U N I V E R Z I T E T U N O V O M S A D U

P R I R O D N O-M A T E M A T I Č K I F A K U L T E T

Zora N.Zorić-Subić

BOZE KONDENZACIJA U SISTEMU POLARITONA

D i p l o m s k i r a d

NOVI SAD 1974

Najiskrenije se zahvaljujem profesoru dr.Bratislavu S.Tošiću na pomoći i sugestijama koje mi je pružio pri izradi ovog rada.

S A D R Ž A J

U V O D

Predmet ovog diplomskog rada je da se ispita mogućnost Boze kondenzacije u sistemu polaritona,koji predstavljaju realne optičke ekscitacije u kondenzovanim sredinama. Do sada je ispitivana Boze kondenzacija u sistemu Frenkelovih eksitona i u sistemu eksitona Vanije-Mota.Kako su polaritoni bliži realnoj slici optički pobudjenog kristala,očigledno je da analiza jednog ovakvog problema ima veći praktični značaj.

I OPTIČKA POBUDJENJA U MOLEKULARNIM KRISTALIMA

I1. Frenkelovi eksitoni

Prve teorije optičkih pobudjenja u kristalima dali su Frenkel i Pajersl za molekularne kristale a Vanije i Mot za poluprovodnike. Ovakva pobudjenja,koja su indukovana svetlošću nazivaju se eksitoni. Eksitoni u molekularnim kristalima zovu se Frenkelovi eksitoni,dok eksitoni u poluprovodnicima nose naziv Vanije-Mota.U energetskom smislu oba pomenuta tipa eksitona su veoma slični,jer im je energija reda veličine 3-5 ev tj.reda veličine vidljive svetlosti koja ih indukuje.

Bitna razlika izmedju ova dva tipa eksitona je u veličini njihovog radijusa,ukoliko ih shvatimo kao kvazičestice svernog oblika. Frenkelovi eksitoni imaju mali radijus reda veličine nekoliko angstrema,dok radijus eksitona Vanije-Mota može da bude i nekoliko mikrona.

Eksiton Vanije-Mota nastaje tako što svetlost iz popunjene elektronske zone u poluprovodniku izbaci jedan elektron u provodnu zonu. To znači da se u popunjenoj zoni pojavljuje ,,šupljina,, koja se ponaša kao pozitivno naelektrisanje,dok je elektron u provodnoj zoni negativno naelektrisan.Ova dva raznoimena naelektrisanja privlače se Kulonovom silom i dok je ona dovoljno jaka da ih drži vezane u poluprovodniku ne teče struja,već se ovaj vezani kompleks elektron-,,šupljina,, ponaša kao neutralna celina.Ovaj neutralni kompleks pomera se kroz kristal kao neki talas / kvazičestica/ i taj talas naziva se eksiton Vanije-Mota.U slučaju raskidanja Kulonovskih veza i razdvajanja ,,šupljine,, i elektrona eksiton Vanije-Mota prestaje da postoji, elektron i ,,šupljina,, počinju da se kreću nezavisno jedno od drugog i kroz poluprovodnik teče struja,u provodnoj zoni struja elektrona a u popunjenoj struja ,,šupljina,, .

Kod Frenkelovih eksitona svetlost takodje stvara elektron i ,,šupljinu,, ali ovaj neutralni kompleks ostaje na samom molekulu.Otuda eksitoni Frenkela imaju mali radijus.To sa druge strane neznači da ekscitacija jednog molekula ostaje lokalizovana na samom molekulu.Kad se jedan molekul u kristalu ekscitira to odmah izaziva promenu matričnih elemenata interakcije izmedju molekula i ekscitacija,usled ovog prelazi na sledeći molekul tako da se posle izvesnog vremena prenese na sve molekule kristala.Ovakav talas pobudjenja naziva se Frenkelov eksiton.

Frenkelovi eksitoni najčešće se javljaju u molekularnim kristalima.U molekularne kristale spadaju:antracen,naftalin,benzol u čvrstom stanju i plemeniti gasovi takodje u čvrstom stanju.Molekuli ovakvih kristala su jako izraženi dipoli i zbog toga izmedju njih deluju sile dipol-dipolnog tipa.Potencijal dipol-dipolne interakcije izmedju molekula ima oblik:

$$V_{\vec{n}\vec{m}} = e^2 \frac{\vec{r}_{\vec{n}}\,\vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{n}-\vec{m}|^3} - 3e^2 \frac{[\vec{r}_{\vec{n}}\cdot(\vec{n}-\vec{m})][\vec{r}_{\vec{m}}\cdot(\vec{n}-\vec{m})]}{|\vec{n}-\vec{m}|^5} \qquad I1.1.$$

gde je e-naelektrisanje elektrona, $\vec{n},\vec{m}$ - vektori kristalne rešetke a $\vec{r}_{\vec{n}}$ $\vec{r}_{\vec{m}}$ - vektori dipola molekula na mestu $\vec{n}$ i $\vec{m}$ u kristalnoj rešetci. Kao što vidimo dipol-dipolna interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja izmedju molekula.Pored toga ova interakcija ima dva dela koja su bitna i različita.Prvi deo zavisi samo od intenziteta rastojanja izmedju molekula i ovaj deo se naziva analitički deo dipol-dipolne interakcije.Drugi deo zavisi od inteziteta rastojanja i od uglova koje vektori-dipoli zaklapaju sa rastojanjem $\vec{n}$ i $\vec{m}$ i naziva se neanalitički deo dipol-dipolne interakcije.Ovaj naziv ,,neanalitički,, došao je usled tog što Furije lik ovog dela interakcije zavisi od pravca prostiranja eksitona,tako da za svaki pravac prostiranja eksiton ima drugačiji zakon disperzije.Često se u računima iz raznoraznih razloga neanalitički deo zakona disperzije odbacuje i eksitoni dobijeni u ovakvoj aproksimaciji nazivaju se mehanički eksitoni. Svetlost koja indukuje eksiton u molekulu može da izazove dva efekta. Prvi efekat je promena stanja elektrona u molekulu a drugi efekat sastoji se u promeni stanja unutrašnjih molekulskih vibracija. Ove druge promene do kojih dovodi svetlost manjih energija /infracrvena svetlost/ kolektivizuju se u kristalu i ovakve kolektivne ekscitacije ponekad se nazivaju eksitoni Frenkela a češće vibronima. Dalja istraživanja biće usmerena isključivo na čiste eksitone Frenkela tj. na one eksitone koji nastaju usled promene stanja elektrona u individualnim molekulima.

Ako se ograničimo samo na ovaj slučaj onda hamiltonijan molekularnog kristala u odnosu na proces optičkih pobudjivanja njegovog elektronskog podsistema možemo da posmatramo kao hamiltonijan sa dvočestičnim fermionskim interakcijama. U reprezentaciji druge kvantizacije ovakav hamiltonijan ima oblik:

$$H=\sum_{\vec{n}f} E_{\vec{n}f}\, a^{+}_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}f} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ f_1f_2f_3f_4}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2;f_3f_4)\, a^{+}_{\vec{n}f_1}\, a^{+}_{\vec{m}f_2}\, a_{\vec{m}f_3}\, a_{\vec{n}f_4} \qquad I1.2.$$

gde $\vec{n}$, $\vec{m}$ označavaju čvorove rešetke, f, f_1, f_2, f_3, f_4, pretstavljaju skupove kvantnih brojeva koji karakterišu stanje elektrona, $E_{\vec{n}f}$ su energije elektrona u stanju f a $V_{\vec{n}\vec{m}}\,/\,f_1 f_2; f_3 f_4\,/$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije po svojstvenim stanjima elektrona u izolovanom molekulu. Operatori $a^{+}_{\vec{n}f}$ i $a_{\vec{n}f}$ kreiraju, odnosno anihiliraju elektron na čvoru $\vec{n}$ u stanju f. Ako sa $H_{\vec{n}}$ označimo hamiltonijan molekula na mestu $\vec{n}$, onda njegov svojstven problem možemo zapisati kao:

$$H_{\vec{n}}\, \varphi^{f}_{\vec{n}} = E^{f}_{\vec{n}}\, \varphi^{f}_{\vec{n}} \qquad I1.3.$$

na osnovu ovog vidimo da su $E^{f}_{\vec{n}}$ energije izolovanog molekula, dok su funkcije $\varphi^{f}_{\vec{n}}$ svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula. Matrični element interakcije dva molekula sa raznim nivoima $f_1\, f_2\, f_3\, f_4$ ima oblik

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2;f_3f_4) = \int \varphi^{*f_1}_{\vec{n}}\, \varphi^{*f_2}_{\vec{m}}\, V_{\vec{n}\vec{m}}\, \varphi^{f_3}_{\vec{m}}\, \varphi^{f_4}_{\vec{n}}\, d\tau_{\vec{n}}\, d\tau_{\vec{m}} \qquad I1.4.$$

gde $d\tau_{\vec{n}}, d\tau_{\vec{m}}$ pretstavljaju elemente zapremine prostora koji zauzimaju molekule na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$.Talasne funkcije φ jako brzo opadaju sa rastojanjem pa se integral / Il.4./ može shvatiti bez velike pogreške kao integral po beskonačnoj zapremini.

Pri daljoj analizi smatraćemo da elektron u molekulu može da se nadje samo u dva stanja,osnovnom ,,0,, i pobudjenom f.Ovakva šema naziva se šema sa dva nivoa i ona je opravdana ili u slučaju kada kristal pobudjujemo monohromatskim fotonima ili ako fotoni nisu monohromatski,šema je opravdana ako su ostali mogući nivoi energetski jako različiti od nivoa f.

Razmatrati hamiltonijan / Il.2./ kao elektronski hamiltonijan sa dvočestičnim interakcijama nije zgodno ni sa matematičke tačke gledišta a ni sa fizičke tačke gledišta,jer fizički posmatrano,eksiton nije pobudjen elektron već kvant pobudjenja molekula kristala.Zbog toga se umesto Fermi operatora $a_{\vec{n}f}$ uvode novi operatori $P_{\vec{n}}$ i to na sledeći način

$$P^{+}_{\vec{n}} = a^{+}_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}0} \qquad P_{\vec{n}} = a^{+}_{\vec{n}0}\, a_{\vec{n}f} \qquad I1.5$$

Fizički smisao novo uvedenih operatora je očigledan.Prema gornjoj definiciji operator $P^{+}_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome je nestao jedan elektron u osnovnom stanju a ,,rodio,, se u pobudjenom stanju f.Prema tome operator $P^{+}_{\vec{n}}$ kreira kvant pobudjenja sa energijom $E_{\vec{n}f}-E_{\vec{n}0}$.Operator $P_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome je iščezao elektron u pobudjenom stanju f a ,,rodio,, se u osnovnom stanju ,,0,,.Prema tome operator $P_{\vec{n}}$ uništava/anihilira/ kvant pobudjenja sa energijom $E_{\vec{n}f}-E_{\vec{n}0}$.

Operatori $P_{\vec{n}}$ i $P^{+}_{\vec{n}}$ nemaju fermionske komutacione relacije a ni bozonske i sa statističke tačke gledišta pretstavljaju sredinu izmedju Boze i Fermi operatora.Ovakvi operatori nazivaju se Pauli operatori. Komutacione relacije za Pauli operatore možemo izvesti na osnovu komutacionih relacija za Fermi operatore uz jedan dopunski uslov koji ćemo detaljnije objasniti.Ako je elektronu dopušteno da zauzima svega dva stanja ,,o,, i f onda zbog Paulijevog principa za svaki čvor rešetke kompletan fermionski prostor izgleda ovako

$$|0_o\ 0_f> \quad |1_o\ 1_f> \qquad I1.6.$$

$$|1_o\ 0_f> \quad |0_o\ 1_f> \qquad I1.7.$$

Obzirom na definiciju Pauli operatora /Il.5./ lako se vidi da su oni identički ravni nuli u podprostoru /Il.6./ što znači da ovaj podprostor ne može uticati na fizičke karakteristike sistema,pa ga isključujemo iz daljih razmatranja.U podprostoru /Il.7./ Pauli operatori nisu ravni nuli i što je još važnije,delujući na funkcije iz ovog podprostora oni daju funkcije iz tog podprostora pa je zbog toga isključivanje podprostora /Il.6./ opravdano.Takodje je očigledno da u podprostoru /Il.7./ važi uslov:

$$a^+_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}f} + a^+_{\vec{n}o}\, a_{\vec{n}o} = 1 \qquad I1.8.$$

Kombinovanjem ovog uslova sa poznatim komutacionim relacijama za Fermi operatore,za Pauli operatore /Il.5./ dobijamo sledeće komutacione zakone:

$$\begin{aligned}
&[P_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = (1 - 2P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}})\,\delta_{\vec{n}\vec{m}} \\
&[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P^+_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = 0 \quad m \neq n \\
&P^2_{\vec{n}} = P^{+2}_{\vec{n}} = 0 \\
&P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = a^+_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}f} = 0 \ \text{ ili } \ 1
\end{aligned} \qquad I1.9.$$

Odavde se vidi da se za jedan čvor rešetke Pauli operatori ponašaju kao Fermi operatori dok se za različite čvorove rešetke ponašaju kao Boze operatori.

