći rezultati:

a- bieksiton postoji za sve moguće vrednosti talasnog vektora $\vec{Q}$

b- postoje samo dve različite bieksitonske zone i to zona vezanih eksitona iz jedne podrešetke i zona vezanih eksitona iz dve razne podrešetke.

c-bieksitoni mogu da egzistiraju samo u slučaju kada je koeficijent dinamične interakcije negativan tj.kada je dinamička interakcijaprivlačne.Ovaj rezultat je i fizički očigledan,jer su uslovi zab obrazovanje vezanih stanja bolji,kada se eksitoni privlače nego kada se odbijaju.

d- Davidovljevsko razdvajanje bieksitonih zona ponaša se na sličan način kao i davidovljevsko razdvajanje slobodnih eksitonskih zona u slučaju da je rezonantna interakcija negativna. Ako je rezonantna interakcija pozitivna onda razdvajanje zona slobodnih eksitona i razdvajanja zona za bieksitone imaju suprotan znak,tj. Kada razdvajanje slobodnih zona ima minimum razdvajanje bieksitonskih zona ima maksimum i obrnuto.

MATEMATIČKI DODATAK

1- Elementi teorije dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina

2 - Integralne jednačine sa separabilnim jezgrima

1- Elementi teorije dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina.

Funkcija Grina za dva operatora $A(\vec{r},t), B(\vec{r}',t')$, definiše se na sledeći način:

$$\langle\langle A(\vec{r},t)/\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t), B(\vec{r}',t')]\rangle \qquad A\,1.1$$

gde simbol $\langle\langle\cdots\cdots\rangle\rangle$ označava uredjivanje operatora po vremenu i znaku srednje vrednosti po Gibs-ovom ansamblu tj.

$$\langle F\rangle = \frac{Sp\,\hat{F}e^{-\beta\hat{H}}}{Sp\,e^{-\beta\hat{H}}}$$

$\beta = K_{\text{б}}T$; $\hat{H}$ -hamiltonijan sistem

a $\theta(t-t')$ - je Hevisajdova funkcija, definisana na sledeći način:

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & za\ t > t' \\ 0 & za\ t < t' \end{cases} \qquad A\,1.2$$

Diferencirajući /A.1.1./ jednom po t a drugi put po t' i uzimajući u obzir da je izvod Hevisajdove funkcije δ funkcija dobijamo, respektivno:

$$\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)/B(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t), \hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle + $$
$$+\ \theta(t-t')\langle[\frac{d}{dt}\hat{A}(\vec{r},t), \hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

$$\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)/\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t), \hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle + $$
$$+\ \theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t), \frac{d}{dt'}\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

Na osnovu Hajzenbergovih jednačina kretanja imamo :

$$i\frac{dA(\vec{r},t)}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}]_t \quad ; \quad i\frac{d\hat{B}(\vec{r}',t')}{dt'} = [\hat{B}, \hat{H}]_{t'}$$

pa se poslednje dve jenadčine svode na:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t), B(\vec{r}',t')]\rangle + \theta(t-t')\langle[[\hat{A},\hat{H}]_t, \hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle \qquad A.1.3$$

$$i\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -i\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t), B(\vec{r}',t)]\rangle + \theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),[\hat{B},\hat{H}]_{t'}\rangle \qquad A.1.4$$

izrazi

$$\theta(t-t')<[[\hat{A},\hat{H}]_t, \hat{B}(\vec{r}',t')]>$$

i

$$\theta(t-t')<[\hat{A}(\vec{r},t), [\hat{B},\hat{H}]_{t'}]>$$

predstavljaju na osnovu polazne definicije /A.1.1./ neke nove funkcije Grina,tako da jednačine /A.1.3./ i / A.1.4./ glase :

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)/\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')K(\vec{r}-\vec{r}') + \langle\langle[\hat{A},\hat{H}]_{\vec{r},t}/\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle \qquad A.1.5$$

$$i\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)/\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -i\delta(t-t')K(\vec{r}-\vec{r}') + \langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)/[\hat{B},\hat{H}]_{\vec{r}',t'}\rangle\rangle \qquad A.1.6$$

gde je:

$$K(\vec{r}-\vec{r}') = \langle[\hat{A}(\vec{r},t), \hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle \qquad A.1.7$$

Ako izvršimo Furije transformacije :

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t) | \hat{B}(\vec{r}',t') \rangle\rangle \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{p}\, dE \langle\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle_{E,\vec{p}} \times$$

$$\times e^{i\bar{p}(\vec{r}-\vec{r}') - iE(t-t')}$$

$$\langle\langle [\hat{A},\hat{H}]_{\vec{r},t} | \hat{B}(\vec{r}',t') \rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{p}\, dE \langle\langle [\hat{A},\hat{H}] | \hat{B} \rangle\rangle_{E,\vec{p}} \times$$

$$\times e^{i\vec{p}(\vec{r}-\bar{r}') - iE(t-t')}$$

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t) | [\hat{B},\hat{H}]_{\vec{r}',t'} \rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{p}\, dE \langle\langle \hat{A} | [\hat{B},\hat{H}] \rangle\rangle_{E,\vec{p}} \times$$

$$\times e^{i\vec{p}(\vec{r}-\bar{r}') - iE(t-t')}$$

$$K(\vec{r}-\bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{p}\, K(\vec{p})\, e^{i\vec{p}(\vec{r}-\bar{r}')}$$

