UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
GRUPA: FIZIKA

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

TERMODINAMIKA EKSITONSKOG SISTEMA

MENTOR

DR BRATISLAV TOŠIĆ

KANDIDAT

NEBOJŠA SIMIN

NOVI SAD 1974.

Najlepše se zahvaljujem
dr Bratislavu Tošiću na
pomoći pri izboru teme
i pisanju ovog rada

SADRŽAJ:

Pregled važnijih veličina i oznaka :

H - Hamiltonijan sistema

E - energija kvazi čestice

C - koncentracija kvazi čestice

σ - parametar uređenosti

N - broj elementarnih ćelija u kristalu /jednak broju molekula u slučaju koji se ovde razmatra/

θ - temperatura $= k_B T$

k_B - Bolcmanova konstanta

T - apsolutna temperatura

U - unitarni operator

$\check{s}$ - ermitski operator

s - anti ermitski operator

P - Pauli operator

B - Boze operator

Sp - špur, ili trag matrice /operatora/

$\hat{a}$ - Fermi operator

a, b, n, m, g, f, l - vektorske oznake uz operatore iz konfiguracionog prostora /prostora rešetke/

k, q, p - vektorske oznake uz operatore iz impulsnog prostora

Opšta napomena :

Najčešće su izostavljene oznake operatora: $\wedge$ $/\hat{P}, \hat{B}, \hat{H}/$ i oznake za vektor: $\rightarrow$ $/\vec{b}, \vec{m}, \vec{f}/$.

UVOD

Ovaj diplomski rad ima dvojaku svrhu i to metodološku i praktičnu.

Metodološki problem koji se ovde obrađuje odnosi se na pitanje kako izučavati termodinamičke osobine sistema u kojima se broj kvazi-čestica ne održava. Trenutno najefikasniji metod je da se rotacijom Hilbertovog prostora eksitonskih stanja, sa željenom tačnošću, eliminišu oni delovi Hamiltonijana koji ne održavaju broj kvazi-čestica, pa da se ekvivalentni Hamiltonijan ispituje standardnim metodama koje su dobro razvijene za sisteme u kojima se broj kvazi-čestica održava.

Praktična strana ispitivanja termodinamičkih karakteristika eksitonskog sistema povezana je sa problemom prelaska kristala u tzv. superradijativna stanja, tj. stanja u kojima je kristal optimalno optički napumpan. Poslednjih godina ovakva istraživanja postaju sve popularnija.

I GLAVA - OSOBINE EKSITONSKOG SISTEMA

§1. eksitoni Frenkela i Vanije-Mota

Prve teorije eksitona ne koriste modele[1], koji su korisni u proučavanju kristala sa raznim tipovima veza. Podrobnije izučavanje eksitonskih modela može se naći u radovima Frenkela[2], Pajerlsa[3], Vanijea[4], Davidova[5], Agranoviča[6] i drugih.

Dva su osnovna modela, u dve granične aproksimacije: Frenkela i Vanije-Mota. Za oba modela karakteristično je shvatanje eksitona kao vezanog para elektron-šupljina, obično slobodnog u zajedničkom kretanju kroz kristal. Apsorbovanjem fotona - kristal se pobuduje kao celina. Jedna od najbitnijih promena u kristalu je promena stanja elektrona, iz osnovnog /ako je bio u osnovnom stanju/ u neko pobuđeno stanje. Kaže se da tom prilikom elektron zauzme nov položaj, a na mestu gde je bio - stvori se šupljina. Elektron i šupljina su suprotno naelektrisani, pa eksiton ne učestvuje, neposredno, u provođenju elektriciteta. Eksiton je kvazi čestica. Kroz kristal se kreće zahvaljujući procesu emisivne rekombinacije, pri kojoj elektron "padne" u stanje šupljine, što je propraćeno emisijom fotona ili fonona. Ovi fotoni, ili fononi mogu da dovedu do novog pobuđenja, tj. stvaranja tzv. sekundarnih eksitona.

Frenkelovi eksitoni

su jako vezani, tj. malog radijusa /rastojanje između elektrona i šupljine je manje od konstante rešetke/. Zovu se i molekularni eksitoni, jer se najčešće javljaju u molekularnim kristalima. Kaže se da je Frenkelov eksiton lokalizovan na jednom molekulu, jer elektron prilikom eksitacije ostaje blizu šupljine, a ni šupljina ni elektron ne napuštaju molekul u kome se dogodilo pobuđenje. U svom kretanju kroz kristal, eksiton će "preskakati" sa molekula na molekul procesom emisivne rekombinacije, pri čemu elektron i šupljina ostaju u neposrednoj blizini. Između elektrona i šupljine postoji kulonovska veza privlačenja, koja utiče na eksitonski spektar.

Van der Valsovim karakterom veze odlikuju se dve grupe molekularnih kristala.[7] U prvu grupu se ubrajaju kristali plemenitih gasova: Ne, Ar, Kr, Xe, koji imaju kubnu strukturu, i drugi. Oni imaju kompletiran elektronski omotač i zato je nemoguće pravljenje negativnog jona /ne primaju elektrone/. S druge strane, imaju visok jonizacioni potencijal, pa je teško napraviti pozitivan jon /elektroni ne beže daleko od šupljine/. U drugu grupu spadaju dvo, ili više atomski molekuli, čvrsto povezani valentnim silama. U odnosu na susedne molekule, takav molekul se ponaša kao zatvorena celina i teško izmenjuje elektrone. Kako su molekularni kristali jaki dipoli, veza između molekula je dipol-dipolna. Tu spadaju: antracen, naftalin, benzol i drugi.

Foton eksitira molekul tako što dovede do promene stanja elektrona, ili do promene unutrašnjih vibracija /vibroni/, koje nećemo razmatrati. Deeksitacijom dolazi do novog pobuđenja i posle izvesnog vremena svi molekuli će biti pobuđeni. Kada eksiton prođe kroz ceo kristal, daje fluorescentnu svetlost, koja je rezultat konačne deeksitacije kristala. Vreme života jednog eksitona menja se od kristala do kristala.

Eksitoni Vanije-Mota su slabo vezani, tj. rastojanje vezanog para elektrona i šupljine /e, h/ veliko je u odnosu na konstantu rešetke. Ovi eksitoni najčešće se javljaju u poluprovodnicima. U okviru teorije zona, nastajanje Motovog eksitona[10] može da se prikaže kao posledica osvetljavanja kristala monohromatskom svetlošću dovoljne energije da podigne elektron iz valentne zone u zonu provodnosti. Tom prilikom dobijaju se tzv. eksitonske zone koje, u zavisnosti od temperature i drugih faktora, mogu da budu šire ili uže. Eksitonske zone nalaze se ispod praga provodne kristalne zone.

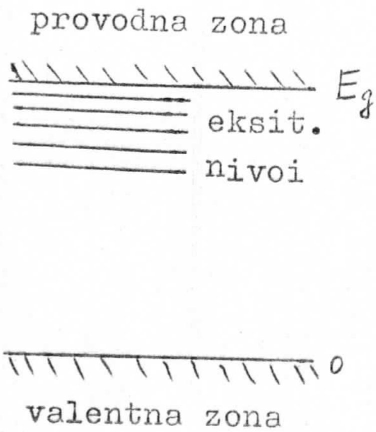
Kulonov potencijal privlačenja elektrona i šupljine je:

$$U_{(r)} = -\frac{e^2}{\varepsilon r}$$

e - naelektrisanje elektrona
ε - dielektrična propustljivost
r - rastojanje između čestica /e, h/

Ispitujući linije spektra kupro oksida Cu_2O, Baumajster[8], Gros[9] i drugi, ustanovili su dosta dobro slaganje eksitonskog spektra sa modifikovanom Ridbergovom formulom:

$$E_n = E_g - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon n^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 n^2}$$



sl. 1.