Ako u hamiltonijanu /Il.2./ uzmemo u obzir činjenicu da indeksi f, f_1, f_2, f_3, f_4 mogu uzimati samo dve vrednosti 0 i f, iskoristimo definiciju Pauli operatora i njihove komutacione relacije dobijamo hamiltonijan sistema u paulionskoj reprezentaciji u obliku

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \tilde{\alpha}_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} \left(P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}}^{+} + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \right) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{m}}^{+} P_{\vec{m}} P_{\vec{n}} \qquad II.10.$$

oznake su sledeće:

$$\mathcal{E}_0 = N\left[E_0 + \frac{1}{2} V_0(00;00)\right]$$

$$\Delta = E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}0} - V_0(00;00) + \frac{1}{2} V_0(f0;0f) + \frac{1}{2} V_0(0f;f0)$$

$$2\tilde{\alpha}_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;f0) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0f;0f)$$

$$\beta_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(ff;00) = V_{\vec{n}\vec{m}}(00;ff)$$

$$2\gamma_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(ff;ff) + V_{\vec{n}\vec{m}}(00;00) - V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;0f) - V_{\vec{n}\vec{m}}(0f;f0)$$

$$V_0(f_1, f_2, f_3, f_4) = \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1, f_2, f_3, f_4) \qquad II.11.$$

Pri dobijanju hamiltonijana/Il.lo./ iskorišćena je činjenica da se molekuli medjusobno ne razlikuju pa $E_{\vec{n}f}$ i $E_{\vec{n}0}$ ne zavise od indeksa rešetke $\vec{n}$. Osim toga pretpostavljeno je da kristal ima centar inverzije i on se poklapa sa centrom inverzije izolovanog molekula pa su zbog toga matični elementi tipa:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;00) \quad V_{\vec{n}\vec{m}}(0f;00) \quad V_{\vec{n}\vec{m}}(00;f0) \quad V_{\vec{n}\vec{m}}(00;0f)$$

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(ff;f0) \quad V_{\vec{n}\vec{m}}(ff;0f) \quad V_{\vec{n}\vec{m}}(f0;ff) \quad V_{\vec{n}\vec{m}}(0f;ff)$$

ravni nuli.

Bitna činjenica koju ovde treba napomenuti je ta da prelazeći sa Fermi na Pauli operatore,kao što se vidi iz dobijenih formula,veliki deo fermionskih interakcija je uključen u kvadratni deo paulionskog hamiltonijana.Fizički to znači da smo ovakvim prelaskom uključili interakcije čestica u hamiltonijan gasa kvazičestica.Autor ove ideje je Bogoljubov,sam medot se zove medod približne druge kvantizacije a njegova fizička suština je zamena sistema jako intereagujućih čestica sistemom slabo intereagujućih kvazičestica.

Sledeći korak u analizi je zamena Pauli operatora u hamiltonijanu /I1.1o./ Boze operatorima B^+ i B po približnim formulama.

$$P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} \qquad P^+_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} \qquad P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \qquad I\,1.12.$$

Treba odmah napomenuti da prosta zamena Pauli operatora Boze operatorima unosi u račun izvesnu grešku koja je utoliko manja ukoliko je broj ekscitiranih molekula u kristalu manji.Tačna formula za prelaz sa Pauli operatora na Boze operatore ima oblik:

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

$$P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B^{+\nu+1}_{\vec{n}} B^{\nu+1}_{\vec{n}} \qquad I\,1.13.$$

Ako poslednji deo formule/Il.13./ razvijemo dobićemo:

$$P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} \underset{B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}}}{\cong} -B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} = \hat{N}_{\vec{n}} - \hat{N}_{\vec{n}} (\hat{N}_{\vec{n}} - 1)$$

i na osnovu ovog vidimo da broj pauliona $P^{+}P$ dobija pravilne vrednosti 0 i 1 samo dok je broj bozona ravan 0,1 i 2. Već za N=3 dobijamo nepravilan rezultat za broj pauliona $P^{+}P$. Na ovaj način ilustrovali smo gornju tvrdnju da je zamena Pauli operatora bozonima po formuli /Il.12./ dobro samo dok je broj bozona mali tj.dok je sistem slabo ekscitiran. Zbog toga se metod približne druge kvantizacije sastoji ne samo u zameni Pauli operatora bozonima već i u odbacivanju svih članova četvrtog reda po Boze operatorima. Odbacivanje članova četvrtog reda je nužno, jer su prve korekcije koje dolaze usled razlike izmedju Pauli i Boze komutacionih relacija četvrtog i viših redova po Boze operatorima.

Na osnovu ovog, hamiltonijan metode približne druge kvantizacije za eksitonski sistem ima oblik:

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \mathcal{L}_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{m}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} \left(B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{m}}^{+} + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \right) \qquad I\,1.14.$$

Posle Furije transformacije Boze operatora

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

$$B_{\vec{n}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^{+} e^{-i\vec{k}\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{-\vec{k}}^{+} e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad I\,1.15.$$

Hamiltonijan /Il.14./ postaje:

$$H=\mathcal{E}_0+\sum_{\vec{k}}(\Delta+\tilde{\mathcal{L}}_{\vec{k}})B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}(B^{+}_{\vec{k}}B^{+}_{-\vec{k}}+B_{-\vec{k}}B_{\vec{k}})$$

$$\tilde{\mathcal{L}}_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}\tilde{\mathcal{L}}_{\vec{n}0}\,e^{i\vec{k}\vec{n}}$$

$$\beta_{\vec{k}}=\sum_{\vec{n}}\beta_{\vec{n}0}\,e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad \text{I 1.16.}$$

Ovako dobijeni hamiltonijan može se dalje dijagonalizovati prelaskom na nove Boze operatore $B_{\vec{k}}$ na sledeći način:

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

$$B^{+}_{\vec{k}}=U_{\vec{k}}b^{+}_{\vec{k}}+V_{\vec{k}}b_{-\vec{k}} \qquad \text{I 1.17.}$$

Transformacione funkcije $U_{\vec{k}}$ i $V_{\vec{k}}$ su po pretpostavci parne i realne. Da bi i $b_{\vec{k}}$ bili Boze operatori na funkcije U i V treba postaviti takozvani uslov kanoničnosti transformacije. Ako obrazujemo komutator operatora B^{+} i B na osnovu formule /Il.17./ dobijamo:

$$[B_{\vec{k}},B^{+}_{\vec{k}}]=U^{2}_{\vec{k}}[b_{\vec{k}},b^{+}_{\vec{k}}]+V^{2}_{\vec{k}}[b^{+}_{-\vec{k}},b_{-\vec{k}}]+$$

$$+U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}\{[b_{\vec{k}},b_{-\vec{k}}]+[b^{+}_{-\vec{k}},b^{+}_{\vec{k}}]\}$$

Da bi b^{+},b bili Boze operatori mora biti:

$$[b_{\vec{k}}, b^+_{\vec{k}}] = 1 \qquad [b^+_{-\vec{k}}, b_{-\vec{k}}] = -1$$

$$[b_{\vec{k}}, b_{-\vec{k}}] = [b^+_{-\vec{k}}, b^+_{\vec{k}}] = 0$$

Kako je $[B_{\vec{k}}, B^+_{\vec{k}}] = 1$ uslov kanoničnosti postaje

$$U^2_{\vec{k}} - V^2_{\vec{k}} = 1 \qquad \text{I1.18.}$$

zamenom/Il.17./ u /Il.16./ dobijamo

$$H = \mathcal{E}_0 + \sum_{\vec{k}} \left[V^2_{\vec{k}} \left(\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_{\vec{k}} \right) + U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} \right] +$$

$$+ \sum_{\vec{k}} \left\{ \left(\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_{\vec{k}} \right) \left(U^2_{\vec{k}} + V^2_{\vec{k}} \right) + 2 U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} \right\} b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} +$$

$$+ \sum_{\vec{k}} \left\{ \left(\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_{\vec{k}} \right) U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \beta_{\vec{k}} \left(U^2_{\vec{k}} + V^2_{\vec{k}} \right) \right\} \left(b^+_{\vec{k}} b^+_{-\vec{k}} + b_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} \right) \qquad \text{I1.19.}$$

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

$$\left(\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_{\vec{k}} \right) U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \beta_{\vec{k}} \left(U^2_{\vec{k}} + V^2_{\vec{k}} \right) = 0$$

$$U^2_{\vec{k}} - V^2_{\vec{k}} = 1$$

Rešavajući ovaj sistem jednačina imamo:

$$U_{\vec{k}}^{2}=\frac{1}{2}\left[\frac{\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}}+1\right];$$

$$V_{\vec{k}}^{2}=\frac{1}{2}\left[\frac{\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}}-1\right]$$

$$U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}=-\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}}\;;\quad U_{\vec{k}}^{2}+V_{\vec{k}}^{2}=\frac{\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}}}{\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}} \qquad I1.20$$

Zamenom ovih rezultata u izraz /I1.19./ dobijamo dijagonalizovan eksitonski hamiltonijan u obliku:

$$H=\mathcal{E}_{0}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}\left\{\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}-\Delta-\tilde{\alpha}_{\vec{k}}\right\}+$$

$$+\sum_{\vec{k}}\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}\;b_{\vec{k}}^{+}b_{\vec{k}} \qquad I1.21$$

Zakon disperzije za eksitone dobijamo:

$$E_{e}(k)=\frac{\partial H}{\partial b_{\vec{k}}^{+}b_{\vec{k}}}=\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}} \qquad I1.22$$

Napred je napomenuto da je Δ reda veličine nekoliko ev-a, dok su α i β o,1-o,ol ev. Na osnovu ovog možemo koren u formuli /I1.22./ razviti u red.

$$E_{e}(k)=\sqrt{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}-\beta_{\vec{k}}^{2}}=(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})\sqrt{1-\frac{\beta_{\vec{k}}^{2}}{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}}}=$$

$$\cong(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})\left\{1-\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec{k}}^{2}}{(\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}})^{2}}\right\}=\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}}-\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec{k}}^{2}}{\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}}}\cong$$

$$\cong\Delta+\tilde{\alpha}_{\vec{k}}-\frac{\beta_{\vec{k}}^{2}}{2\Delta}$$

Znači, približan izraz za energiju eksitona glasi:

$$E_e(k) = \Delta + \tilde{\alpha}_{\vec{k}} - \frac{\beta^2_{\vec{k}}}{2\Delta} \qquad I.1.23.$$

Da bi smo još odredjenije upoznali karakteristike eksitona mi će mo pretpostaviti:

a/ da je u $\tilde{\alpha}_{\vec{k}}$ i $\beta_{\vec{k}}$ bitan samo analitički deo operatora dipol-dipolne interakcije,

b/ da je aproksimacija najbližih suseda dobra aproksimacija,

c/ ograničiće mo se na oblast malih talasnih vektora i

d/ posmatraćemo kristal proste kubne strukture.

Na osnovu a, b i d imamo:

$$\tilde{\alpha}_{\vec{k}} = 2\tilde{\alpha}\,(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

$$\beta_{\vec{k}} = 2\beta\,(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

gde su $\alpha_{\vec{k}}$ i $\beta_{\vec{k}}$ matrični elementi interakcije za najbliže susede i a konstanta rešetke, dok na osnovu pretpostavke /c/ imamo:

$$\tilde{\alpha}_{\vec{k}} \cong 6\tilde{\alpha} - \tilde{\alpha} a^2 k^2$$

$$\beta_{\vec{k}} \cong 6\beta - \beta a^2 k^2$$

ako poslednji izraz zamenimo u izraz za energiju eksitona dobijamo:

$$E_e(k) = \Delta + 6\tilde{\alpha} - \frac{18\beta^2}{\Delta} - \tilde{\alpha} a^2 k^2 + \frac{12\beta^2 a^2 k^2}{2\Delta} - \frac{\beta^2 a^4 k^4}{2\Delta}$$

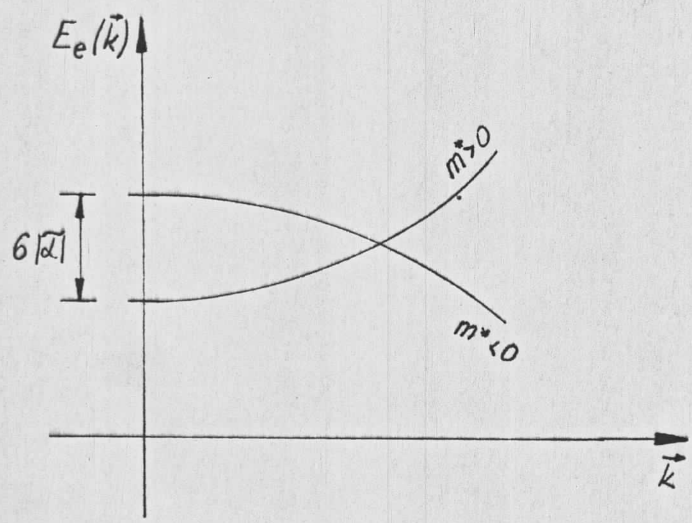
i ako se zanemari član proporcionalan K^4:

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

$$\tilde{\Delta} = \Delta + 6\tilde{\alpha} - \frac{18\beta^2}{\Delta} \; ; \quad m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2(\tilde{\alpha} - \frac{6\beta^2}{\Delta})} \qquad I\,1.24.$$

Odavde se vidi da se eksiton u oblasti malih talasnih vektora ponaša kao čestica sa efektivnom masom $m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2(\tilde{\alpha} - \frac{6\beta^2}{\Delta})}$ .Od znaka matričnog elementa $\tilde{\alpha}$ zavisi dali će eksiton imati pozitivnu ili negativnu masu ili drugim rečima koristeći se terminima klasične optike,da li će svetlost u kristalu imati pozitivnu ili negativnu disperziju.

U slučaju da je $\tilde{\alpha} < 0$ eksiton ima pozitivnu efektivnu masu /pozitivna disperzija/,dok za $\tilde{\alpha} > 0$ eksiton ima negativnu efektivnu masu /negativna disperzija/.Grafički se ova dva slučaja mogu pretstaviti ovako:



Sl. 1.