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE\, e^{iE(t-t')}$$

i ovo uvrstimo u /A.1.5/ i /A.1.6/ dobijamo osnovni sistem jednačina za funkcije Grina u obliku:

$$E \langle\langle \hat{A} / \hat{B} \rangle\rangle_{E,\vec{p}} = \frac{i}{2\pi} K(\vec{p}) + \langle\langle [\hat{A},\hat{H}] | \hat{B} \rangle\rangle_{E,\vec{p}} \quad A.1.7$$

$$E \langle\langle \hat{A} / \hat{B} \rangle\rangle_{E,\vec{p}} = \frac{i}{2\pi} K(\vec{p}) - \langle\langle \hat{A} / [\hat{B},\hat{H}] \rangle\rangle_{E,\vec{p}} \quad A.1.8$$

U ovim jednačinama $\vec{p}$ predstavlja impuls. U praksi se može koristiti ili jednačina /A.1.7/ ili jednačina /A.1.8/, a nekada je zgodno kombinovati obadve. Sam način rešavanja sastoji se obično u tome da se funkcija Grina koja figuriše na desnoj strani jednačine/ A.1.7/ nekom opravdanom aproksimacijom izrazi preko funkcije koja figuriše na levoj strani jednačine/ A.1.7./ i da se na taj način u jednačini pojavi samo jedna funkcija Grina po kojoj se može jednačina rešiti:

Realni deo pola funkcije Grina $\langle\langle \hat{A}/\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}$ u E ravni predstavlja energiju elementarnih ekscitacija, a imaginarni deo pola u kompleksnoj ravni pretstavlja recipročno vreme života elementarnih ekscitacija.

Od interesa je da se definiše spektralna intenzivnost funkcije Grina $\langle\langle \hat{A}/\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}$ i ona ima oblik:

$$\mathcal{J}(\vec{p},E) = \frac{K(\vec{p})}{e^{E/\theta}-1}\,\delta(E-E_{\vec{k}}) \qquad A.I.9$$

gde je:

$$\theta = K_{Б}T$$

$E_{\vec{k}}$ - realni deo pola funkcije Grina.

Preko spektralne intenzivnosti može se naći srednja vrednost proizvoda dva operatora po Gibs-ovom ansamblu i to na sledeći način:

$$\langle \hat{B}\hat{A}\rangle = \frac{Sp\,\hat{B}\hat{A}e^{-\beta\hat{H}}}{Sp\,e^{-\beta\hat{H}}} = \int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{J}(\vec{p},E)\,dE = \frac{K(\vec{p})}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\theta}}-1} \qquad A.1.10$$

Formula / A.1.10./ omogućava nam da bilo kakav problem koji rešavamo metodom funkcija Grina rešimo u zatvorenoj formi,tj. pored poznavanja energije elementarnih ekscitaci i njihovog vremena života, mi na osnovu formule / A.1.10./ regulišemo i pitanje statistike elementarnih eksitacija.

A. §. 2. Integralne jednačine sa separabilnim jezgrima

Opšta Fredholmova jednačina druge vrste ima sledeći oblik:

$$U_{(x)} - \lambda \int_{\Omega} K(x,t)\, U_{(t)}\, dt = f_{(x)} \qquad A.2.1$$

gde je uopšten slučaj:

$$x \equiv x_1, x_2 \dots x_n \qquad t \equiv t_1, t_2 \dots t_N$$

i Ω - neka oblast u N - dimenzionalnom prostoru. Diferencijali dx i dt treba svhatiti kao elemente zapremine ovog N dimenzionalnog prostora tj.

$$dx = dx_1 \cdot dx_2 \dots dx_N$$

$$dt = dt_1 \cdot dt_2 \dots dt_N$$

Funkcija U /x/ je nepoznata funckija koju treba naći a f /x/ je zadata funkcija. λ je u opštem slučaju kompleksan broj. Funkcija $K(x,t)$ naziva se jezgro diferencijabilne jednačine. Jednačina /A.2.1./ je Fredholmova ako su u oblasti Ω funkcije $K(x,t)$ i $f(x)$ po modulu kvadratno integrabilne tj.