E_g - energija procepa između valentne i provodne kristalne zone

n - glavni kvantni broj

m_e, m_h - efektivne mase elektrona i šupljine

μ - redukovana masa $\mu = \frac{m_e \cdot m_h}{m_e + m_h}$

$\hbar k$ - kvazi-impuls

Naročito dobro slaganje je za n> 2, na niskim temperaturama. U to vreme /1961. g./ Tomas i Hopfild[11] eksperimentišu sa CdS i daju iscrpnu analizu slabo vezanih eksitona u CdS, i prikaz kretanja eksitona kroz kristalnu rešetku.

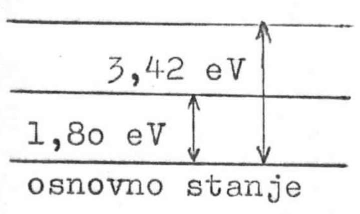
§2. Spektar Frenkelovih eksitona

Spektralne linije eksitona u molekulskom kristalu slične su spektralnim linijama /nivoima/ elektronskih eksitacija za izolovan molekul. Pokazalo se da eksitonski nivoi mogu da budu i oštriji od elektronskih nivoa za izolovan molekul. U principu, svaki eksitonski nivo zbog svoje širine obrazuje zonu.

Kod alkalnih halogenida, u radovima Apkera, Tafta, Mota i drugih, zapaženi su apsopcioni maksimumi najniže energije, koji ne rezultiraju u stvaranje slobodnih elektrona i šupljina. Predpostavlja se da su ova najniža energijska stanja u alkalnim halogenidima, zapravo, eksitonska stanja.

Prvi koji su ispitivali eksitonski spektar molekularnih kristala su: Prihotko,[12] Mek Konel,[13] Krejg[14] i Volf.[15]

Avakian, Kepler[16] i drugi detektovali su eksitone u antracenu /sl. 2. i 3./.



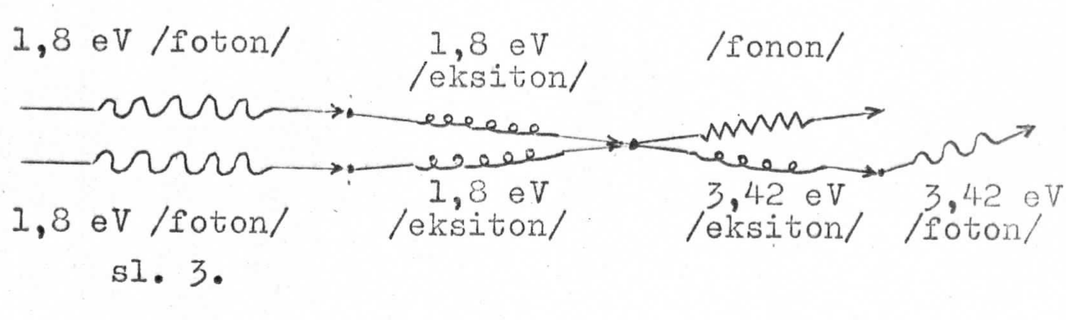
s = o /singlet/

s = 1 /triplet/

s = o /singlet/

sl. 2.

s je spin elektrona



sl. 3.

Na sl. 2. naznačeni su najniži eksitonski nivoi u antracenu. Optički prelaz, spin (o)→ spin(1), nije dozvoljen prelaz, ali je verovatnoća prelaza, ipak, različita od nule. Intenzivnim laserskim snopom energije 1,79 eV, stvaraju se u znatnoj koncentraciji tripletni eksitoni, koji se mogu spojiti u parove i obrazovati jedan singletni eksiton energije 3,42 eV /sl. 3./, dok višak energije preuzima rešetka /fononi/. Pošto je singletni eksiton energije 3,42 eV povezan sa osnovnim stanjem dozvoljenim prelazom, emituje se foton energije 3,42 eV, koji je i detektovan u eksperimentima. Tripletni eksitoni su detektovani, još i u solima tetracijanohinometana sa jonskim radikalima i drugde.

U ovom radu ograničićemo se na teseralne sisteme sa prostom kubnom rešetkom. Smatraćemo da je u elementarnoj ćeliji samo jedan molekul. U tom slučaju broj najbližih suseda, tj. koordinacioni broj je 6. Uzećemo da pored osnovnog stanja postoji samo jedno pobuđeno stanje, jer su u najvećem broju slučajeva sledeći pobuđeni eksitonski nivoi dosta udaljeni od prvog pobuđenog eksitonskog nivoa. Može se reći da je u tom slučaju prvi eksitonski nivo efektivni nivo, a ostali se zanemaruju. Posmatramo, znači, slučaj dva nedegenerisana nivoa.

§3. Neodržanje broja eksitona i problemi koji se usled toga javljaju

Kada ne može da se reši svojstveni problem Hamiltonijana $\hat{H}_{\vec{n}} \Psi^f_{(\vec{x})} = E^f_{\vec{n}} \Psi^f_{(\vec{x})}$ /bilo kog molekula/, pribegava se metodu druge kvantizacije, koji nam omogućava nalaženje energetskog spektra bez poznavanja svojstvene funkcije $\Psi^f_{(\vec{x})}$. Ukupni Hamiltonijan kristala može da se piše ovako:

$$\hat{H} = \sum_{n} \hat{H}_n + \frac{1}{2} \sum_{n,m}' \hat{V}_{nm} \qquad \text{I 3.1}$$

$$\hat{H}_n = E^f_n a^+_{nj} a_{nj}$$

$$\hat{V}_{nm} = V_{nm}(j_1, j_2, j_3, j_4)\, a^+_{nj_1} a^+_{mj_2} a_{mj_3} a_{nj_4}$$

V_{nm} - matrični element dipol-dipolne interakcije

Elektroni i šupljine su fermioni /a , a/.

a^+_{nj} - operator kreira elektron u stanju "j"

a_{nj} - operator uništava elektron u stanju "j"

n,m - vektorske oznake pozicije molekula /smatraćemo da je u čvoru rešetke/

j_1, j_2, j_3, j_4 - kvantni brojevi koji su oznake stanja u kome se nalazi ~~elektron~~ MOLEKUL

$\sum_{n,m}'$ - sumiranje se vrši za $n \neq m$

Eksitoni nisu ni fermioni ni bozoni, već paulioni. Zamenimo fermionske operatore Pauli operatorima, tako da podrazumevamo postojanje samo osnovnog stanja /o/ i jednog pobuđenog stanja /f/ molekula. $j = \begin{cases} o \\ f \end{cases}$

Komutacione relacije, bolje rečeno antikomutacione relacije za Fermi operatore i uslov normiranja, izgleda ovako:

$$\{a_{nj}, a^{+}_{mj'}\} = a_{nj}a^{+}_{mj'} + a^{+}_{mj'}a_{nj} = \delta_{n,m}\delta_{j,j'}$$

$$\{a_{nj}, a_{mj'}\} = \{a^{+}_{nj}, a^{+}_{mj'}\} = 0 \quad ; \quad a^{+2}_{nj} = a^{2}_{nj} = 0$$

$$\sum_{j} a^{+}_{nj}a_{nj} = a^{+}_{no}a_{no} + a^{+}_{nf}a_{nf} = 1 \qquad \text{I } 3.2$$

Po definiciji:

$$P^{+}_{nf} = a^{+}_{nf}a_{no} \quad ; \quad P_{nf} = a^{+}_{no}a_{nf} \qquad \text{I } 3.3$$

P^{+}_{nf} - operator uništava elektron u osnovnom stanju /o/ i kreira ga u pobuđeno stanje /f/ - kreira eksiton u n-tom čvoru

P_{nf} - uništava elektron u stanju /f/ i kreira ga u osnovnom stanju /o/ - uništava eksiton u n-tom čvoru

$$\tilde{N}_{f} = a^{+}_{nf}a_{nf} = P^{+}_{nf}P_{nf} \qquad \text{I } 3.4$$

$\tilde{N}_{f}$ - totalni okupacioni broj, tj. ukupni broj eksitona /i ujedno fermiona u stanju "f"/

Osim kada je to neophodno, indeks /f/ više ne pišemo, budući da razmatramo pored osnovnog stanja /o/ samo jedno pobuđeno stanje /f/. Podrazumevamo da bilo koji operator, u daljem tekstu, osim indeksa čvora /n/, ima i indeks kvantnog broja pobuđenog stanja /f/.