Na kraju treba napomenuti da eksiton ima,,gep,, zakon disperzije.Fizički smisao ovog ,,gep,,-a je očigledan:to je energija pobudjivanja izolovanog molekula.

I 2 P o l a r i t o n i

Do sada su analizirane elementarne optičke ekscitacije kristala /eksitoni/,čiji je karakter definisan isključivo hamiltonijanom kristala.U praksi,ako osvetljavajući kristal stvorimo eksitone,moramo voditi računa i o svetlosti /poljufotona/ koja stvara eksitone i o interakciji izmedju stvorenih eksitona i upadne svetlosti.Znači, kompletan i najopštiji prilaz problemu optičkih ekscitacija u kristalu zahteva analizu sistema čiji se hamiltonijan sastoji iz tri dela i to:hamiltonijan kristala,hamiltonijan polja transferzalnih fotona i hamiltonijan interakcije izmedju već stvorenih eksitona i fotona koji i dalje padağu na kristal.

Da ovako treba analizirati ceo problem pokazale su i eksperimentalne činjenice.Naime,ispostavilo se da je pored zakona disperzije jako sličnogzakonu disperzije za eksitone,nadjen je još jedan zakon disperzije koji eksitonska teorija nije mogla da objasni.Ove druge kvazičestice bile su po svojim osobinama više slične fotonima nego eksitonima.

Prvu ideju da je eksiton suviše idealizovana pretstava za optičke ekscitacije u kristalu dao je 1956 godine Fano.Godine 1957 Hopfild je došao na ideju da umesto eksitona i fotona u kristalu postoje neke hibridne ekscitacije koje su u najgrubljim crtama rečeno smeša eksitona i transferzalnih fotona.Agranovič je 1959 godine dao konačnu matematičku teoriju ovih hibridnih ekscitacija i nazvao ih polaritonima.

I danas u literaturi eksitonski i fotonski sistemi posmatraju se odvojeno a interakcija izmedju njih smatra se za malu perturbaciju.Ovakav prilaz je pogrešan iz dva razloga:

a/ interakcija izmedju eksitona i fotona u najvećem broju slučajeva je istog reda veličine kao i energije samih eksitona i fotona,pa se zato nemože shvatiti kao perturbacija, b/ ovakav prilaz je uvek nailazio na teškoće u domenu eksiton-foton rezonance, jer su se u ovoj oblasti pojavili singulariteti u svim fizičkim veličinama koje karakterišu optičke pojave. Ovi singulariteti otklanjani su uvodjenjem dopunskih uslova koji su, od autora do autora, uzimani dosta proizvoljno.

Zbog tog je neophodno da se pri analiziranju optičkih fenomena predje u tkz. polaritonsku reprezentaciju, jer samo u tom slučaju sve napred pomenute teškoće otpadaju. Kompletno i realno opisivanje optičkih pojava u kristalu zahteva analizu hamiltonijana koji se sastoji iz tri dela:

$$H = H_{eks} + H_{fot} + H_{int} \qquad I2.1.$$

gde je Heks-hamiltonijan eksitona, koji je detaljno analiziran u prethodnom paragrafu i dat je formulom / I1.10./. Hamiltonijan polja transferzalnih fotona Hfot dat je izrazom:

$$H_{fot} = \sum_{\vec{k}j} \hbar c|\vec{k}| \alpha^{+}_{\vec{k}j} \alpha_{\vec{k}j} \qquad . \qquad . \qquad I2.2.$$

gde je C-brzina svetlosti, $\vec{k}$-talasni vektor svetlosti, j-označava dve transferzalne grane polarizacije i $\alpha^{+}_{\vec{k}j}$ i $\alpha_{\vec{k}j}$ su operatori kreacije i anihilacije fotona sa talasnim vektorom $\vec{k}$ i polarizacije j. Treba napomenuti da je u izrazu /I2.2./ ispuštena energija nultih oscilacija elektromagnetnog polja tj. član oblika $\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}j} \hbar c|\vec{k}|$.

Najveću pažnju, u ovom delu, zahteva operator interakcije izmedju eksitona i fotona. Kako su eksitonska pobudjenja ustvari pobudjenja elektronskog podsistema u kristalu, dok se polje fotona karakteriše vektorskim potencijalom elektromagnetnog polja, jasno je da se do hamiltonijana interakcije može doći razmatranjem ponašanja elektrona u elektromagnetnom polju.

Iz klasične elektrodinamike poznato je da je impuls $\vec{Q}$ elektrona u elektromagnetnom polju

$$\vec{Q} = \vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} \tag{12.3}$$

gde je $\vec{p}$-stvarni impuls elektrona,e-naelektrisanje elektrona a $\vec{A}$-vektorski potencijal elektromagnetnog polja.Na osnovu ovakvog izraza za impuls energija elektrona u elektromagnetnom polju dat je izrazom:

$$E_e = \frac{\vec{Q}^2}{2m_e} = \frac{\vec{P}^2}{2m_e} - \frac{e}{m_e c}\vec{A}\vec{P} + \frac{e^2}{2m_e c^2}\vec{A}^2 \tag{12.4}$$

Prvi član $\frac{\vec{P}^2}{2m_e}$ ušao je u hamiltonijan $H\vec{n}$ dok treći član $\frac{e^2}{2m_e c}\vec{A}^2$ definiše energiju tkz.,,plazmenih,, oscilacija i ovde nije uzet u obzir,jer energiju optičkih sistema očitavamo od nivoa ,,plazmenih,, oscilacija.Prema tome hamiltonijan interakcije elektrona sa poljem transferzalnih fotona pretstavlja član $-\frac{e}{m_e c}\vec{P}\vec{A}$.

U kristalu ovakvu interakciju vrši svaki elektron na svakom čvoru,pa se ukupan hamiltonijan interakcije dobija ako se izraz tipa $-\frac{e}{m_e c}\vec{P}\vec{A}$ sumira po svim molekulima i po svim naelektrisanjima unutar jednog molekula.

$$H_{int} = -\frac{\sigma e}{c m_e}\sum_{\vec{n}} \vec{P}_{\vec{n}} \vec{A}_{\vec{n}} \tag{12.5}$$

ovde σ - pretstavlja broj elektrona u molekulu.

Elektronski impuls je jednočestični fermionski operator i u skladu sa onim što je rečeno u prethodnom paragrafu može se u reprezentaciji druge kvantizacije pretstaviti kao:

$$\vec{P}_{\vec{n}} = -i\hbar\sum_{f_1 f_2}\left[\int \varphi_{\vec{n}}^{*f_1}\, \nabla_{\vec{n}}\, \varphi_{\vec{n}}^{f_2}\, d\tau_{\vec{n}}\right] a^+_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}f_2} \tag{12.6}$$

Kako indeksi f_1 i f_2 mogu uzeti vrednost samo o i f to je očigledno da se operator impulsa $P\vec{n}$ može izraziti preko Pauli operatora. Prethodno je potrebno izvršiti Furije transformacije funkcija stanja elektrona na sledeći način:

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

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

Nakon toga operator $\vec{P}_{\vec{n}}$ može se napisati kao:

$$\hat{\vec{P}}_{\vec{n}} = \sum_{f_1 f_2} \vec{\mathcal{P}}_{f_1 f_2} a^+_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}f_2} \qquad I2.7.$$

gde je:

$$\vec{\mathcal{P}}_{f_1 f_2} = \frac{\hbar}{(2\pi)^3} \int d^3_{\vec{k}_1} d^3_{\vec{k}_2} \, d\mathcal{E}_{\vec{n}} \, \varphi_{k_1}^{*f_1} \varphi_{k_2}^{f_2} \vec{k}_2 e^{i\vec{n}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1)} \qquad I2.8.$$

Izraz /I2.7./ može se napisati u obliku:

$$\hat{\vec{P}}_{\vec{n}} = \vec{\mathcal{P}}_{00} a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}0} + \vec{\mathcal{P}}_{ff} a^+_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} + \vec{\mathcal{P}}_{f0} a^+_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} +$$

$$+ \vec{\mathcal{P}}_{0f} a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}f} = \vec{\mathcal{P}}_{00} + \left(\vec{\mathcal{P}}_{ff} - \vec{\mathcal{P}}_{00}\right) P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \vec{\mathcal{P}}_{f0} P^+_{\vec{n}} + \vec{\mathcal{P}}_{0f} P_{\vec{n}}$$

Prilikom zamene u hamiltonijan interakcije član proporcionalnosti $\vec{\mathcal{P}}_{00}$ daje konstantnu popravku energije pa se ne izima u obzir, dok član proporcionalan $(\vec{\mathcal{P}}_{ff} - \vec{\mathcal{P}}_{00})$ odgovara procesima slepljivanja ili razgradjivanja elementarnih ekscitacija. U daljem računu zadržavamo se na procesima rasejanja ekscitacija, tako da ovaj član nećemo uzeti u obzir jer on ne opisuje takav proces.

Prema tome,uzimajući da je $\vec{\mathcal{P}}_{fo}=\vec{\mathcal{P}}_{of}\equiv\vec{\mathcal{P}}_f$,efektivni izraz za operator impulsa može se napisati kao:

$$\vec{P}_{\vec{n}}=\vec{\mathcal{P}}_f\left(P^+_{\vec{n}}+P_{\vec{n}}\right) \qquad I2.9.$$

Iz teorije kvantovanja elektromagnetnog polja znamo da je

$$\vec{A}_{\vec{n}}=\sum_{\vec{k},j}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{Na^3|\vec{k}|}}\,\vec{e}_{\vec{k}j}\left\{\alpha_{\vec{k},j}+\alpha^+_{-\vec{k},j}\right\}e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad I2.10.$$

Ako u /I2.9./ izvršimo Furije transformaciju Pauli operatora

$$P_{\vec{n}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}P_{-\vec{k}}\,e^{-i\vec{k}\vec{n}}$$

$$P^+_{\vec{n}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}P^+_{\vec{k}}\,e^{-i\vec{k}\vec{n}} \qquad I2.11.$$

zatim kombinujemo formule /I2.5./,/I2.9./,/I2.lo./ i /I2.11./ dobijamo:

$$H_{int}=\sum_{\vec{k}j}\vec{\Omega}^f_{\vec{k}}\,\vec{e}_{\vec{k}j}\left(\alpha_{\vec{k}j}+\alpha^+_{-\vec{k}j}\right)\left(P^+_{\vec{k}}+P_{-\vec{k}}\right) \qquad I2.12.$$

gde je:

$$\vec{\Omega}^f_{\vec{k}}=-\frac{\sigma e}{me}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{a^3|\vec{k}|C}}\;\vec{\mathcal{P}}_f \qquad I2.13.$$

Veličinu $\vec{\Omega}^f_{\vec{k}}$ zvaćemo dipolni moment prelaza u molekulu.

Na osnovu formule pomoću koje se prelazi sa Pauli na Boze operatore

$$P_{\vec{n}}=B_{\vec{n}}-B^+_{\vec{n}}B_{\vec{n}}B_{\vec{n}}$$

posle Furije transformacije operatora $P\vec{n}$ i $B\vec{n}$ dobijamo:

$$P_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} B^{+}_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \qquad I2.14.$$

odnosno:

$$P^{+}_{\vec{k}} = B^{+}_{\vec{k}} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} B^{+}_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} B^{+}_{\vec{q}_1} B_{\vec{q}_2} \qquad I2.15$$

Ako se ograničimo samo na prve članove gore navedenih formula i njih zamenimo u /I2.12./ i pretpostavimo da eksiton interreaguje samo sa jednom fotonskom granom dobićemo hamiltonijan interakcije eksitona i fotona u harmoniskoj aproksimaciji:

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} \left(B^{+}_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + \alpha^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + B^{+}_{\vec{k}} \alpha^{+}_{-\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) \qquad I2.16.$$

gde je:

$$T_{\vec{k}} = \vec{\Omega}^{+}_{\vec{k}} \vec{\ell}_{\vec{k}} \qquad I2.17.$$

Treba napomenuti da eksiton interreagūje samq sa jednom granom fotona ako vektori $\vec{\Omega}^{+}_{\vec{k}}$ i $\vec{\ell}_{\vec{k}}$ leže u ravni na koju je drugi vektor polarizacije normalan.U praksi je ovo najčešće kod kristala naftalina.Zamenom operatora $B_{\vec{k}}$ po formulama /I1.17./ hamiltonijan /I2.1./ možemo napisati u obliku:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_e(\vec{k}) b^{+}_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} E_{\phi}(\vec{k}) \alpha^{+}_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} +$$

$$+ \sum_{\vec{k}} \Phi_{\vec{k}} \left(B^{+}_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + \alpha^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + B^{+}_{\vec{k}} \alpha^{+}_{-\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) \qquad I2.18.$$

gde je:

$$E_e(\vec{k}) = \sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_{\vec{k}})^2 - \beta^2_{\vec{k}}}$$

$$E_{\phi}(\vec{k}) = \hbar C |\vec{k}|$$

$$\Phi_{\vec{k}} = \frac{\Delta + \tilde{\alpha}_{\vec{k}}}{E_e |\vec{k}|} T_{\vec{k}} \qquad I2.19.$$

Na kraju treba reći da ovaj hamiltonijan opisuje harmonijski proces u sistemu eksitona i fotona.