$$\iint_{\Omega\,\Omega} dx\,dt\,[K_{(x,t)}]^2 < \infty$$

$$\int_{\Omega} |f_{(x)}|\, dx < \infty$$

Naročito interesantan slučaj kada je jezgro integralne jednačine $K(x,t)$ separabilna funkcija tj.kada se ona može napisati u obliku:

$$K_{(x,t)} = \sum_{s=1}^{L} a_{s(x)}\, b_{s}(t) \qquad A.2.2$$

gde su $a_{s(x)}$ i $b_{s(t)}$ funkcije jedna od argumenta x a druga od argumenta t. Tada jednačina/A.2.1./ postaje:

$$U(x) - \lambda \int_{\Omega} dt \sum_{s=1}^{L} a_{s(x)} b_{s(t)} U(t) = f(x) \qquad A.2.3$$

što se dalje može pisati :

$$U(x) - \lambda \sum_{s=1}^{L} a_{s(x)} \int_{\Omega} dt\, b_{s(t)} U(t) = f(x) \qquad A.2.4$$

Pošto je Ω oblast sa konstantnim granicama integrali $\int_{\Omega} dt\, b_{s(t)} U(t)$ su konstante koje zavise od indeksa s, pa se /A.2.4/ može napisati u obliku

$$U(x) - \lambda \sum_{s=1}^{L} C_s a_s(x) = f(x) \qquad A.2.4$$

gde je:

$$C_s = \int_{\Omega} dt\, b_s(t) U(t) \qquad s = 1, 2, 3 \cdots\cdots L$$

Množeći/A.2.4./ sa $b'_{s(x)}$ i integraleći po oblasti~~xx~~ Ω dobijamo:

$$\int_{\Omega} dx\, b_{s'(x)} U(x) - \lambda \sum_{s=1}^{L} C_s \int_{\Omega} dx\, a_{s(x)} b_{s'(x)} = \int_{\Omega} dx\, b_{s'(x)} f(x) \qquad A.2.6$$

što se s obzirom na /A.2.5/ i posle uvodjenja oznaka

$$M_{s's} = \int_{\Omega} dx\, a_{s(x)} b_{s'(x)} dx \quad ; \quad \Phi_{s'} = \int_{\Omega} dx\, b_{s'(x)} f(x) \qquad A.2.7$$

može napisati kao sistem linearnih algebarskih jednačina po nepoznatim konstantama C_s :

$$C_{s'} - \lambda \sum_{s=1}^{L} C_s M_{s's} = \phi_{s'} \qquad A.2.8$$

$$s' = 1, 2, 3 \cdots\cdots L$$

U razvijenom obliku sistem /A.2.8/ se može napisati:

$$\begin{array}{l} C_1(1-\lambda M_{11}) - C_2 \lambda M_{12} - C_3 \lambda M_{13} \cdots\cdots - C_L \lambda M_{1L} = \phi_1 \\ -C_1 \lambda M_{21} + C_2(1-\lambda M_{22}) - C_3 \lambda M_{23} \cdots - C_L \lambda M_{2L} = \phi_2 \\ \vdots \\ -C_1 \lambda M_{L1} - C_2 \lambda M_{L2} - C_2 \lambda M_{L3} \cdots\cdots + C_L(1-\lambda M_{LL}) = \phi_L \end{array} \qquad A.2.9$$

Pošto sve matrične elemente $M_{s's}$ i brojeve $\phi_{s'}$ poznajemo / vidi formulu A.2.7./ treba rešiti sistem/A.2.9./ po nepoznatim konstantama C_s , kojih ima L. Broj L naziva se stepenom separabilnosti jezgra i što je on veći i sistem jednačina je komplikovaniji za rešavanje.

Kada se nadju konstante C_s jednačina A.2.3. je rešena i njeno rešenje ima oblik :

$$U(x) = f(x) + \sum_{s=1}^{t} a(x) C_s =$$

$$= f(x) + C_1 a_1(x) + C_2 a_2(x) + C_3 a_3(x) + \cdots C_L a_L(x)$$

Na isti način možemo rešavati i sistem integralnih jednačina ako su sva jezgra sistema separabilna.

LITERATURA

[1] И. Френкель: Phys. Rev. 37, 17 [1931]

[2] R. E. Peierls: Ann. Phys. 13 (5), 905 [1932]

[3] G. H. Wannier: Phys. Rev. 52, 191 [1937]

[4] N. F. Mott: Trans. Farod. Soc. 34, 500 [1938]

[5] А. С. Давыдов: УФН 82, 393 [1964]

[6] В. М. Агранович: Теория экситонов" Наука, Москва 1968

[7] А. С. Давыдов: „Теория молекулярных экситонов",
Наука, Москва [1968]

[8] С. В. Тябликов: Методы квантовой теории
магнетизма" Наука, Москва [1965]

[9] M. Wortis: Phys. Rev. 132, 85 (1963)

[10] D. J. Lolović, B. S. Tošić, J. B. Vujaklija, R. B. Žanula
Nuovo Cimento 68B, 75 (1970)

[11] Ž. Ivezić, B. S. Tošić, F. R. Vukajlović, R. B. Žanula
Phys. Stat. Sol. 51, K 133 (1972)