Komutacione relacije za Pauli operatore su sledeće:

$$[P_n, P_m^+] = P_n P_m^+ - P_m^+ P_n = \delta_{nm}(1 - 2P_n^+ P_n)$$

$$[P_n, P_m] = [P_n^+, P_m^+] = P_n^2 = P_n^{+2} = 0$$

$$\tilde{N} = P_n^+ P_n$$

I 3.5

Koncentracija kvazi-čestica /eksitona/ je:

$$C = \langle P_n^+ P_n \rangle$$

I 3.6

Po definiciji parametar uređenosti je:

$$\sigma = \langle a_{no}^+ a_{no} - a_{nf}^+ a_{nf} \rangle$$

I 3.7

Uzimajući u obzir I 3.2 i I 3.6 imamo:

$$\sigma = 1 - 2C$$

I 3.8

Može se pokazati da ukupni broj eksitona $\tilde{N}$ ne komutira sa Hamiltonijanom eksitonskog sistema H. To znači da Hamiltonijan nije ermitski i da broj eksitona nije konstanta kretanja.

$$H = \Delta \sum_n P_n^+ P_n + \sum_{nm}{}' \alpha_{nm} P_n^+ P_m + \frac{1}{2} \sum_{nm}{}' \beta_{nm} (P_n^+ P_m^+ + P_n P_m) + \sum_{nm}{}' \gamma_{nm} P_n^+ P_n P_m^+ P_m$$

I 3.9

U Hamiltonijanu figurišu samo članovi koji zavise od Pauli operatora /normalni produkti kreacionih i anihilacionih Pauli operatora, jer $P_n^+ P_n P_m^+ P_m$ može da se piše i kao $P_n^+ P_m^+ P_n P_m$, zbog $n \neq m$/.

$$\Delta \cong E_n^f - E_n^o$$

I 3.10

Δ - energija gepa koja je približno jednaka razlici svojstvene energije pobuđenog stanja /f/ i osnovnog stanja /o/ jednog molekula /$E_n \gg Vnm$/

α_{nm} - matrični element prenosa energije eksitona

β_{nm} - takođe matrični element prenosa energije eksitona /pri čemu se ne uzima u obzir razmena elektrona među molekulima/

γ_{nm} - matrični element rasejanja eksitona

α_{nm}, β_{nm} i γ_{nm} su realne i parne funkcije $\left(\alpha_{nm} = \alpha_{mn}\right)$

Δ - realna funkcija $\quad \Delta \sim 5\ eV$

$$\alpha, \beta, \gamma \sim 0{,}1 \div 0{,}01\ [eV] \qquad \text{I } 3.11$$

Komutacione relacije za Pauli operatore ne održavaju se u Furije transformacijama, a to je dosada jedini mogući način da se iskoristi translaciona simetrija kristala za nalaženje kolektivnih svojstava kristala. Pauli operatore, prema tome, moramo zameniti ili Fermi operatorima ili Boze operatorima. Uzmimo na primer, Boze operatore.

Komutacione relacije za Boze operatore su:

$$[B_n, B_m^+] = \delta_{nm}$$

$$[B_n, B_m] = [B_n^+, B_m^+] = 0$$

$$\tilde{N}_B = B_n^+ B_n = 0, 1, 2, 3, \ldots, \infty \qquad \text{I } 3.12$$

S obzirom da za eksitonski sistem važi:

$$\tilde{N}_{nf} = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} ; \quad \sum_j \tilde{N}_{nj} = 1 ; \quad \sum_{n,j} \tilde{N}_{nj} = N \qquad \text{I } 3.13$$

ekvivalentni bozonski sistem u kome bi se izvršila prosta zamena Pauli operatora Boze operatorima /P = B,

$P^{+}= B^{+}/$, što se koristi u metodu približne druge kvantizacije Bogoljubova, dovela bi na osnovu I 3.12 do tzv. nefizičkog stanja, tj. nefizičkog broja eksitona $\tilde{N}_{n.f}>1$. Ostaje i problem dijagonalizacije kvadratnog dela takvog neermitskog Hamiltonijana.

Tačnom Boze reprezentacijom Pauli operatora rešen je problem nefizičkog stanja.

$$P_n = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_n^{+\nu} B_n^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} B_n$$

$$P_n^{+} = B_n^{+} \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_n^{+\nu} B_n^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{I } 3.14$$

Okupacioni broj $\tilde{N}$ izražen preko Boze operatora poslednjim formulama postaje nula za paran broj bozona, a jednak je jedinici za neparan broj bozona. Obično se uzima približan razvoj jednačina I 3.14:

$$P_n \cong B_n - B_n^{+} B_n B_n \; ; \; P_n^{+} = B_n^{+} - B_n^{+} B_n^{+} B_n$$

$$\tilde{N} \cong B_n^{+} B_n - B_n^{+} B_n^{+} B_n B_n \qquad \text{I } 3.15$$

Zamenom I 3.14 u $H_{/P/}$ dobijamo:

$$H_{(BOZE)} = H_{2(B)} + H_{4(B)} + H_{6(B)} + \dots + H_{\infty(B)} \qquad \text{I } 3.16$$

Zamenom I 3.15 u $H_{/P/}$ dobijamo:

$$H_{(B)} = H_{2(B)} + H_{4(B)} \qquad \text{I } 3.17$$

$$H_{2(B)} = \Delta \sum_{n} B_n^{+} B_n + \sum_{n,m}{}' \alpha_{nm} B_n^{+} B_m +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{n,m}{}' \beta_{nm} \left(B_n^{+} B_m^{+} + B_m B_n \right)$$

Da bi se dobio harmonijski spektar za koji je odgovoran kvadratni deo Hamiltonijana, bilo eksitonskog ili bozonskog, ukoliko se koristi U-V transformacija Bogoljubova[18] /linearna kombinacija novog kreacionog i novog anihilacionog, takođe, Boze operatora/, čini se greška odbacivanjem viših članova po Boze operatorima koji, takođe, daju doprinos energiji dobijenoj dijagonalizacijom samo kvadratnog dela Hamiltonijana $H_{2/P/}$. To se uočava kada se primenom U-V transformacije na članove višeg reda po Boze operatorima, dobiju i forme drugog reda po novim operatorima. Novodobijene forme drugog reda, po novim operatorima /takođe Boze/, daju popravku energije koju metod Bogoljubova ne uzima u obzir.

Problem neodržanja $\tilde{N}$ ni do danas nije na zadovoljavajući način rešen, baš zbog članova Hamiltonijana višeg reda po Boze /ili Fermi/ operatorima. Čak i kad bi pronašli ispravnu transformaciju za Pauli operatore, koja bi za njih bila kanonična, teškoće bi nastale usled toga što nije razvijena statistika za ovu vrstu kvazi-čestica /eksitona/.

Zahvaljujući činjenici da je energija gepa mnogo veća od širine eksitonske zone /koja je proporcionalna matričnim elementima interakcije/, radićemo sa tačnošću do malog parametra $\frac{b}{\Delta}$. Dijagonalizaciju ćemo izvesti pomoću Vajlovog identiteta koji je dao dobre rezultate i u drugim oblastima fizike.

II GLAVA - ROTACIJA PROSTORA EKSITONSKIH STANJA

§1. Vajlov identitet i primene

Slično U-V transformaciji, i Vajlov identitet treba da dijagonalizuje neermitski Hamiltonijan, za koji je poznato da ne odražava fizičku realnost. Pristup problemu je, ipak, nešto drugačiji /detaljno u II §2/.

Istaknuta primena Vajlovog identiteta javila se u teoriji superprovodnosti. Prekretnicu u teoriji superprovodnosti značila je Frelihova[16] ideja da interakcija između elektrona i rešetke /fonona/, može pod izvesnim uslovima da izazove privlačne sile između elektrona, koje su veće od Kulonove odbojne sile. Na taj način bi se obrazovali bozonski parovi elektrona sa ukupnim spinom nula /svaki za sebe ima $s=\frac{1}{2}$ i $s=-\frac{1}{2}$ /, koji mogu, zahvaljujući nultom spinu, da se kreću bez trenja.