Hamiltonijan /I2.18./ treba dijagonalizovati i zato ga pišemo u pogodnijem obliku:

$$H=\sum_{s,s'=1}^{2} M_{ss'} b_s^+ b_{s'} + \frac{1}{2}\sum_{s,s'=1}^{2} N_{ss'}\left(b_s^+ b_{s'}^+ + b_{s'} b_s\right) \qquad I2.20.$$

gde je:

$$M_{11} \equiv E_e(\vec{k}) \qquad M_{22} \equiv E_\phi(\vec{k}) \qquad M_{12} = M_{21} = \phi_{\vec{k}}$$

$$N_{11} = 0 \qquad N_{22} = 0 \qquad N_{12} = N_{21} = \phi_{\vec{k}}$$

$$b_1 \equiv b_{\vec{k}} \qquad b_2 \equiv d_{\vec{k}} \qquad I2.21.$$

Ovaj hamiltonijan bi mogli dijagonalizovati na isti način kao i ranije,ali bi nas to dovelo do mnoštva jednačina.Zato će mo iskoristiti Hajzenbergove jednačine kretanja i izvršiti dijagonalizaciju po Tjablikovu,koja direktno daje zakon disperzije polaritona. Hajzenbergova jednačina kretanja za ma koji ermitski operator neke fizičke veličine glasi:

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

a kod nas

$$i\dot{b}_s(t) = [b_s, H]_{t=0} = \sum_{s'=1}^{2} M_{ss'} b_{s'} + \sum_{s'=1}^{2} N_{ss'} b_{s'}^+ \qquad I2.22.$$

time smo uveli naš hamiltonijan u Hajzenbergove jednačine kretanja.Pošto $b_s(t)$ nije konstanta kretanja,prelazimo na nove operatore $C_\sigma(t)$ sledećom transformacijom:

$$b_s(t) = \sum_{\sigma=1}^{2}\left[U_{s\sigma} C_\sigma e^{-iEt} + V_{s\sigma}^* C_\sigma^+ e^{iEt}\right] \qquad I2.23.$$

Da bi transformacija /I2.23./ bila kanonična operatori C_σ, C_σ^+, moraju biti Boze operatori kao i operatori b_s, b_s^+. Uslove kanoničnosti transformacije izvešćemo za momenat t=o

$$b_s = \sum_{\sigma=1}^{2} (U_{s\sigma} C_\sigma + V_{s\sigma}^* C_\sigma^+)$$

$$b_{s'}^+ = \sum_{\sigma'=1}^{2} (U_{s'\sigma'}^* C_{\sigma'}^+ + V_{s'\sigma'} C_{\sigma'})$$

odavde

$$\delta_{ss'} = [b_s, b_{s'}^+] = \sum_{\sigma,\sigma'=1}^{2} \{U_{s\sigma} U_{s'\sigma'}^* [C_\sigma, C_{\sigma'}^+] + V_{s\sigma}^* V_{s'\sigma'} [C_\sigma^+, C_{\sigma'}] +$$

$$+ U_{s\sigma} V_{s'\sigma'} [C_\sigma, C_{\sigma'}] + U_{s'\sigma'}^* V_{s\sigma}^* [C_\sigma^+, C_{\sigma'}^+]\} =$$

$$= \sum_{\sigma,\sigma'=1}^{2} (U_{s\sigma} U_{s'\sigma'}^* - V_{s\sigma}^* V_{s'\sigma'}) \delta_{\sigma\sigma'} \qquad I2.24.$$

$$\sum_{\sigma=1}^{2} (U_{s\sigma} U_{s'\sigma}^* - V_{s\sigma}^* V_{s'\sigma}) = \delta_{ss'}$$

Osim toga

$$0 = [b_s, b_{s'}] = \sum_{\sigma,\sigma'=1}^{2} \{U_{s\sigma} U_{s'\sigma'} [C_\sigma, C_{\sigma'}] + U_{s\sigma} V_{s'\sigma'}^* [C_\sigma, C_{\sigma'}^+] +$$

$$+ U_{s'\sigma'} V_{s\sigma}^* [C_\sigma^+, C_{\sigma'}] + V_{s\sigma}^* V_{s'\sigma'}^* [C_\sigma^+, C_{\sigma'}^+]\} =$$

$$= \sum_{\sigma,\sigma'=1}^{2} (U_{s\sigma} V_{s'\sigma'}^* - U_{s'\sigma'} V_{s\sigma}^*) \delta_{\sigma\sigma'} \quad \text{pa je:}$$

$$\sum_{\sigma=1}^{2} (U_{s\sigma} V_{s'\sigma}^* - U_{s'\sigma} V_{s\sigma}^*) = 0 \qquad I2.25.$$

Relacije /I2.24./ i /I2.25./ nam obezbedjuju potrebnu kanoničnost

Da bi transformacija /I2.23./ imala inveznu transformaciju i to analognu samoj sebi /to znači da i u inveznoj transformaciji funkcija U stoji iz operator istog tipa kao i u direktnoj transformaciji/ treba postupiti na sledeći način:

$$b_s = \sum_{\sigma'=1}^{2} (U_{s\sigma'} C_{\sigma'} + V_{s\sigma'}^* C_{\sigma'}^+) \qquad b_s^+ = \sum_{\sigma'=1}^{2} (U_{s\sigma'}^* C_{\sigma'}^+ + V_{s\sigma'} C_{\sigma'})$$

Prvu jednačinu množimo sa $U^*_{s\sigma}$ a drugu sa $-\mathcal{V}^*_{s\sigma}$,dobijene rezultate saberemo i izvršimo sumaciju po s na obe strane ovako dobijene relacije.Rezultat je:

$$\sum_{s=1}^{2}(U^*_{s\sigma}b_s-\mathcal{V}^*_{s\sigma}b^+_s)=\sum_{\sigma'=1}^{2}C_{\sigma'}[\sum_{s=1}^{2}(U_{s\sigma'}U^*_{s\sigma}-\mathcal{V}_{s\sigma'}\mathcal{V}^*_{s\sigma})]+$$
$$+\sum_{\sigma'=1}^{2}C^+_{\sigma'}[\sum_{s=1}^{2}(U^*_{s\sigma}\mathcal{V}^*_{s\sigma'}-U^*_{s\sigma'}\mathcal{V}^*_{s\sigma})]$$

ako uvedemo uslove

$$\sum_{s=1}^{2}(U_{s\sigma'}U^*_{s\sigma}-\mathcal{V}_{s\sigma'}\mathcal{V}^*_{s\sigma})=\delta_{\sigma\sigma'} \qquad I\,2.26.$$

$$\sum_{s=1}^{2}(U^*_{s\sigma}\mathcal{V}^*_{s\sigma'}-U^*_{s\sigma'}\mathcal{V}^*_{s\sigma})=0 \qquad I\,2.27.$$

inverzna transformacija glasi:

$$C_\sigma=\sum_{s=1}^{2}(U^*_{s\sigma}b_s-\mathcal{V}^*_{s\sigma}b^+_s) \qquad I\,2.28.$$

Kao što se vidi odavde ispunjen je polazni zahtev tj.na levoj strani jednačine imamo anihilacioni operator C a na desnoj funkcija U množi takodje anihilacioni operator b .Zamenom /I2.23./ u /I222./ dobijamo:

$$\sum_{\sigma=1}^{2}\{C_\sigma e^{-iEt}[EU_{s\sigma}-\sum_{s'=1}^{2}(M_{ss'}U_{s'\sigma}+N_{ss'}\mathcal{V}_{s'\sigma})]+$$
$$+C^+_\sigma e^{iEt}[-E\mathcal{V}^*_{s\sigma}-\sum_{s'=1}^{2}(M_{ss'}\mathcal{V}^*_{s'\sigma}+N_{ss'}U^*_{s'\sigma})]\}=0$$

ako koeficiente uz operatore C i C^+ izjednačimo sa nulom i uzmemo u obzir da su matrični elementi $M_{ss'}$ i $N_{ss'}$ realni dobijamo

$$EU_{s\sigma}=\sum_{s'=1}^{2}(M_{ss'}U_{s'\sigma}+N_{ss'}\mathcal{V}_{s'\sigma})$$
$$-E\mathcal{V}_{s\sigma}=\sum_{s'=1}^{2}(N_{ss'}U_{s'\sigma}+M_{ss'}\mathcal{V}_{s'\sigma}) \qquad I\,2.29.$$

što u razvijenom obliku glasi

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

$$-EV_{1\sigma} = N_{11}U_{1\sigma} + N_{12}U_{2\sigma} + M_{11}V_{1\sigma} + M_{12}V_{2\sigma}$$

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

$$-EV_{2\sigma} = N_{21}U_{1\sigma} + N_{22}U_{2\sigma} + M_{21}V_{1\sigma} + M_{22}V_{2\sigma}$$

Ako zamenimo vrednosti za $M_{ss'}$ i $N_{ss'}$,te posle sredjivanja sistema /I2.29./ sledi:

$$[E-E_e(\vec{k})]U_{1\sigma} - \phi_{\vec{k}}U_{2\sigma} - 0\cdot V_{1\sigma} - \phi_{\vec{k}}V_{2\sigma} = 0$$

$$-\phi_{\vec{k}}U_{1\sigma} + [E-E_\phi(\vec{k})]U_{2\sigma} - \phi_{\vec{k}}V_{1\sigma} - 0\cdot V_{2\sigma} = 0$$

$$0\cdot U_{1\sigma} + \phi_{\vec{k}}U_{2\sigma} + [E+E_e(\vec{k})]V_{1\sigma} + \phi_{\vec{k}}V_{2\sigma} = 0$$

$$\phi_{\vec{k}}U_{1\sigma} + 0\cdot U_{2\sigma} + \phi_{\vec{k}}V_{1\sigma} + [E+E_\phi(\vec{k})]V_{2\sigma} = 0 \qquad 12.30$$

da bi ovaj sistem imao rešenja različita od nule,moramo determinantu izjednačiti sa nulom tj.

$$\begin{vmatrix} E-E_e(\vec{k}) & -\phi_{\vec{k}} & 0 & -\phi_{\vec{k}} \\ -\phi_{\vec{k}} & E-E_\phi(\vec{k}) & -\phi_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \phi_{\vec{k}} & E+E_e(\vec{k}) & \phi_{\vec{k}} \\ \phi_{\vec{k}} & 0 & \phi_{\vec{k}} & E+E_\phi(\vec{k}) \end{vmatrix} = 0$$

kao rešenje dobijamo bikvadratnu jednačinu iz koje se odredjuju vrednosti parametra E.Te vrednosti su:

$$\mathcal{E}_{1,2}(\vec{k}) = \sqrt{\frac{E_e^2(\vec{k})+E_\phi^2(\vec{k})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{E_e^2(\vec{k})-E_\phi^2(\vec{k})}{2}\right]^2 + 4E_e(\vec{k})E_\phi(\vec{k})\phi_k^2}} \qquad I2.31.$$

Očigledno,pojavile su se dve vrednosti energije $\mathcal{E}_{1,2}$,koje pretstavljaju energije dveju polaritonskih grana.Rezultat izvedene procedure je da se hamiltonijan /I2.18./ dijagonalizuje po operatorima C i ima oblik:

$$H=\sum_{\vec{k}}[\mathcal{E}_1(\vec{k})C^+_{1\vec{k}}C_{1\vec{k}}+\mathcal{E}_2(\vec{k})C^+_{2\vec{k}}C_{2\vec{k}}] \qquad I2.32.$$

Koristeći se sistemom jednačina /I2.3o./ i uslovom /I2.26./ dobijamo eksplicitne izraze za transformacione funkcije U i V koji glase:

$$U_{1\sigma} = \frac{-2\phi_{\vec{k}}E_\phi(k)}{[E_\sigma-E_e(\vec{k})][E_\sigma-E_\phi(\vec{k})]}V_{2\sigma}$$

$$U_{2\sigma} = -\frac{E_\sigma+E_\phi(\vec{k})}{E_\sigma-E_\phi(\vec{k})}V_{2\sigma}$$

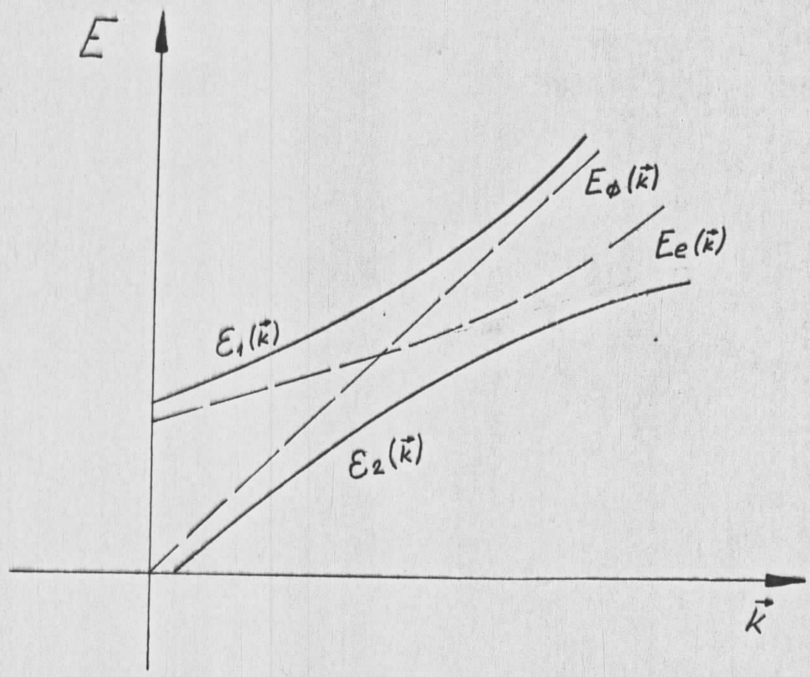
$$V_{1\sigma} = \frac{2\phi_{\vec{k}}E_\phi(\vec{k})}{[E_\sigma+E_e(\vec{k})](E_\sigma-E_\phi(\vec{k}))}V_{2\sigma}$$

$$V_{2\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\left[\frac{E_\sigma+E_\phi(\vec{k})}{E_\sigma-E_\phi(\vec{k})}\right]^2 + \frac{4\phi_{\vec{k}}^2E_\phi^2(\vec{k})}{[E_\sigma-E_e(\vec{k})]^2[E_\sigma-E_\phi(\vec{k})]^2} - \frac{}{[E_\sigma+E_e(\vec{k})]^2[E_\sigma-E_\phi(\vec{k})]^2} - 1}} \qquad I2.33.$$

$$E_1 \equiv \mathcal{E}_1(\vec{k}) \qquad E_2 \equiv \mathcal{E}_2(\vec{k})$$

Pošto su svi elementi Mss' i Nss' realni i funkcije U i V su realne.