Elektroni, inače, imaju fermionska svojstva, a fononi bozonska. Posle Furije transformacije, kompletan Hamiltonijan sistema elektrona i fonona, zajedno sa njihovom interakcijom, izgleda ovako:

$$\mathcal{H}_{tot}=\sum_{k}\varepsilon_k a_k^{+}a_k+\sum_{k}\hbar\omega_k b_k^{+}b_k+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k,q} a_{k-q}^{+}a_k\left(b_{-q}+b_q^{+}\right) \qquad \text{II } 1.1$$

Prvi član je Hamiltonijan elektronskog, a drugi fononskog polja. Treći član je Hamiltonijan interakcije.

Frelihov postupak se oslanjao na činjenicu da unitarna transformacija ne menja svojstvene vrednosti Hamiltonijana. To znači da ekvivalentni Hamiltonijan ima ista fizička svojstva kao i $\mathcal{H}_{tot}$.

$$\mathcal{H}_{eq} = U \mathcal{H}_{tot} U^{-1} \quad ; \quad U = e^{-i\check{s}}$$

U - unitarni operator

š - realan, ermitski operator /njegove svojstvene vrednosti su mnogo manje od kinetičke energije elektrona i od energije fonona $\hbar\omega_K$ /

$$\mathcal{H}_{eq} = e^{-i\check{s}} \mathcal{H}_{tot}\, e^{i\check{s}}$$

Posle razvijanja u red funkcija $e^{-\check{s}}$ i $e^{\check{s}}$, do malih članova /kvadrate već zanemarujemo/, može se pisati:

$$\mathcal{H}_{eq} = \mathcal{H}_{tot} - i[\check{s}, \mathcal{H}_{tot}] - \frac{1}{2}[\check{s},[\check{s},\mathcal{H}_{tot}]] \qquad \text{II 1.2}$$

Odabere se š u sledećem obliku:

$$\check{s} = \sum_{K',q'} \boxed{H}_{(K',q')}\, a^{+}_{K'-q'} a^{+}_{K'} (b_{-q'} + b^{+}_{q'}) \qquad \text{II 1.3}$$

Proizvoljna funkcija $\left(\boxed{H}_{(K',q')}\right)$ uzme se tako da se eliminiše Hamiltonijan elektron-fonon interakcije iz II 1.1. Posle kraćeg računa i izvesnih aproksimativnih predpostavki, dobija se:

$$\delta(\delta\mathcal{H}) = \sum_K \varepsilon_K a^{+}_K a_K - \frac{1}{N}\sum_K \frac{\Phi^2_{(K,2K)}}{\hbar\omega_{2K}} a^{+}_K a^{+}_{-K} a_{-K} a_K \qquad \text{II 1.4}$$

Prva aproksimacija je da se $\mathcal{H}_{eq}$ primenjuje na fononski vakuum $[\ \delta\mathcal{H} = \mathcal{H}_{eq}|0_\phi\rangle\ ]$

$\mathcal{H}_{eq}|0_\phi\rangle$ - primenjivanje na fononski vakuum /$\mathcal{H}_{eq}$ / sa leve strane

Druga aproksimacija / $\delta(\delta\mathcal{H})$/ je odbacivanje nekih malih članova Hamiltonijana.

Zbog znaka minus /-/ ispred drugog člana jednačine II 1.4, očigledno je da je elektron-elektron interakcija privlačna, i da je između elektrona sa suprotnim impulsima. Frelihova ideja se pokazala ispravnom. Ona se kasnije koristila u BCS[17] teoriji superprovodnosti. Parovi elektrona dobili su ime "kuperovski parovi", po Kuperu koji je dao proračun energije veze i opisao osobine takvog para.

§2. Primena Vajlovog identiteta na eksitonski sistem

Odaberimo antiermitski operator s $/s^{\dagger} = -s/$, tako da su mu svojstvene vrednosti mnogo manje od svojstvenih vrednosti Hamiltonijana za eksitonski sistem u jednačini I 3.9. Unitarni operator U e^{-s}, znamo da ne menja svojstvene vrednosti Hamiltonijana. Potražićemo ekvivalentni Hamiltonijan preko Vajlovog identiteta:

$$H_{eq} = U H U^{-1} \qquad U = e^{-s} \qquad U^{\dagger} = U^{-1} \qquad \text{II } 2.1$$

$$U^{\dagger} = e^{s} \qquad U^{-1} = e^{s}$$

Sledeće stepene funkcije razvijamo u red do malih članova

$$e^{-s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-s)^n}{n!} \cong 1 - s + \frac{1}{2}s^2 \; ; \; e^{s} \cong 1 + s + \frac{1}{2}s^2$$

$$\left(1 - s + \frac{s^2}{2}\right) H \left(1 + s + \frac{s^2}{2}\right) = H + HS - SH + \frac{1}{2}HS^2 - SHS + \frac{1}{2}S^2H - \underline{\frac{1}{2}SHS^2} + \underline{\frac{1}{2}S^2HS} + \underline{\frac{1}{4}S^2HS^2}$$

Podvučene članove zanemarujemo, jer su svojstvene vrednosti operatora s mnogo manje od svojstvenih vrednosti Hamiltonijana.

$$-[S,H] = HS - SH \; ; \; \frac{1}{2}[S,[S,H]] = \frac{1}{2}S^2H - SHS + \frac{1}{2}HS^2$$

$$H_{eq} \cong H - [S,H] + \frac{1}{2}[S,[S,H]] \qquad \text{II } 2.2$$

Izaberimo operator s, i rasčlanimo ga na sledeći način:

$$S=\sum_{a,b} X_{ab}\left(P_a P_b - P_b^\dagger P_a^\dagger\right) \qquad \text{II } 2.3$$

$$S=S_1+S_2 \quad ; \quad S_2=-S_1^\dagger \quad ; \quad H^\dagger=H$$

$$S_1=\sum_{a,b} X_{ab} P_a P_b \qquad S_2=-\sum_{a,b} X_{ab} P_b^\dagger P_a^\dagger$$

$$[S_1,H]=Ш \qquad [S_1^\dagger,H]=-Ш^\dagger$$

$$[S,H]=[S_1,H]+[S_2,H]=[S_1,H]-[S_1^\dagger,H]$$

$$[S,H]=[S_1,H]+[S_1,H]^\dagger \qquad \text{II } 2.4$$

Relacija II 2.4 u mnogome skraćuje račun za H_{eq} eksitonskog sistema. Napišimo ponovo Hamiltonijan eksitonskog sistema, analiziran u I §3.:

$$H=\underbrace{\Delta\sum_n P_n^\dagger P_n}_{H(1)}+\underbrace{\sum_{n,m}\alpha_{nm}P_n^\dagger P_m}_{H(2)}+\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{n,m}\beta_{nm}\left(P_n^\dagger P_m^\dagger+P_m P_n\right)}_{H(3)}+\underbrace{\sum_{n,m}\gamma_{nm}P_n^\dagger P_m^\dagger P_m P_n}_{H(4)}$$

Izračunajmo sledeći komutator:

$$-[S,H]=-[S_1,H_{(1)}]-[S_1,H_{(1)}]^\dagger-[S_1,H_{(2)}]-[S_1,H_{(2)}]^\dagger-$$

$$-[S_1,H_{(3)}]-[S_1,H_{(3)}]^\dagger-[S_1,H_{(4)}]-[S_1,H_{(4)}]^\dagger$$

$$-[S,H]=-2\sum_{a,b}\Delta X_{ab}\left(P_a P_b+P_a^\dagger P_b^\dagger\right)-$$

$$-2\sum_{a,b,n} X_{ab}\alpha_{bn}\left(P_a P_n+P_a^\dagger P_n^\dagger\right)+$$

$$+4\sum_{a,b,n} X_{ab}\alpha_{bn}\left(P_b^\dagger P_b P_a P_n+P_b^\dagger P_a^\dagger P_n^\dagger P_b\right)-$$

$$-2\sum_{a,b} X_{ab}\beta_{ab}+8\sum_{a,b} X_{ab}\beta_{ab}P_a^\dagger P_a-$$

$$-2\sum_{a,b,n} X_{ab}\beta_{nb}\left(P_n^\dagger P_a+P_a^\dagger P_n\right)+$$

$$+4\sum_{a,b,n} X_{ab}\beta_{nb}\left(P_n^\dagger P_b^\dagger P_b P_a + P_a^\dagger P_b^\dagger P_b P_n\right) \quad -$$

$$-8\sum_{a,b} X_{ab}\beta_{ab} P_a^\dagger P_a P_b^\dagger P_b \quad -$$

$$-2\sum_{a,b} X_{ab}\gamma_{ab}\left(P_a P_b + P_b^\dagger P_a^\dagger\right) \quad -$$

$$-4\sum_{a,b,n} X_{ab}\gamma_{nb}\left(P_n^\dagger P_n P_a P_b + P_b^\dagger P_a^\dagger P_n^\dagger P_n\right) \qquad \text{II 2.5}$$

Izračunavanje se izvodi na osnovu jednačina II 2.3, II 2.4, izraza za Hamiltonijan eksitonskog sistema /I 3.9/ i na osnovu komutacionih relacija za Pauli operatore /I 3.5/.

Da bismo eliminisali članove koji ne održavaju broj eksitona, iz izraza $H-[S,H]$ uzmimo u razmatranje članove koji stoje uz $P_a P_b$. Uslov eliminacije, posle presumacije indeksā, svodi se na:

$$\sum_{a,b}\left(\frac{1}{2}\beta_{ab} - 2\Delta X_{ab} - 2\sum_{m}\alpha_{bm}X_{ab} - 2\gamma_{ab}X_{ab}\right]P_a P_b = 0 \qquad \text{II 2.6}$$

Iz više razloga je zgodno izabrati proizvoljnu funkciju X_{ab} na sledeći način:

$$X_{ab} = \frac{\beta_{ab}}{4\Delta} \qquad X_{ab} = X_{ba}$$

Prvi je razlog taj što se oslobađamo dva člana iz sume $H-[S,H]$. Drugi razlog ovakvog izbora X_{ab} je taj što svi ostali članovi u izrazu II 2.5 postaju funkcije malih parametara $\frac{\beta}{\Delta}$, koji bi u narednom izračunavanju izraza II 2.7, postali još manji / $\frac{\beta^2}{\Delta}$ /.

Iz gorenavedenih razloga uzećemo samo efektivni komutator:

$$-[S_1,H]_{eff} = 2\sum_{a,b}\Delta X_{ab} P_a P_b = \frac{1}{2}\sum_{a,b} B_{ab} P_a P_b$$

$$-[S,H]_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{a,b} B_{ab}\left(P_b P_a + P_a^+ P_b^+\right)$$

Uvedimo nove oznake :

$$-[S,H]_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{n,m} B_{nm}\left(P_n^+ P_m^+ + P_m P_n\right)$$

Iz poslednje formule vidi se da je $H_{(3)} = -[S,H]_{eff}$
Prema tome, treći član jednačine II 2.2 izgledaće ovako:

$$\frac{1}{2}[S,[S,H]_{eff}] = \sum_{a,b} X_{ab} B_{ab} - 4\sum_{a,b} X_{ab} B_{ab} P_a^+ P_a +$$
$$+ \sum_{a,b,n} X_{ab} B_{nb}\left(P_n^+ P_a + P_a^+ P_n\right) + 4\sum_{a,b} X_{ab} B_{ab} P_a^+ P_a P_b^+ P_b -$$
$$-2\sum_{a,b,n} X_{ab} B_{nb}\left(P_n^+ P_b^+ P_b P_a + P_a^+ P_b^+ P_b P_n\right) \qquad \text{II } 2.7$$

Možemo da pišemo ekvivalentni Hamiltonijan za eksitonski sistem:

$$H_{eq} = \underbrace{\tilde{\Delta}\sum_n P_n^+ P_n + \sum_{n,m} \tilde{\alpha}_{nm} P_n^+ P_m}_{H_2} +$$
$$\underbrace{+ \sum_{a,n,m} \frac{1}{\Delta}\left(B_{na}\alpha_{am} - B_{nm}\gamma_{am}\right)\left(P_a^+ P_a P_n P_m + P_m^+ P_n^+ P_a^+ P_a\right)}_{H_4^{3\rightleftarrows 1}} +$$
$$\underbrace{+ \sum_{n,m}\left(\gamma_{nm} - \frac{B_{nm}^2}{\Delta}\right) P_n^+ P_m^+ P_n P_m + \sum_{a,n,m} \frac{B_{na} B_{am}}{\Delta} P_n^+ P_a^+ P_a P_m}_{H_4^{2\rightleftarrows 2}}$$

II 2.8

H_2 - kvadratni deo ekvivalentnog Hamiltonijana

$H_4^{3\rightleftarrows 1}$ - ekvivalentni Hamiltonijan četvrtog reda po Pauli operatorima, u kome je jedan deo proporcionalan normalnom produktu jednog kreacionog i tri anihilaciona Pauli operatora, a drugi obrnuto.

$H_4^{2\rightleftarrows 2}$ - ekvivalentni Hamiltonijan četvrtog reda po Pauli operatorima, u kome gornja oznaka, kao i u predhodnom slučaju, govori o odnosu kreacionih i anihilacionih operatora

$$\tilde{\Delta} = \Delta + \frac{1}{\Delta} \sum_{k,m} B_{km}^2$$

$$\tilde{\alpha}_{mm} = \alpha_{mm} - \frac{1}{2\Delta} \sum_{k} B_{mk} B_{km} \qquad \text{II 2.9}$$

§3. Korektan harmonijski spektar

Da bi Hamiltonijan eksitonskog sistema odražavao fizičku realnost, mora biti ermitski. Dijagonalizacija kvadratnog dela ekvivalentnog Hamiltonijana /H_2/ iz jednačine II 2.8, daće ermitski Hamiltonijan drugog reda i harmonijski spektar. O suštini problema bilo je reči u I §3. Ermitski uslov će biti zadovoljen, jer su funkcije $\breve{\Delta}$ i $\tilde{\alpha}_{nm}$ realne.

Za eksitonski sistem, iz jednačine II 2.8, imamo:

$$H_{2(eq)} = \tilde{\Delta} \sum_n P_n^\dagger P_n + \sum_{n,m} \tilde{\alpha}_{nm} P_n^\dagger P_m \qquad \text{II } 3.1$$

Funkcija $\tilde{\alpha}_{nm}$ ima indekse n i m, koji su vektori u prostoru rešetke. Radi lakšeg pisanja, izostavljamo vektorske oznake. $\tilde{\alpha}_{nm}$, zapravo, zavisi samo od njihove razlike.

$$\tilde{\alpha}_{nm} = \tilde{\alpha}_{n-m} \; ; \; \alpha_{nm} = \alpha_{n-m} \; ; \; \beta_{mb} = \beta_{m-b}$$