Dobijene vrednosti za $\mathcal{E}_1(\vec{k})$ i $\mathcal{E}_2(\vec{k})$ pretstavljaju energij realnih optičkih ekscitacija u kristalu-polaritona. Grafički se to može pretstaviti na sledeći način:



Sl. 2.

Kao što vidimo dve polaritonske grane $\mathcal{E}_1$ i $\mathcal{E}_2$ se ne presecaju kao što to čine energije eksitona i fotona, pa zbog toga ako se kristal analizira u polaritonskoj reprezentaciji otpadaju napred pomenute teškoće povezane sa singularitetima u tački preseka eksitonske i fotonske energije.

II BOZE-KONDENZACIJA U SISTEMU ČESTICA I KVAZIČESTICA

II 1. Boze-kondenzacija u tečnom He^{II}

Superfluidnost je kretanje tečnosti kroz kapilare bez trenja. Ovu pojavu otkrio je 1939 godine Kapica. Kapica je konstatovao da se tečni He^{II} kreće kroz kapilare bez trenja. Fenomenološku teoriju ove pojave dao je Landau a mikroteoriju Bogoljubov.

Objašnjenje pojave bazira na činjenici da boze čestice mogu da popunjavaju kvantne nivoe sa neograničenim brojem čestica. Najnižu energiju imaju čestice čiji je impuls jednak nuli, a obzirom da svaki sistem teži da zauzme stanje najniže energije, jasno je da i u sistemu bozona najveći deo čestica ima impuls ravan nuli. Atom He^{II} ima dva elektrona, dva protona i dva neutrona i svi ovi delovi atoma sparuju se sa antiparalelnim spinovima tako da je ukupan spin atoma jednak nuli, a to znači da je on boze čestica.

Posmatramo količinu tečnosti čija je masa M a brzina kretanja $\vec{V}$, kinetička energija ove količine tečnosti iznosi:

$$E_k = \frac{\vec{Q}^2}{2M} \quad \vec{Q} = M\vec{V} \qquad II\,1.1.$$

Ako posmatrana količina tečnosti protiče kroz kapilar, tare se o zidove i tako dolazi do trenja. Trenje o zidove stvara dodatnu energiju tj. u tečnosti se javljaju kvanti energije trenja ili kvazičestice. Kinetička energija tečnosti, ukoliko nema trenja, data je formulom /II 1.1./. A obzirom da postoji trenje energija količine tečnosti kad prodje kroz kapilar mora biti manja od Ek, jer deo energije odlazi na trenje. U ovom slučaju kad postoji trenje mora biti

$$E < E_k \qquad II\,1.2.$$

E-energija tečnosti posle prolaska kroz kapilar. Kao što smo zaključili da se tečnost tare o zidove suda i da se usled toga atomima i molekulima menja energija a da bi to objasnili pretpostavićemo da se u tečnosti pojavljuju elementarne ekscitacije.Posmatraćemo najprostiji slučaj kada se u tečnosti pojavljuje samo jedna elementarna ekscitacija sa impulsom $\vec{p}$ i energijom $\mathcal{E}_{\vec{p}}$

$$E=\frac{(\vec{Q}+\vec{P})^2}{2M}+\mathcal{E}_{\vec{p}}=\frac{\vec{Q}^2}{2M}+\frac{2\vec{Q}\vec{P}}{2M}+\frac{\vec{P}^2}{2M}+\mathcal{E}_{\vec{p}}=E_k+\vec{V}\vec{P}+\mathcal{E}_{\vec{p}}+\frac{P^2}{2M}$$

Poslednji član se može zanemariti,jer je masa količine tečnosti M reda veličine 1 gr. a efektivna masa elementarne ekscitacije može da bude reda veličine mase atoma u najboljem slučaju.Posle ove aproksimacije sledi:

$$E=E_k+\vec{V}\vec{P}+\mathcal{E}_{\vec{p}} \qquad II\,1.3.$$

U slučaju kad postoji trenje mora biti na osnovu /II1.2./ $E-E_k<0$ te iz formule /II1.3./ sledi uslov za postojanje trenja tečnosti sa zidovima kapilara

$$\vec{V}\vec{P}+\mathcal{E}_{\vec{p}}<0 \qquad II\,1.4.$$

Najpovoljniji slučaj za egzistenciju trenja je očigledno onaj gde su vektori $\vec{p}$ i $\vec{v}$ suprotno usmereni.Uslov za postojanje trenja glasi:

$$\mathcal{E}_{\vec{p}}-\vec{P}\vec{V}<0 \qquad P=|\vec{P}| \qquad V=|\vec{V}|$$

ili

$$\frac{\mathcal{E}_{\vec{p}}}{P}<V \qquad II\,1.5.$$

V je ovde kao intenzitet vektora pozitivna veličina i nemože biti jednaka nuli.Kao što smo rekli relacija /II1.5./ je uslov da postoji trenje u tečnosti,njoj suprotna relacija

$$\frac{\mathcal{E}_{\vec{p}}}{P}>V$$

pretstavlja uslov da se tečnost kreće bez trenja.Kao uslov za kretanje tečnosti bez trenja obično se uzima

$$\min \frac{\varepsilon_{\vec{p}}}{p} > 0 \qquad \text{III.6.}$$

Ovde se uzima minimum da bi uslov bio nezavisan od impulsa,dok zbog proizvoljnosti brzine na desnoj strani može se staviti i nula,čime smo samo opravdali činjenicu da minimum fazne brzine elementarnih ekscitacija mora biti pozitivna veličina.

Prema tome tečnost će se kretati bez trenja tj.postojaće fenomen superfluidnosti,samo u onim slučajevima,kad se usled trenja u tečnosti pojavljuju takve elementarne ekscitacije čiji je minimum fazne brzine pozitivna veličina.Tada elementarne ekscitacije služe tečnosti kao izolacija od zidova suda.Kao što je već rečeno pojava superfluidnosti otkrivena je u tečnom He^4 čiji je ukupan spin nula, dok izotop helijuma He^3 čiji je spin $\frac{1}{2}$ nije pokazivao superfluidna svojstva.

Fenomen superfluidnosti objasnio je Bogoljubov bozonskim karakterom atoma He^4.Polazne ideje Bogoljubova baziraju na dvema fizičkim činjenicama:

a/ u jednom kvantnom stanju može da se nadje neograničeno mnogo boze čestica,

b/ postojanje opšte težnje da sistem zauzima stanje najniže energije.

Iz ovog sledi zaključak da atomi He^4 sa kinetičkom energijom $\frac{\vec{p}^2}{2m}$ zauzimaju skoro svi stanje najniže energije,a tom stanju odgovara impuls ravan nuli.Ta činjenica da gotovo svi atomi He^4 imaju impuls ravan nuli uslovljena je njihovim bozonskim karakterom. Ako sa N označimo ukupan broj atoma He u sistemu,a sa No broj atoma koji imaju impuls ravan nuli onda je

$$N_0 \approx N \qquad \text{III.7.}$$

Tačnija relacija ima oblik:

$$N = b_0^+ b_0 + \sum_{\vec{p}\neq 0} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} = N_0 + \sum_{\vec{p}\neq 0} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}$$

$$N_0 = b_0^+ b_0 \qquad \sum_{\vec{p}\neq 0} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} \ll b_0^+ b_0 \qquad II\,1.8.$$

$b_0^+ b_0$ - bozonski operator broja atoma $\ddot{H}e$ koji imaju impuls ravan nuli

$b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}$ - broj atoma $\ddot{H}e$ čiji je impuls različit od nule.

Bozoni koji se nalaze u stanju sa impulsom jednakim nuli,nazivaju se kondenzantni bozoni a svi zajedno obrazuju tkz.Boze-kondenzaciju.Dok su bozoni sa impulsom različitim od nule nadkondenzantni bozoni.Hamiltonijan ovakvog sistema tj.sistema atoma $\ddot{H}e$ shvaćenog kao sistem bozona sa dvočestičnim interakcijama u reprezentaciji druge kvantizacije može se napisati kao

$$H = \sum_{\vec{p}} \frac{P^2}{2m} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} + \frac{1}{2N} \sum_{\vec{P}_1\vec{P}_2\vec{P}_3\vec{P}_4} W(\vec{P}_1 - \vec{P}_3) b_{\vec{P}_1}^+ b_{\vec{P}_2}^+ b_{\vec{P}_3} b_{\vec{P}_4} \delta_{\vec{P}_1+\vec{P}_2,\vec{P}_3+\vec{P}_4} \qquad II\,1.9.$$

gde je m masa atoma $\ddot{H}e$, $W(\vec{P}_1 - \vec{P}_3)$ Furije lik interakcija izmedju helijumovih atoma.

Pre nego što analiziramo hamiltonijan /II1.9./ treba izvršiti jednu aproksimaciju koja se zasniva na činjenici da se skoro svi atomi $\ddot{H}e$ nalaze u kondenzatu.

$$b_0^+ b_0 = N_0 \sim 10^{24} \qquad b_0 b_0^+ = N_0 + 1 \approx N_0 \sim 10^{24}$$

odavde sledi $b_0^+ b_0 = b_0 b_0^+$

što znači da operatori kondenzantnih bozona komutiraju odnosno ponašaju se kao obični brojevi a uz pretpostavku da su to i realni brojevi tada važi

$$b_0^+ b_0 = b_0 b_0^+ = b_0 b_0 = b_0^+ b_0^+ = N_0 \qquad II\,1.10.$$

Operatori $b^+_{\vec{p}}$ i $b_{\vec{p}}$ nadkondenzantnih bozona,pošto njih ima malo,nisu brojevi već operatori.U hamiltonijanu /II1.9./ izdvojićemo članove sa impulsom ravnim nuli i sa impulsom različitim od nule.Tom prilikom ne uzimamo u obzir članove gde su tri indeksa različita od nule jer oni daju popravke na spektar tek u drugoj aproksimaciji teorije perturbacije.Prvi član hamiltonijana može se napisati na sledeći način:

$$\sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} = \sum_{\vec{p}\neq 0} \frac{p^2}{2m} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}$$

Iz drugog člana delove hamiltonijana izdvojićemo po sledećoj šemi

$\vec{P}_1$	$\vec{P}_2$	$\vec{P}_3$	$\vec{P}_4$
0	0	0	0
$\vec{P}_1\neq 0$	$\vec{P}_2\neq 0$	0	0
$\vec{P}_1\neq 0$	0	$\vec{P}_3\neq 0$	0
$\vec{P}_1\neq 0$	0	0	$\vec{P}_4\neq 0$
0	$\vec{P}_2\neq 0$	$\vec{P}_3\neq 0$	0
0	$\vec{P}_2\neq 0$	0	$\vec{P}_4\neq 0$
0	0	$\vec{P}_3\neq 0$	$\vec{P}_4\neq 0$
$\vec{P}_1\neq 0$	$P_2\neq 0$	$\vec{P}_3\neq 0$	$\vec{P}_4\neq 0$

U šemi nisu uzeti članovi sa tri impulsa različita od nule.Dalja teorija biće tačna samo u prvoj aproksimaciji teorije perturbacije Pored toga odbacujemo član gde su sva četiri impulsa različita od nule,jer on daje popravke proporcionalne koncentraciji nadkondenzantnih bozona a te popravke su male,jer je broj nadkondenzantnih bozona mali.Za pet prvih vrsta gornje šeme hamiltonijan /II1.9./ možemo napisati u obliku:

$$H=\frac{1}{2}\frac{N_0^2}{N}W(0)+\sum_{\vec p\neq 0}\left[\frac{P^2}{2m}+\frac{N_0}{N}W(\vec p)\right]b_{\vec p}^+ b_{\vec p}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec p=0}\frac{N_0}{N}W(\vec p)\left(b_{\vec p}^+ b_{-\vec p}^+ + b_{-\vec p} b_{\vec p}\right)+\frac{N_0}{N}W(0)\sum_{\vec p=0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}$$

Ako uzmemo u obzir da je $N_0=N-\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}$ i zanemarimo kvadrate male veličine $\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}$ imamo približno:

$$\frac{1}{2}\frac{N_0^2}{N}W(0)=\frac{1}{2}\frac{W(0)}{N}\left(N^2-2N\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}\right)=\frac{1}{2}N\,W(0)-W(0)\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p} \quad i$$

$$\frac{N_0}{N}W(0)\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}=\left(1-\frac{1}{N}\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}\right)W(0)\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}\approx W(0)\sum_{\vec p\neq 0} b_{\vec p}^+ b_{\vec p}$$

Konačan oblik hamiltonijana je:

$$H=\frac{1}{2}N\,W(0)+\sum_{\vec p\neq 0}\left[\frac{P^2}{2m}+\frac{N_0}{N}W(\vec p)\right]b_{\vec p}^+ b_{\vec p}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec p\neq 0}\frac{N_0}{N}W(\vec p)\left(b_{\vec p}^+ b_{-\vec p}^+ + b_{-\vec p} b_{\vec p}\right) \qquad II\ 1.11.$$

Ovaj hamiltonijan ćemo sada dijagonalizovati prelazeći na nove Boze operatore $C_{\vec p}$ i $C_{\vec p}^+$ pomoću transformacije

$$b_{\vec p}=U_{\vec p}C_{\vec p}+V_{\vec p}C_{-\vec p}^+ \qquad II\ 1.12.$$

U i V su realne i parne funkcije.