Dijagonalizaciju izvodimo metodom Furijeovih transformacija, tj. prelaskom sa prostora rešetke na impulsni prostor:

$$\alpha_{n-m} = \frac{1}{N} \sum_q \alpha_q e^{iq(n-m)} \qquad P_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q P_q^\dagger e^{-iqn}$$

$$\beta_{m-b} = \frac{1}{N} \sum_q \beta_q e^{iq(m-b)} \qquad P_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q P_q e^{iqn}$$

$$\delta_{n,m} = \frac{1}{N} \sum_q e^{iq(n-m)}$$

$$H_{2(eq)} = \frac{\Delta}{N}\sum_{q_1 q_2} P^+_{q_1} P_{q_2} \sum_n e^{-iq_1 n + iq_2 n} + \frac{1}{\Delta N}\sum_{\substack{q_1 q_2\\ q_3 q_4}} \beta_{q_1}\beta_{q_2} P^+_{q_3} P_{q_4} \times$$

$$\times \sum_{nml} e^{iq_1(l-m) + iq_2(m-l) - iq_3 n + iq_4 n} +$$

$$+ \frac{1}{N^2}\sum_{q_1 q_2 q_3} \alpha_{q_1} P^+_{q_2} P_{q_3} \sum_{nm} e^{iq_1(n-m) - iq_2 n + iq_3 m} -$$

$$- \frac{1}{2\Delta N^3}\sum_{q_1 q_2 q_3 q_4} \beta_{q_1}\beta_{q_2} P^+_{q_3} P_{q_4} \sum_{nml} e^{iq_1(l-m) + iq_2(n-l) - iq_3 n + iq_4 m}$$

$$H_{2(eq)} = \Delta \sum_{q_1 q_2} P^+_{q_1} P_{q_2}\, \delta_{q_1, q_2} + \frac{1}{\Delta}\sum_{\substack{q_1 q_2\\ q_3 q_4}} \beta_{q_1}\beta_{q_2} P^+_{q_3} P_{q_4}\, \delta_{q_1, q_2}\delta_{q_1, q_2}\delta_{q_3, q_4} +$$

$$+ \sum_{q_1 q_2 q_3} \alpha_{q_1} P^+_{q_2} P_{q_3}\, \delta_{q_1, q_2}\delta_{q_1, q_3} -$$

$$- \frac{1}{2\Delta}\sum_{\substack{q_1 q_2\\ q_3 q_4}} \beta_{q_1}\beta_{q_2} P^+_{q_3} P_{q_4}\, \delta_{q_1, q_2}\delta_{q_2, q_3}\delta_{q_4, q_1}$$

$$H_{2(eq)} = \Delta \sum_K P^+_K P_K + \frac{1}{\Delta}\sum_K \beta^2_K P^+_K P_K + \sum_K \alpha_K P^+_K P_K - \frac{1}{2\Delta}\sum_K \beta^2_K P^+_K P_K$$

$$H_{2(eq)} = \sum_K (\tilde{\Delta} + \tilde{\alpha}_K)\, P^+_K P_K \qquad \text{II 3.2}$$

Zakon disperzije za eksitone, prema tome, glasi:

$$E^{(0)}_K = \frac{\partial H_{2(eq)}}{\partial P^+_K P_K} = \tilde{\Delta} + \tilde{\alpha}_K \; ; \qquad \tilde{\Delta} = \Delta + \frac{1}{\Delta}\sum_K \beta^2_K \qquad \tilde{\alpha}_K = \alpha_K - \frac{1}{2\Delta}\sum_K \beta^2_K$$

$E^{(0)}_K$ - energija eksitona, gde indeks (o) kazuje da je dobijena iz harmonijskog dela Hamiltonijana.

III GLAVA - TERMODINAMIKA EKSITONSKOG SISTEMA

§1. Metod funkcija Grina

Po definiciji, retardovana funkcija Grina za operatore $\hat{A}(\vec{r},t)$ i $\hat{B}(\vec{r}',t')$, u Hajzenbergovoj reprezentaciji, glasi:

$$G_{A,B}(t,t') \equiv \langle\langle \hat{A}(\vec{r},t) | \hat{B}(\vec{r}',t') \rangle\rangle = \xi(t-t')\langle [\hat{A}(\vec{r},t), \hat{B}(\vec{r}',t')] \rangle \qquad \text{III 1.1}$$

Simbol $\langle\langle\ \ \rangle\rangle$ označava usrednjavanje operatora i njihovo uređivanje po vremenu. Usrednjavanje se vrši po Gipsovom ansamblu. Za neku fizičku veličinu F, važi:

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{S_p \hat{F} e^{-\theta \hat{H}}}{S_p e^{-\theta \hat{H}}}$$

H je Hamiltonijan sistema kvazi-čestica.

ξ je Hevisajdova funkcija.

$$\xi(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases} \quad ; \quad \frac{\partial \xi(t-t')}{\partial t} = \delta(t-t') \qquad \text{III 1.2}$$

Diferencirajući III 1.1 i III 1.2 po t i t, dobijamo:

$$\frac{d}{dt}\langle\langle A|B\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle [A,B] \rangle + \xi(t-t')\langle [\tfrac{d}{dt}A, B] \rangle$$

$$\frac{d}{dt'}\langle\langle A|B\rangle\rangle = -\delta(t-t')\langle [A,B] \rangle + \xi(t-t')\langle [A, \tfrac{d}{dt'}B] \rangle \qquad \text{III 1.3}$$

Uvedimo korelacionu funkciju:

$$\mathcal{K}(\vec{r}-\vec{r}') = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

Hajzenbergova jednačina kretanja daje:

$$i\,\frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A},\hat{H}]_t \quad ; \quad i\,\frac{d\hat{B}}{dt'} = [\hat{B},\hat{H}]_{t'} \qquad \text{III 1.4}$$

Jednačine III 1.3 svode se na:

$$i\,\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle = i\,\delta(t-t')\,\mathcal{K} + \xi(t-t')\langle[[\hat{A},\hat{H}]_t,\hat{B}]\rangle$$

$$\text{III 1.5}$$

$$i\,\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle = -\,i\,\delta(t-t')\,\mathcal{K} + \xi(t-t')\langle[\hat{A},[\hat{B},\hat{H}]_{t'}]\rangle$$

Izvršimo Furijeove transformacije:

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3p\,dE\,\langle\langle \hat{A}|B\rangle\rangle_{E,p}\; e^{ip(r-r')-iE(t-t')}$$

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

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\; e^{iE(t-t')} \qquad \text{III 1.6}$$

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

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

Uvrštavanjem ovih izraza u III 1.3, dobijamo osnovni sistem jednačina Grina u energetskoj reprezentaciji:

$$E\,G_{AB}(E,p) \equiv E\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,p} = \frac{i}{2\pi}\,\mathcal{K}(p) + \langle\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{E,p}$$

$$\text{III 1.7}$$

$$E\,G_{AB}(E,p) \equiv E\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,p} = \frac{i}{2\pi}\,\mathcal{K}(p) - \langle\langle\hat{A}|[\hat{B},\hat{H}]\rangle\rangle_{E,p}$$

E je energija, koja se traži, a p je impuls.

Ove jednačine se koriste tako što se funkcija Grina na desnoj strani, bilo prve ili druge jednačine III 1.7, uz odgovarajuće aproksimacije, izrazi preko funkcije Grina na levoj strani iste jednačine. Na taj način, dobija se jednačina sa samo jednom funkcijom Grina, po kojoj se može rešiti.

Realni deo pola funkcije Grina $G_{A,B}(E,P)$, u energetskoj ravni, predstavljaće energiju elementarnih eksitacija, a imaginarni deo u kompleksnoj ravni, recipročno vreme života elementarnih eksitacija.

Uvodimo spektralnu funkciju, ili intenzivnost:

$$I_{G_{A,B}(E,P)} = \left[G(E+i\varepsilon) - G(E-i\varepsilon) \right]_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{e^{\frac{E}{\theta}} - 1}$$

$$I_{G_{A,B}(E,P)} = \frac{\mathcal{K}}{e^{\frac{E}{\theta}} - 1} \delta(E-E_k) \qquad \text{III 1.8}$$

E_k - realni deo pola funkcije Grina

Pomoću III 1.8 može se naći srednja vrednost produkta dva operatora /po Gipsovom ansamblu/.

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \frac{S_p \hat{B}\hat{A} e^{-\theta \hat{H}}}{S_p e^{-\theta \hat{H}}} = \int_{-\infty}^{+\infty} I_G(E,P)\, dE = \frac{\mathcal{K}(P)}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 1.9}$$

Na osnovu poslednje formule dobija se statistika elementarnih eksitacija.

§2. Niske temperature

Primenimo metod funkcije Grina na eksitonski sistem, zamenjujući operatore $\hat{A}(\vec{r},t)$ i $\hat{B}(\vec{r}',t')$ iz predhodnog paragrafa, Pauli operatorima:

$$E \langle\langle P_f | P_g^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\left(1 - 2\langle P_f^+ P_f \rangle\right)\delta_{fg} + \langle\langle [P_f, H_{eg}] | P_g^+ \rangle\rangle \qquad \text{III } 2.1$$

Furije transformacijom u impulsni prostor dobićemo:

$$\langle P_f^+ P_f \rangle = \frac{1}{N}\sum_K \langle P_K^+ P_K \rangle$$

$$\Omega_f = [P_f, H_{eg}]$$

$$\Omega_f = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_K \Omega_K e^{iKf}$$

N je broj molekula u kristalu

$$E\sum_K \langle\langle P_K | P_K^+ \rangle\rangle e^{iK(f-g)} = \frac{i\sigma}{2\pi}\sum_K e^{iK(f-g)} + \sum_K \langle\langle \Omega_K | P_K^+ \rangle\rangle e^{iK(f-g)}$$

$$\sigma = 1 - 2\langle P_f^+ P_f \rangle \qquad \text{III } 2.2$$

Zamenimo indekse: $f - g = l$

Pomnožimo poslednju jednačinu /III 2.2/ sa e^{-ipl} i sumirajmo je po indeksu l. Posle kraćeg računa dobijamo:

$$E \langle\langle P_p | P_p^+ \rangle\rangle = \frac{i\sigma}{2\pi} + \langle\langle \Omega_p | P_p^+ \rangle\rangle \qquad \text{III } 2.3$$

Pomoću komutacionih relacija za Pauli operatore izračunaćemo prvo Ω_f u prostoru rešetke.

$$\Omega_f = \tilde{\Delta} P_f + \sum_m \tilde{\alpha}_{fm} P_m -$$

$$- 2 \sum_m \tilde{\alpha}_{fm} P_f^+ P_f P_m +$$

$$+ \sum_{nm} \frac{1}{\Delta} \left(B_{nf} \alpha_{fm} - B_{nm} \gamma_{fm} \right) P_f P_n P_m +$$

$$+ 2 \frac{1}{\Delta} \sum_{nm} \left(B_{nm} \alpha_{fm} - B_{nf} \gamma_{fm} \right) P_n^+ P_m^+ P_m +$$

$$+ \frac{1}{\Delta} \sum_{nm} \left(B_{nf} \alpha_{fm} - B_{nm} \gamma_{mf} \right) P_n^+ P_m^+ P_f +$$

$$+ 2 \sum_m \left(\gamma_{mf} - \frac{B_{mf}^2}{\Delta} \right) P_m^+ P_m P_f + \qquad \text{III 2.4}$$

$$+ \sum_{nm} \frac{1}{\Delta} B_{fn} B_{nm} P_n^+ P_n P_m + \sum_{nm} \frac{1}{\Delta} B_{nf} B_{fm} P_n^+ P_m P_f$$

Prvo Furijeovom transformacijom, a potom zamenom oznaka $(\ell \to k)$, slično kao u II glavi §1., dobićemo u impulsnom prostoru:

$$\Omega_k = (\tilde{\Delta} + \tilde{\alpha}_k) P_k - \frac{2}{N} \sum_{q_1 q_2} \tilde{\alpha}_{q_1 - q_2 + k} P_{q_1}^+ P_{q_2} P_{q_1 - q_2 + k} +$$

$$+ \frac{2}{N} \sum_{q_1, q_2} \gamma_{q_1 - q_2} P_{q_1}^+ P_{q_2} P_{q_1 - q_2 + k} -$$

$$- \frac{2}{\Delta N^2} \sum_{q_1, q_2, q_3} B_{q_3} B_{q_3 - q_2 + k} P_{q_1}^+ P_{q_2} P_{q_1 - q_2 + k} +$$

$$+ \frac{1}{\Delta N} \sum_{q_1, q_2} B_{q_2} B_k P_{q_1}^+ P_{q_2} P_{q_1 - q_2 + k} +$$

$$+ \frac{1}{\Delta N} \sum_{q_1, q_2} B_{q_1} B_{q_2} P_{q_1}^+ P_{q_2} P_{q_1 - q_2 + k} +$$

$$+ \frac{1}{\Delta N} \sum_{q_1, q_2} B_{q_1} \alpha_{q_2} P_{q_1} P_{q_2} P_{-q_1 - q_2 + k} -$$

$$-\frac{1}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} \beta_{q_1}\gamma_{q_1+q_2} P_{q_1} P_{q_2} P_{-q_1-q_2+k} +$$

$$+\frac{2}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} \beta_{q_1}\alpha_k P^{+}_{q_1} P^{+}_{q_2} P_{q_1+q_2+k} -$$

$$-\frac{2}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} \beta_{q_1}\gamma_{q_1+k} P^{+}_{q_1} P^{+}_{q_2} P_{q_1+q_2+k} +$$

$$+\frac{1}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} \beta_{q_1}\alpha_{q_2} P^{+}_{q_1} P^{+}_{q_2} P_{q_1+q_2+k} -$$

$$-\frac{1}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} \beta_{q_1}\gamma^{*}_{q_1+q_2} P^{+}_{q_1} P^{+}_{q_2} P_{q_1+q_2+k}$$

Delovi Ω_k koji sadrže tri anihilaciona operatora i dva kreaciona sa jednim anihilacionim, mogu dati svoje doprinose tek u drugom redu teorije perturbacije i zbog toga bi ovi doprinosi bili proporcionalni kvadratu koncentracije i kvadratu malog parametra $\frac{\beta^2}{\Delta^2}$. Zbog toga što bi to značilo prevazilaženje najavljene tačnosti računa, ove članove odbacujemo. Ostaju samo sledeći članovi:

$$\Omega_k = (\tilde{\Delta} + \alpha_k) P_k -$$

$$-\frac{2}{N}\sum_{q_1,q_2} \tilde{\alpha}_{q_1-q_2+k} P^{+}_{q_1} P_{q_2} P_{q_1-q_2+k} +$$

$$+\frac{2}{N}\sum_{q_1,q_2} \gamma_{q_1-q_2} P^{+}_{q_1} P_{q_2} P_{q_1-q_2+k} -$$

$$-\frac{2}{\Delta N^2}\sum_{q_1,q_2,q_3} \beta_{q_3}\beta_{q_3-q_2+k} P^{+}_{q_1} P_{q_2} P_{q_1-q_2+k} +$$

$$+\frac{1}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} \beta_k\beta_{q_2} P^{+}_{q_1} P_{q_2} P_{q_1-q_2+k} + \qquad \text{III 2.5}$$

$$+\frac{1}{\Delta N}\sum_{q_1,q_2} B_{q_1}B_{q_2}P^{+}_{q_1}P_{q_2}P_{q_1-q_2+K} \qquad \text{III 2.5}$$

Pauli operatore moramo zameniti Boze operatorima iz već navedenih razloga.Napišimo ponovo relacije I 3.15.

$$P_n = B_n - B^{+}_n B_n B_n \quad ; \quad P^{+}_n = B^{+}_n - B^{+}_n B^{+}_n B_n \qquad \text{III 2.6}$$

Pomoću Furije transformacija prelazimo na impulsni prostor:

$$P_K = B_K - \frac{1}{N}\sum_{q_1,q_2} B^{+}_{q_1}B_{q_2}B_{K+q_1-q_2}$$

$$P^{+}_K = B^{+}_K - \sum_{q_1,q_2}\frac{1}{N} B^{+}_{K+q_1-q_2}B^{+}_{q_2}B_{q_1}$$

Pomnožimo P_K i P^{+}_K usrednjavanjem i uređivanjem po vremenu. Odbacićemo neke više članove po Boze operatorima, koji bi dali malu veličinu, tj. kvadrat koncentracije bozona ($[\frac{1}{N}\sum_{q}\langle B^{+}_q B_q\rangle]^2$).

$$\langle\langle P_K|P^{+}_K\rangle\rangle \cong \langle\langle B_K|B^{+}_K\rangle\rangle - \frac{1}{N}\sum_{q_1,q_2}\langle\langle B_K|B^{+}_{K+q_1-q_2}B^{+}_{q_2}B_{q_1}\rangle\rangle -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{q_1,q_2}\langle\langle B^{+}_{q_1}B_{q_2}B_{K+q_1-q_2}|B^{+}_K\rangle\rangle \qquad \text{III 2.7}$$