Da bi ova transformacija bila kanonična tj.da bi operatori $C_{\vec p}$ i $C_{\vec p}^+$ bili Boze operatori,na funkcije U i V treba primenuti uslov kanoničnosti.

Na osnovu /III.12./ imamo:

$$b_{\vec{p}} = U_{\vec{p}} C_{\vec{p}} + V_{\vec{p}} C^{+}_{-\vec{p}} \qquad b^{+}_{\vec{p}} = U_{\vec{p}} C^{+}_{\vec{p}} + V_{\vec{p}} C_{-\vec{p}}$$

tj.

$$1 = [b_{\vec{p}}, b^{+}_{\vec{p}}] = U^{2}_{\vec{p}} [C_{\vec{p}}, C^{+}_{\vec{p}}] + V^{2}_{\vec{p}} [C^{+}_{-\vec{p}}, C_{-\vec{p}}] +$$

$$+ U_{\vec{p}} V_{\vec{p}} [C_{\vec{p}}, C_{-\vec{p}}] + U_{\vec{p}} V_{\vec{p}} [C^{+}_{-\vec{p}}, C^{+}_{\vec{p}}]$$

Da bi operatori $C_{\vec{p}}$ i $C^{+}_{\vec{p}}$ bili Boze operatori mora biti

$$[C_{\vec{p}}, C^{+}_{\vec{p}}] = 1 \quad ; \quad [C^{+}_{-\vec{p}}, C_{-\vec{p}}] = -1$$

$$[C_{\vec{p}}, C_{-\vec{p}}] = [C^{+}_{-\vec{p}}, C^{+}_{\vec{p}}] = 0$$

poslednja jednačina se svodi na oblik

$$U^{2}_{\vec{p}} - V^{2}_{\vec{p}} = 1 \qquad \text{II 1.13.}$$

Zamenom /III.12./ u hamiltonijan /III.11./ sledi:

$$H = \frac{1}{2} N W(0) + \sum_{\vec{p} \neq 0} [\alpha_{\vec{p}} V^{2}_{\vec{p}} + \beta_{\vec{p}} U_{\vec{p}} V_{\vec{p}}] + \sum_{\vec{p} \neq 0} [\alpha_{\vec{p}} (U^{2}_{\vec{p}} + V^{2}_{\vec{p}}) +$$

$$+ 2\beta_{\vec{p}} U_{\vec{p}} V_{\vec{p}}] C^{+}_{\vec{p}} C_{\vec{p}} + \sum_{\vec{p} \neq 0} [\alpha_{\vec{p}} U_{\vec{p}} V_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \beta_{\vec{p}} (U^{2}_{\vec{p}} + V^{2}_{\vec{p}})] (C^{+}_{\vec{p}} C^{+}_{-\vec{p}} + C_{-\vec{p}} C_{\vec{p}})$$

gde je

$$\alpha_{\vec{p}} = \frac{p^{2}}{2m} + \frac{N_0}{N} W(\vec{p}) \quad ; \quad \beta_{\vec{p}} = \frac{N_0}{N} W(\vec{p}) \qquad \text{II 1.14.}$$

Da bi se oslobodili nedijagonalnih članova po operatorima $C^{+}_{\vec{p}}$ i $C_{\vec{p}}$ funkcijama U i V postavljamo sledeće uslove

$$\alpha_{\vec{p}} U_{\vec{p}} V_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \beta_{\vec{p}} (U^{2}_{\vec{p}} + V^{2}_{\vec{p}}) = 0 \qquad \text{II 1.15.}$$

Kombinujući /III.15./ i /III.13./ dobijamo

$$U_{\vec p}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_{\vec p}}{\sqrt{\alpha_{\vec p}^2 - \beta_{\vec p}^2}} + 1\right) \qquad V_{\vec p}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_{\vec p}}{\sqrt{\alpha_{\vec p}^2 - \beta_{\vec p}^2}} - 1\right)$$

$$U_{\vec p}^2 + V_{\vec p}^2 = \frac{\alpha_{\vec p}}{\sqrt{\alpha_{\vec p}^2 - \beta_{\vec p}^2}} \qquad U_{\vec p} V_{\vec p} = -\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec p}}{\sqrt{\alpha_{\vec p}^2 - \beta_{\vec p}^2}} \qquad III.16.$$

Zamenom ovih rezultata u hamiltonijan koji je izražen preko operatora $C_{\vec p}$ i $C_{\vec p}^+$ dobijamo

$$H = \frac{1}{2} N W(0) + \sum_{\vec p \neq 0} \left\{\frac{1}{2}\mathcal{E}_{\vec p} - \alpha_{\vec p}\right\} + \sum_{\vec p \neq 0} \mathcal{E}_{\vec p} C_{\vec p}^+ C_{\vec p} \qquad III.17.$$

gde je

$$\mathcal{E}_{\vec p} = \sqrt{\alpha_{\vec p}^2 - \beta_{\vec p}^2} = \sqrt{\left[\frac{P^2}{2m}\right]^2 + \frac{N_0}{N} W(\vec P)\frac{P^2}{m}} \qquad III.18.$$

Poslednji izraz pretstavlja energije elektronskih ekscitacija u tečnom He. Ako umesto W uzmemo srednju vrednost $\overline{W}$ koja u modelu tvrdih svera treba da bude pozitivna i proporcionalna dužini raspadanja onad se zakon disperzije za elementarnu ekscitaciju u tečnom He može napisati kao

$$\mathcal{E}_{\vec p} = P\sqrt{\frac{P^2}{4m^2} + \frac{N_0}{mN}\overline{W}} \qquad III.19.$$

ovde je fazna brzina:

$$\frac{\mathcal{E}_{\vec p}}{P} = \sqrt{\frac{P^2}{4m^2} + \frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}} \qquad III.20.$$

Ova funkcija ima minimum za p = o a vrednost tog minimuma je

$$\min \frac{\mathcal{E}_{\vec p}}{P} = \sqrt{\frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}} = C_{He^4} \qquad III.21.$$

Minimum fazne brzine elementarnih ekscitacija u tečnom He, kao što se vidi, je pozitivna veličina $\sqrt{\frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}}$, koja pretstavlja brzinu zvuka u tečnom He^4. Eksperimentalno je nadjeno da C_{He^4} iznosi 24o m/sek Na osnovu formule /III.21./ vidimo da je minimum fazne brzine u tečnom He pozitivna veličina pa ovaj rezultat pretstavlja objašnjenje činjenice da je tečni He^4 superfluidan. Na kraju treba napomenuti da u oblasti malih impulsa u izrazu /III.19./ možemo zanemariti $\frac{p^2}{4m^2}$ u odnosu na $\frac{N_0}{Nm}\bar{W}$ pa je

$$\mathcal{E}_{\vec{p}} \cong P\sqrt{\frac{N_0}{N}\frac{\bar{W}}{m}} \qquad II\,1.22.$$

tj. elementarne ekscitacije imaju zvučni zakon disperzije/energija je linearna funkcija impulsa/. U slučaju velikih impulsa $\frac{N_0}{Nm}\bar{W}$ je daleko manje od $\frac{p^2}{4m^2}$ pa imamo

$$\mathcal{E}_{\vec{p}} \cong \frac{P^2}{2m} \qquad II\,1.23.$$

tj. elementarne ekscitacije imaju kvadratni zakon disperzije. Znači, teorija Bogoljubova daje u oblasti malih impulsa da su elementarne ekscitacije fononi /zvučni zakon disperzije/, dok u oblasti velikih impulsa elementarne ekscitacije imaju kvadtni zakon disperzije i odgovaraju tkz. rotonima iz teorije Landaua.

II 2. BOZE KONDENZACIJA U SISTEMU KVAZIČESTICA

O mogućnosti Boze kondenzacije u sistemu kvazičestica poslednje decenije mnogo se diskutovalo i objavljen je veliki broj radova. Boze kondenzacija u sistemu kvazičestica je moguća ukoliko je vreme uspostavljanja termodinamičke ravnoteže (t_c) u procesima sudara kvazičestica, kraće od vremena života kvazičestice (t_e). Ovde pre svega treba analizirati vreme uspostavljanja termodinamičke ravnoteže za Frenkelove eksitone. To isto važi će i za polaritone iz gornje grane, pa su prema tome uslovi za Boze kondenzaciju jednih i drugih približno isti.

Vreme uspostavljanja termodinamičke ravnoteže ili vreme relaksacije daje se kao:

$$t_c = \frac{1}{n\pi\sqrt{2}}\,\frac{1}{a^2 v} \qquad II\,2.1.$$

gde je n-broj eksitona u sm^3 kristala, a-pretstavlja prečnik eksitona i v-brzina eksitona.

Jaki laseri mogu da ekscitiraju kristal toliko da broj n iznosi od 1-lo % Lošmitovog broja tako da je $n \sim 2{,}7 \cdot 10^{17} - 2{,}7 \cdot 10^{18}$ Kao što je poznato elektron i ,,šupljina,, pri pobudjivanju molekula ostaju u granicama molekula tako da eksciton praktično ima prečnik molekula tj. $a \sim 5 \cdot 10^{-8} cm - 10^{-7} cm$
Grupna brzina eksitona data je

$$v_g = \frac{dE_p}{d_p} = \frac{P}{m^*} = \frac{2a^2\alpha}{\hbar} k$$

Ako uzmemo da je $\alpha \sim 2 \cdot 10^{-13}$ erga i da k ima vrednost kao i svetlost koja pobudjuje eksiton tj. $k \sim 10^{5} - 10^{6} cm\, s^{-1}$ nalazimo da je

$$v_g \sim 4 \cdot 10^{5} - 4 \cdot 10^{6} cm\, s^{-1}$$

Postavljajući vrenosti za n, a i v_g u izraz za vreme relaksacije dobijamo

$$t_c \sim 10^{-9} - 10^{-13} sec \qquad II\, 2.2.$$

Eksperimenti pokazuju da je vreme života eksitona koji nastaju kao rezultat pobudjenja elektronskih podsistema u kristalu reda 10^{-7}- 10^{-8}sek. Prema tome kod eksitona Frenkela kao i kod polaritona iz gornje grane, uslov za stvaranje kondenzata je ispunjen. Drugim rečima u periodu od momenta stvaranja eksitona do momenta njegovog isčezavanja luminiscencija postoji jedan interval vremena.

$$\Delta t \sim 10^{-10} - 10^{-8} sec \qquad II\, 2.3.$$

kada se stanje Boze kondenzacije u sistemu realizuje.

III 1.ANHARMONIJSKI DELOVI POLARITONSKOG HAMILTONIJANA

U prvoj glavi koristili smo samo harmonijske delove eksitonskog, odnosno polaritonskog hamiltonijana.Da bi ispitali Boze kondenzaciju u sistemu polaritona,moramo uzeti u obzir i anharmonijske delove ovih hamiltonijana.To znači da Pauli operatore treba na osnovu formule /Il.13./ tačnije izraziti preko Boze operatora.Naime,do sada smo koristili prve članove beskonačnih bozonskoh redova iz izraza /Il.13./.Efekat anharmonijskih delova uračunaćemo ako uzmemo i sledeći član razvoja Pauli operatora po Boze operatorima tj.

$$P_{\vec n}^{+} = B_{\vec n}^{+} - B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} \qquad P_{\vec n} = B_{\vec n} - B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec n} \qquad III\,1.1.$$

$$P_{\vec n}^{+} P_{\vec n} = B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec n}$$

Ako ovo uvrstimo u hamiltonijan /Il.lo./ on postaje

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec n} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} + \sum_{\vec n \vec m} \tilde{\alpha}_{\vec n \vec m} B_{\vec n}^{+} B_{\vec m} + \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} \beta_{\vec n \vec m} \cdot$$

$$\cdot \left(B_{\vec n}^{+} B_{\vec m}^{+} + B_{\vec m} B_{\vec n} \right) - \sum_{\vec n \vec m} \tilde{\alpha}_{\vec n \vec m} \left(B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec m} + B_{\vec n}^{+} B_{\vec m}^{+} B_{\vec m} B_{\vec m} \right) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m} \beta_{\vec n \vec m} \left(B_{\vec n}^{+} B_{\vec m}^{+} B_{\vec m}^{+} B_{\vec m} + B_{\vec m}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} + B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec n} B_{\vec m} + \right.$$

$$\left. + B_{\vec m}^{+} B_{\vec m} B_{\vec m} B_{\vec n} \right) + \sum_{\vec n \vec m} \gamma_{\vec n \vec m} B_{\vec n}^{+} B_{\vec m}^{+} B_{\vec m} B_{\vec n} - \Delta \sum_{\vec n} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec n} \qquad III\,1.2.$$

Svi delovi četvrtog reda u formuli /IIIl.2./ odgovaraju procesima rasejanja eksitona.Kako su α, β i γ reda veličine o,1 ev,dok je Δ reda veličine 5 ev,od anharmonijskih delova bozonskog hamiltonijana zadržavamo samo najveći član, koji je proporcionalan Δ .Znači,efektivni eksitonski hamiltonijan imaće oblik:

$$H_{eff} = \sum_{\vec{n}} \Delta B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \tilde{\alpha}_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$(B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}}) - \Delta \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \qquad III\,1.3.$$

Anharmonijski deo ovog hamiltonijana možemo napisati u sledećem obliku:

$$H_A = -\Delta \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} 2\Delta\, \delta_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \qquad III\,1.4.$$

tako da se sada vidi da on odgovara procesu rasejanja eksitona na delta-potencijalu.Kako je potencijal $2\Delta\delta_{\vec{n}\vec{m}}$ daleko veći od kinetičke energije eksitona,zbog toga se ne može analizirati proces rasejanja pomoću Bornovih aproksimacija,jer se one mogu koristiti samo u slučaju kada je kinetička energija rasejane čestice daleko veća od potencijala na kome se rasejava.Formulu za amplitudu rasejanj na delta-potencijalima dali su Konobejev i Dubovski i ona glasi:

$$f = \frac{a}{2}\,\frac{\xi}{1-\xi+\xi J^2 - i\frac{\pi}{2}\xi J} \qquad III\,1.5.$$

gde je a - konstanta kristalne rešetke

$\xi = \frac{\Delta + 6\tilde{\alpha}}{2\pi\tilde{\alpha}}$; $J = \frac{k}{k_M}$ k_M - vrednost talasnog vektora na granici Brillouen-ove zone.

Pošto u aproksimaciji koja odgovara slabo pobudjenim ekszitonskim sistemima,najveći deo eksitona ima male talasne vektore možemo uzeti da je $k \ll k_M$ tj. $J \approx 0$ .A kao što je već poznato $\Delta \gg \tilde{\alpha}$,to znači da je $\xi \gg 1$ .Ukoliko uzmemo sve ovo u obzir,zatim u imeniocu izraza /III1.5./ zanemarimo jedinicu u odnosu na ξ ,formula /III 1.5./ se svodi na oblik:

$$f = -\frac{a}{2} \qquad III\,1.6.$$

Dakle,amplituda rasejanja na delta-potencijalu je uvek negativna. Ako u izrazu /III 1.4./ predjemo na reprezentaciju potencijala preko dužine rasejanja po poznatoj formuli

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} U_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} = \frac{4\pi f \hbar^2}{m a^3} \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \qquad III\,1.7.$$

tj.izvršimo zamenu

$$\Delta = -\frac{4\pi \frac{a}{2} \hbar^2}{\frac{m^*}{2} a^3} = -\frac{4\pi \hbar^2}{m^* a^2} \qquad III\,1.8.$$

gde je m^*-efektivna masa eksitona koja je data sa $m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 \mathcal{L}}$ III 1.9.

dobijamo

$$H_A = \frac{4\pi \hbar^2}{m^* a^2} \sum B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \qquad III\,1.10.$$

Kao što vidimo rasejanje u delta-jami efektivno se svodi na rasejanje eksitona u odbojnom potencijalu. Veličina ovog efektivnog odbojnog potencijala, ako uzmemo da je $\mathcal{L} \approx 1{,}3 \cdot 10^{-1} eV$, iznosi

$$\frac{4\pi \hbar^2}{m^* a^2} = 8\pi \mathcal{L} \sim 3\,eV \qquad III\,1.11.$$

Posle prelaska na Furije likove operatora u hamiltonijanu /III1.3./ pri čemu je anharmonijski deo dat kao

$$H_A = A \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \qquad A = 8\pi \mathcal{L} \sim 3eV \qquad III\,1.12.$$

dobijamo konačno

$$H = \sum_{\vec{k}} (\Delta + \mathcal{L}_{\vec{k}}) B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + \frac{A}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_4} \cdot \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \qquad III\,1.13.$$

Ovaj hamiltonijan je uzet u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji, što znači da smo iz formule /III 1.3./ izbacili član proporcionalan $\beta_{\vec{n}\vec{m}}$. Ako se ograničimo na oblast malih talasnih vektora, poslednji izraz možemo napisati kao

$$H = \sum_{\vec{k}} \left(\tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + \frac{A}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \qquad III\,1.14.$$

gde je:

$$\tilde{\Delta} = \Delta + 6\mathcal{L} \qquad m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 \mathcal{L}} \qquad III\,1.15.$$

Matrični elemenat $\tilde{\mathcal{L}}_{\vec{n}\vec{m}}$ uzimamo da je negativan, tako da eksitoni imaju pozitivnu efektivnu masu.

Hamiltonijan interakcija eksitona sa fotonima dat je izrazom /I2.16./,/Boze operatore zamenjujemo Pauli operatorima/

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} \left(P_{\vec{k}}^{+} \alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}}^{+} P_{\vec{k}} + P_{\vec{k}}^{+} \alpha_{-\vec{k}}^{+} + \alpha_{-\vec{k}} P_{\vec{k}} \right) \qquad III\,1.16.$$

gde je

$$P_{\vec{k}}^{+} = B_{\vec{k}}^{+} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}^{+} B_{\vec{q}_1}^{+} B_{\vec{q}_2}$$

$$P_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} B_{\vec{q}_2}^{+} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \qquad III\,1.17.$$

Posle zamene /III1.17./ u /III1.16./ dobijamo

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} \left(B_{\vec{k}}^{+} \alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^{+} \alpha_{-\vec{k}}^{+} + \alpha_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) -$$

$$- \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \vec{q}_1 \vec{q}_2} T_{\vec{k}} \left(B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}^{+} B_{\vec{q}_1}^{+} B_{\vec{q}_2} \alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{q}_2}^{+} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} + \right.$$

$$\left. + B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2}^{+} B_{\vec{q}_1}^{+} \alpha_{-\vec{k}}^{+} B_{\vec{q}_2} + B_{\vec{q}_2}^{+} B_{\vec{q}_1} B_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} \alpha_{-\vec{k}} \right) \qquad III\,1.18.$$

U daljem računu pretpostavićemo da su vektori dipolnog momenta prelaza i vektor polarizacije fotona približno ortogonalni tako da je

$$T_{\vec{k}} = \vec{\Omega}_{\vec{k}}^{f} \, \vec{\ell}_{\vec{k}} \ll \Delta \qquad III\,1.19.$$

Na osnovu ove pretpostavke odbacujemo sve anharmonijske delove hamiltonijana /III1.18./.Posle svega,hamiltonijan sistema kristal + polje fotona sa uračunavanjem anharmonijskih efekata ima oblik

$$H = H_{HAR.} + H_{ANHAR.} \qquad III\,1.20.$$

gde je

$$H_{HAR.} = \sum_{\vec{k}} E_e(\vec{k}) B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} E_\phi(\vec{k}) \alpha^+_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} +$$

$$+ \sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} \left(B^+_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + \alpha^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} + B^+_{\vec{k}} \alpha^+_{-\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}} B_{\vec{k}} \right) \qquad III\,1.21.$$

$$H_{ANHAR.} = A \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_4} \, \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \qquad III\,1.22.$$

$$E_e(\vec{k}) = \tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad E_\phi(\vec{k}) = \hbar c |\vec{k}|$$

$$T_{\vec{k}} = \vec{\Omega}^f_{\vec{k}} \vec{e}_{\vec{k}} \qquad A = 8\pi \mathcal{L} \sim 3eV \qquad III\,1.23.$$

Harmonijski deo hamiltonijana dijagonalizovan je u drugom paragrafu prve glave i ima oblik

$$H_{HAR.} = \sum_{\vec{k}} \left[\mathcal{E}_1(\vec{k}) C^+_{1\vec{k}} C_{1\vec{k}} + \mathcal{E}_2(\vec{k}) C^+_{2\vec{k}} C_{2\vec{k}} \right] \qquad III\,1.24.$$

gde su $\mathcal{E}_1(\vec{k})$ i $\mathcal{E}_2(\vec{k})$ date formulom /I2.31./,operatori $C_{1\vec{k}}$ i $C_{2\vec{k}}$ povezani su operatorima $B_{\vec{k}}$ i $\alpha_{\vec{k}}$ pretstavčjeni formulama /I2.23./ i /I2.33./

Obzirom da smo se u eksitonskom delu hamiltonijana ograničili Hajtler-Londonovom aproksimacijom u svim pomenutim formulama treba izvršiti sledeće zamene:

$$b_1 = B_{\vec{k}} \qquad b_2 = \alpha_{\vec{k}} \qquad \phi_{\vec{k}} = T_{\vec{k}} \qquad III\,1.25.$$

Da bi ispitali harmonijski deo hamiltonijana/III1.22./ treba u njemu preći od eksitonskih operatora $B_{\vec{k}}$ na polaritonske operatore $C_{1\vec{k}}$ i $C_{2\vec{k}}$.

Zbog ogromnog računa,ovo ne izvodimo sa tačnim formulama /I2.23./ i /I2.33./,već uzimamo aproksimativne formule koje naročito dobro aproksimiraju stvarne formule u oblasti eksiton-foton rezonance.
U ovoj oblasti je

$$E_e(\vec{k}) \cong E_\phi(\vec{k}) \cong \Delta \qquad \text{III 1.26.}$$

i ako još iskoristimo činjenicu da je po pretpostavci

$$T_{\vec{k}} << E_e(\vec{k}) \qquad \text{III 1.27.}$$

Formule /I2.23./ i /I2.33./ možemo zameniti sledećim formulama:

$$U_{11}(\vec{k}) = U_{12}(\vec{k}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{1}{4}\delta_{\vec{k}}\right)$$

$$U_{21}(\vec{k}) = -U_{22}(\vec{k}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{1}{4}\delta_{\vec{k}}\right) \qquad \text{III 1.28.}$$

$$V_{11}(\vec{k}) = V_{21}(\vec{k}) = V_{22}(\vec{k}) = -V_{23}(\vec{k}) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\,\delta_{\vec{k}}$$

$$\delta_{\vec{k}} = \frac{T_{\vec{k}}}{\Delta}$$

$$B^+_{\vec{k}} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(C^+_{1\vec{k}} + C^+_{2\vec{k}}\right)$$

$$\text{III 1.29.}$$

$$B_{\vec{k}} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(C_{1\vec{k}} + C_{2\vec{k}}\right)$$

Treba napomenuti da su poslednji izrazi napisani u apriksimaciji $\delta_{\vec{k}} \approx 0$.Što znači da u anharmonijskom delu hamiltonijana zanemarujemo sve popravke proporcionalne $T_{\vec{k}}$.Polaritonske energije imaju oblik

$$\mathcal{E}_1(\vec{k}) = E_e(\vec{k}) + T_{\vec{k}}\ ;\ \mathcal{E}_2(\vec{k}) = E_e(\vec{k}) - T_{\vec{k}} \qquad \text{III 1.30.}$$

Ako popravke proporcionalne $T\vec{k}$ zanemarimo i u harmonijskom delu polaritonskog hamiltonijana, a anharmonijski deo na osnovu formule /III 1.29./ napišemo u polaritonskim operatorima, dobijamo konačni efektivni hamiltonijan sistema polaritona u obliku:

$$
\begin{aligned}
H_{eff} = {} & \sum_k \left(\tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)\left(C^+_{1k} C_{1k} + C^+_{2k} C_{2k}\right) + \\
& + \frac{A}{4N} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \{ C^+_{1k_1} C^+_{1k_2} C_{1k_3} C_{1k_4} + C^+_{1k_1} C^+_{1k_2} C_{1k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{1k_1} C^+_{1k_2} C_{2k_3} C_{1k_4} + C^+_{1k_1} C^+_{1k_2} C_{2k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{1k_1} C^+_{2k_2} C_{1k_3} C_{1k_4} + C^+_{1k_1} C^+_{2k_2} C_{1k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{1k_1} C^+_{2k_2} C_{2k_3} C_{1k_4} + C^+_{1k_1} C^+_{2k_2} C_{2k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{2k_1} C^+_{1k_2} C_{1k_3} C_{1k_4} + C^+_{2k_1} C^+_{1k_2} C_{1k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{2k_1} C^+_{1k_2} C_{2k_3} C_{1k_4} + C^+_{2k_1} C^+_{1k_2} C_{2k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{2k_1} C^+_{2k_2} C_{1k_3} C_{1k_4} + C^+_{2k_1} C^+_{2k_2} C_{1k_3} C_{2k_4} + \\
& + C^+_{2k_1} C^+_{2k_2} C_{2k_3} C_{1k_4} + C^+_{2k_1} C^+_{2k_2} C_{2k_3} C_{2k_4} \} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \qquad \text{III 1.31.}
\end{aligned}
$$

III.2 Zakon disperzije za polaritone u uslovima Boze kondenzacije.

U drugom paragrafu II glave konstatovali smo da u sistemu eksitona može da dodje do pojave Boze-kondenzacije. Gornja polaritonska grana /ove polaritone kreiraju i anihiliraju operatori C^+_{1k} i C_{1k}/ ima u većem delu intervala impulsa praktično iste osobine kao i eksitonska grana, pa zbog toga sva rasudjivanja koja su se odnosila na eksitone mogu se preneti na polaritone gornje polaritonske grane. U konkretnom slučaju polaritoni gornje grane mogu se kondenzovati. Donja polaritonska grana veoma je slična vakumskim fotonima. Pošto fotoni nemaju sposobnost kondenzovanja to je gotovo sigurno da se i polaritoni iz donje grane /ovima odgovaraju operatori C^+_{2k} i C_{2k}/, takodje ne mogu kondenzovati.

Polazeći od ovih pretpostavki i ispitujući hamiltonijan /III1.31./ u uslovima Boze-kondenzacije uzimamo da je:

$$\begin{aligned} C^+_{10} C_{10} &= N_{10} \approx N \\ C^+_{20} C_{20} &= N_{20} = 0 \\ C^+_{10} &= C_{10} = \sqrt{N_{10}}\,. \end{aligned} \qquad III\ 2.1.$$

takodje važi:

$$\sum_{k\neq 0} C^+_{1k} C_{1k} = N - N_{10} \ll N_{10} \qquad III\ 2.2.$$

Treba napomenuti da smo zbog uprošćenja računa predpostavili da su gotovo svi atomi kristala ekscitirani /kao što je poznato ovo je moguće realizovati jakim laserskim snopovima/ pa smo broj eksitona u sistemu N' izjednačili sa brojem molekula u kristalu N.

Ako u hamiltonijanu /III1.31./ izvršimo razdvajanje delova sa impulsom ravnim nuli i delova sa impulsom različitim od nule po sledećoj šemi:

$\vec{k}_1$	$\vec{k}_2$	$\vec{k}_3$	$\vec{k}_4$
0	0	0	0
$\vec{k}_1$	$\vec{k}_2$	0	0
$\vec{k}_1$	0	$\vec{k}_3$	0
$\vec{k}_1$	0	0	$\vec{k}_4$
0	$\vec{k}_2$	$\vec{k}_3$	0
0	$\vec{k}_2$	0	$\vec{k}_4$
0	0	$\vec{k}_3$	$\vec{k}_4$
$\vec{k}_1$	$\vec{k}_2$	$\vec{k}_3$	$\vec{k}_4$

uzimajući u obzir uslove /III2.1./ i /III2.2./ dobijamo:

$$H_{eff}^{(2)} = \tilde{\Delta} N_{10} + \sum_{k\neq 0} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} C_{1k}^+ C_{1k} + \sum_{k\neq 0} \left(\tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) C_{2k}^+ C_{2k} + \frac{A}{4N} N_{10}^2 +$$

$$+ \frac{A N_{10}}{N} \sum_{k\neq 0} \Big[\frac{1}{4}\left(C_{1k}^+ C_{1,-k}^+ + C_{1-k} C_{1+k} + C_{2k}^+ C_{2-k}^+ C_{2-k} C_{2k}\right) +$$

$$+ \frac{1}{2}\left(C_{1k}^+ C_{2,-k}^+ + C_{2-k} C_{1,k}\right) + \left(C_{1k}^+ C_{1k} + C_{1k}^+ C_{2k} + C_{2k}^+ C_{1k} + C_{2k}^+ C_{2k}\right)\Big] \qquad III2.3.$$

Ako uzmemo približno da je

$$N_{10}^2 \cong N^2 - 2N \sum_{k\neq 0} C_{1k}^+ C_{1k} \qquad III2.4.$$

zatim u /III2.3./ zanemarimo $\left(\sum_{k\neq 0} C_{1k}^+ C_{1k}\right)^2$ konačno dobijamo:

$$H_{eff}^{(2)} = H_0 + H_2 \qquad III2.5.$$

gde je

$$H_0 = N\left(\tilde{\Delta} + \frac{1}{4} A\right) \qquad III2.6.$$

$$H_2 = \sum_{k\neq 0} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{A}{2}\right) C_{1k}^+ C_{1k} + \sum_{k\neq 0} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \tilde{\Delta} + A\right) C_{2k}^+ C_{2k} + A \sum_{k} \Big(C_{1k}^+ C_{2k} +$$

$$+ C_{2k}^+ C_{1k}\Big) + \frac{A}{4} \sum_{k\neq 0} \Big\{ C_{1k}^+ C_{1-k}^+ + C_{1,-k} C_{1k} + C_{2k}^+ C_{2-k}^+ + C_{2,-k} C_{2k} + 2C_{1k}^+ C_{2,-k}^+ +$$

$$+ 2C_{2-k} C_{1k} \Big\} \qquad III2.7.$$

Hamiltonijan H_2 može se napisati u obliku:

$$H_2 = \sum_k \{ \sum_{s,s'=1}^{2} M_{ss'} C_s^+ C_{s'} + \frac{1}{2} \sum_{s,s'=1}^{2} N_{ss'} (C_s^+ C_{s'}^+ + C_{s'} C_s)$$

$$M_{11} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{A}{2} \qquad M_{22} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \tilde{\Delta} + A$$

$$M_{12} = M_{21} = A \qquad N_{11} = N_{22} = N_{12} = N_{21} = \frac{A}{2} \qquad III\,2.8.$$

Jednačine kretanja za operatore Cs date su sa

$$E\dot{C}_s = \sum_{s'=1}^{2} (M_{ss'} C_{s'} + N_{ss'} C_{s'}^+) \qquad III\,2.9.$$

Od operatora Cs prelazimo na operatore Q_σ po formuli

$$C_s = \sum_{\sigma=1}^{2} (\theta_{s\sigma} Q_\sigma e^{-iEt} + \omega_{s\sigma} Q_\sigma^+ e^{iEt}) \qquad III\,2.10.$$

gde funkcije $\theta_{s\sigma}$ i $\omega_{s\sigma}$ zadovoljavaju uslove:

$$\sum_{\sigma=1}^{2} (\theta_{s\sigma} \theta_{s'\sigma}^* - \omega_{s\sigma}^* \omega_{s'\sigma}) = \delta_{ss'}$$

$$\sum_{s=1}^{2} (\theta_{s\sigma} \theta_{s\sigma'}^* - \omega_{s'\sigma} \omega_{s\sigma}^*) = \delta_{\sigma\sigma'} \qquad III\,2.11.$$

Zamenjujući /III2.lo./ u /III2.9./ dobijamo sledeći sistem jednačina za funkcije $\theta_{s\sigma}$ i $\omega_{s\sigma}$:

$$(E - M_{11}) \theta_{1\sigma} - M_{12} \theta_{2\sigma} - N_{11} \omega_{1\sigma} - N_{12} \omega_{2\sigma} = 0$$

$$-M_{21} \theta_{1\sigma} + (E - M_{22}) \theta_{2\sigma} - N_{21} \omega_{1\sigma} - N_{22} \omega_{2\sigma} = 0$$

$$N_{11} \theta_{1\sigma} + N_{12} \theta_{2\sigma} + (E + M_{11}) \omega_{1\sigma} + M_{12} \omega_{2\sigma} = 0 \qquad III\,2.12.$$

$$N_{21} \theta_{1\sigma} + N_{22} \theta_{2\sigma} + M_{21} \omega_{1\sigma} + (E + M_{22}) \omega_{2\sigma} = 0$$

Uslov netrivijalne rešivosti sistema /III.2.12./ ima oblik:

$$\begin{vmatrix} (E-M_{11}) & -M_{12} & -N_{11} & -N_{12} \\ -M_{21} & E-M_{22} & -N_{21} & -N_{22} \\ N_{11} & N_{12} & E+M_{11} & M_{12} \\ N_{21} & N_{22} & M_{21} & E+M_{22} \end{vmatrix} = 0 \qquad III\,2.13.$$

Rešavajući determinantu za vrednost energije E dobijamo sledeću bikvadratnu jednačinu

$$E^4-(X^2+Y^2+2Z^2-4T^2)E^2+[(Z^2-XY)^2- - (X+Y-2Z)^2T^2]=0 \qquad III\,2.14.$$

gde je

$$X=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+\frac{A}{2}$$

$$Y=\tilde{\Delta}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+A. \qquad III\,2.15.$$

$$Z=A \qquad T=\frac{1}{2}A$$

Rešavajući jednačinu /III2.14./ za energije polaritona u uslovima Boze kondenzacije dobijamo sledeće izraze:

$$\mathcal{E}_{1,2}(\vec{k})=\left\{\frac{X^2+Y^2+2Z^2-4T^2}{2}\pm\right. \pm\sqrt{\frac{X^2+Y^2+2Z^2-4T^2}{2}+(X+Y-2Z)^2-(Z^2-XY)^2}\left.\right\}^{1/2} \qquad III\,2.16.$$

Formula za energiju koju smo dobili dosta je glomazna zato je nećemo analizirati u celoj oblasti impulsa.

U oblasti velikih impulsa gde se A može zanemariti u odnosu na kinetičku energiju dobijamo:

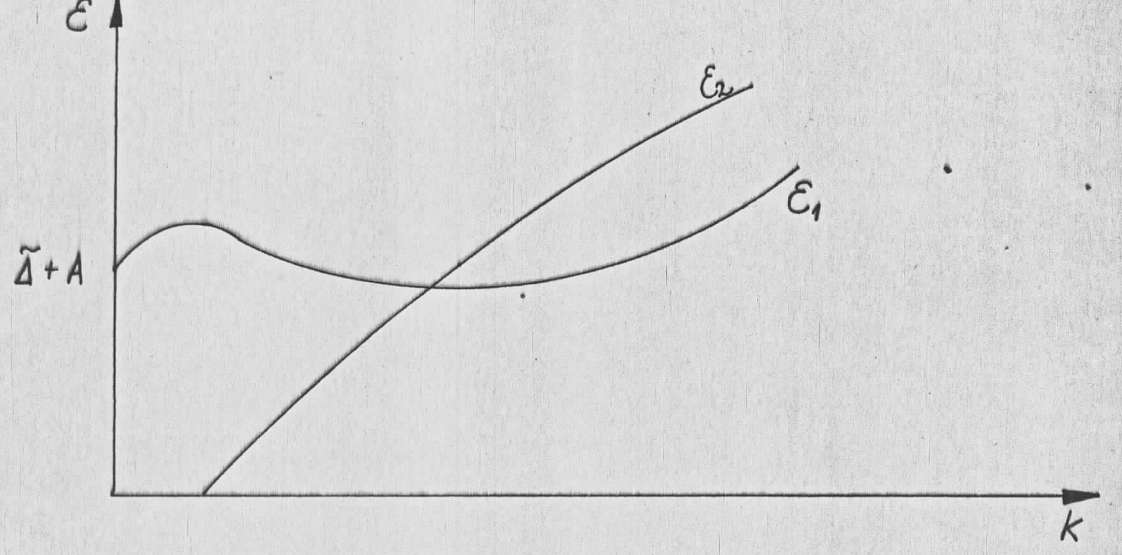
$$\mathcal{E}_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad ; \quad \mathcal{E}_2 = \tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{III 2.17.}$$

U oblasti malih impulsa, kada se kinetička energija može zanemariti u odnosu na A dobijamo:

$$\mathcal{E}_1 = \tilde{\Delta} + A + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$\mathcal{E}_2 = \frac{iA}{2} \sqrt{\frac{A}{\Delta}} \tag{III 2.18.}$$

Kao što vidimo u oblasti malih impulsa ekscitacije grane $\mathcal{E}_2$ imaju visoko prigušenje i nestabilne su, dok grana $\mathcal{E}_1$ ima visok "gep" $\tilde{\Delta}+A$. Grafički se ovo može predstaviti na sledeći način



Opšti zaključak je da Boze kondenzacija u sistemu polaritona dovodi do sledećih uočljivih efekata:

a) jako prigušenje jedne grane elementarnih ekscitacija,

b) do povećanja "gep"-a druge grane elementarnih ekscitacija,

c) do presecanja grana /znači da opet imamo slučaj rezonance,koja kod polaritona kada se ne kondenzuju ne postoji./,

d) obavezno dolazi do pojave negativne disperzije i

e) približno linearan zakon disperzije ima ona grana,koja se u oblasti malih impulsa prigušuje.

Zaključak

Rezultati ovog rada mogu se rezimirati na sledeći način

a) u slučaju visokih koncentracija optičkih pobudjenja u kristalu, koje se mogu postići primenom lasera, u sistemu polaritona moguće je realizovati Boze-Ajnštajnove kondenzacije,

b) ovaj efekat vremenski traje oko 10^{-10} sek.

c) za ovo vreme polaritonski gas postao je superfluidan, što drugim rečima znači da se optička pobudjenja prostiru kroz kristal bez rasejanja na molekulima,

d) u uslovima kondenzacije jedna grana elementarnih ekscitacija je nestabilna u oblasti malih impulsa /ima visoko prigušenje/, a u oblasti većih impulsa ima prvo linearan, pa kvadratni zakon disperzije,

e) druga grana elementarnih ekscitacija ima praktično udvojen eksitonski "gep", što znači da ih je teško pobuditi. Ova grana ima obavezno i pozitivnu i negativnu disperziju i to negativnu u oblasti srednjih impulsa, a pozitivnu u oblasti velikih impulsa. Elementarne eksitacije ove grane imaju tipično rotonsko ponašanje, što znači da se kod ovih ekscitacija realizuje efekat superfluidnosti i

f) u uslovima kondenzacije pojavljuje se efekat rezonance dve grane / one se presecaju/, koji kad sistema dodje u stacionarno stanje /pojave se normalni polaritoni bez kondenzacije/ iščezava.

LITERATURA

1° В.М. Агранович: ЖЭТФ 37, 430 (1959.)

2° С.В. Тябликов: „Методы квантовой теории магнетизма" Изд-во „Наука", 1965.

3° В.М. Агранович; Б.С. Тошич: ЖЭТФ 53, 149 (1947.)

4° О.А. Дубовский, Ю.В. Конобеев: ФТТ 6, 2599 (1964.)

5° О.А. Дубовский, Ю.В. Конобеев: ФТТ 7, 946 (1965.)

6° Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц: „Квантовая механика" ГМФЛ Москва, 1963.

7° Н.Н. Боголюубов: „Лекций по квантовой статистике" Киев, 1949.

8° В.М. Агранович, В.Л. Гинзбург: „Кристалооптика с учетом пространственной дисперзий и теория екситонов" Изд-во „Наука", 1965 Москва

9° В.М. Агранович: „Теория экситонов" Москва, 1969, Изд-во „Наука"