Računaćemo pojedine članove poslednje formule pomoću Vikove teoreme i na osnovu komutacionih relacija za Boze operatore.

$$\langle\langle B^{+}_{q_1}B_{q_2}B_{K+q_1-q_2}|B^{+}_K\rangle\rangle \cong \delta_{q_1,q_2}\langle B^{+}_{q_1}B_{q_1}\rangle_0 \langle\langle B_K|B^{+}_K\rangle\rangle +$$

$$+\delta_{K,q_2}\langle B^{+}_{q_1}B_{q_1}\rangle_0 \langle\langle B_K|B^{+}_K\rangle\rangle \qquad \text{III 2.8}$$

$$\langle\langle B_1^{\dagger} B_2 B_3 | B_4^{\dagger} \rangle\rangle =$$
$$= \langle B_1^{\dagger} B_2 \rangle_0 \langle\langle B_3 | B_4^{\dagger} \rangle\rangle +$$
$$+ \langle B_1^{\dagger} B_3 \rangle_0 \langle\langle B_2 | B_4^{\dagger} \rangle\rangle$$

Isto dobijamo i za treći član jednačine III 2.7. U izrazu III 2.3 veličinu σ /parametar uređenosti/, zamenućemo izrazom koji se dobija posle kraćeg izvođenja:

$$1 - 2 \langle P_n^{\dagger} P_n \rangle \cong 1 - 2 \langle B_n^{\dagger} B_n \rangle \cong 1 - 2C_0 \qquad \text{III 2.9}$$

$$\langle B_q^{\dagger} B_q \rangle_0 = \frac{1}{e^{\frac{E_K^{(0)}}{\theta}} - 1} \; ; \; C_0 = \frac{1}{N} \sum_q \langle B_q B_q \rangle_0 \qquad \text{III 2.1o}$$

Indeksi u $\langle\ \rangle$ mogu biti proizvoljni, ali moraju "ostati" u datom prostoru. Oznaka $\langle\ \rangle_0$, odnosi se na $E = E_K^{(0)}$ C_0 je koncentracija eksitona u nultoj aproksimaciji, dobijena samo iz harmonijskog spektra. Jednačinu III 2.7 možemo, prema tome, napisati ovako:

$$\langle\langle P_K | P_K^{\dagger} \rangle\rangle = \langle\langle B_K | B_K^{\dagger} \rangle\rangle - \frac{2}{N} \sum_{q_1, q_2} \Big(\delta_{q_1, q_2} \langle B_{q_1}^{\dagger} B_{q_1} \rangle_0 +$$
$$+ \delta_{K, q_2} \langle B_{q_1}^{\dagger} B_{q_1} \rangle_0 \Big) \langle\langle B_K | B_K^{\dagger} \rangle\rangle =$$
$$\simeq (1 - 4C_0) \langle\langle B_K | B_K^{\dagger} \rangle\rangle \qquad \text{III 2.11}$$

Izračunaćemo sada funkciju Grina $\langle\langle \Omega_K | P_K^{\dagger} \rangle\rangle$. Prvo ćemo rasčlaniti ovu funkciju Grina. S obzirom da znamo Ω_K /III 2.5/, možemo pisati:

$$\langle\langle \Omega_K | P_K^{\dagger} \rangle\rangle = E_K^{(0)} \langle\langle P_K | P_K^{\dagger} \rangle\rangle +$$
$$+ \frac{1}{N} \sum_{q_1, q_2} H_{K, q_1, q_2} \langle\langle P_{q_1}^{\dagger} P_{q_2} P_{q_1 - q_2 + K} | P_K^{\dagger} \rangle\rangle \qquad \text{III 2.12}$$

$$\mathbb{H}_{K,q_1,q_2} = -2\alpha_{K+q_1-q_2} + \frac{\beta^2_{K+q_1-q_2}}{\Delta} - \frac{2}{\Delta N}\sum_{q_3}\beta_{q_3}\beta_{q_3-q_2+K} +$$

$$+\frac{1}{\Delta}\beta_K\beta_{q_2} + \frac{1}{\Delta}\beta_{q_1}\beta_{q_2} + 2\Gamma_{q_1-q_2} \qquad \text{III 2.13}$$

$$E_K^{(0)} = \Delta + \frac{1}{\Delta}\sum_q \beta_q^2 + \alpha_K - \frac{1}{2\Delta}\beta_K^2 \qquad \text{III 2.14}$$

Izvedimo sledeće jednačine ne uzimajući u obzir kvadrate koncentracija bozona.

$$P^\dagger_{q_1}P_{q_2} \cong B^\dagger_{q_1}B_{q_2} \qquad \text{III 2.15}$$

$$P^\dagger_{q_1}P_{q_2}P_{K+q_1-q_2} \cong B^\dagger_{q_1}B_{q_2}B_{K+q_1+q_2} - \frac{1}{N}\sum_{q_3}B^\dagger_{q_1}B_{q_3}B_{K+q_1-q_3} \qquad \text{III 2.16}$$

$$\langle\langle P^\dagger_{q_1}P_{q_2}P_{K+q_1-q_2} | P^\dagger_K\rangle\rangle = \langle\langle B_K|B^\dagger_K\rangle\rangle \langle B^\dagger_{q_1}B_{q_1}\rangle_0 \left\{\delta_{q_1,q_2} + \delta_{K,q_2}\right\} -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{q_3}\langle\langle B_K|B^\dagger_K\rangle\rangle\langle B_{q_1}B_{q_1}\rangle_0\left\{\delta_{q_1,q_3} + \delta_{K,q_3}\right\} \qquad \text{III 2.17}$$

Za niske temperature možemo da napišemo:

$$\frac{1}{1-4C_0} \cong 1 + 4C_0$$

$$(1-2C_0)(1+4C_0) = 1 + 4C_0 - 2C_0 - 8C_0^2$$

$$\cong 1 + 2C_0$$

$$\langle\langle \Omega_K | P^\dagger_K\rangle\rangle = E_K^{(0)}(1-4C_0)\langle\langle B_K|B^\dagger_K\rangle\rangle +$$

$$+\langle\langle B_K|B^\dagger_K\rangle\rangle\frac{1}{N}\sum_q\langle B_q B_q\rangle_0\left\{\mathbb{H}_{K,q,q} + \mathbb{H}_{K,q,K} - 2\Lambda_{K,q}\right\} \qquad \text{III 2.18}$$

Jednačina III 2.11 posle prelaska na Boze operatore u funkcijama Grina, izgleda ovako:

$$\langle\langle B_k | B_k^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{\frac{i}{2\pi}(1+2C_o)}{E - E_k^{(o)} - \frac{1}{N}\sum_q \langle B_q^{\dagger} B_q \rangle_o \left(H_{k,q,k} + H_{k,q,q} - 2\Lambda_{k,q} \right)}$$

$$\Lambda_{k,q} = \frac{1}{N}\sum_{q_2} H_{k,q,q_2} \qquad \text{III 2.19}$$

$$\langle\langle B_k | B_k^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{1+2C_o}{E - E_k} \qquad \text{III 2.20}$$

$$E_k = E_k^{(o)} + \frac{1}{N}\sum_q \langle B_q^{\dagger} B_q \rangle_o \left(H_{k,q,k} + H_{k,q,q} - 2\Lambda_{k,q} \right)$$

$$H_{k,q,k} = -2\alpha_q + \frac{1}{\Delta}\beta_q^2 + \frac{1}{\Delta}\beta_k^2 + \frac{1}{\Delta}\beta_k\beta_q - \frac{2}{\Delta N}\sum_{q_3}\beta_{q_3}^2 \qquad \text{III 2.21}$$

$$H_{k,q,q} = -2\alpha_k + \frac{1}{\Delta}\beta_k^2 + \frac{1}{\Delta}\beta_q^2 + \frac{1}{\Delta}\beta_q\beta_k - \frac{2}{\Delta N}\sum_{q_3}\beta_{q_3}\beta_{q_3-q+k} \qquad \text{III 2.22}$$

$$-2\Lambda_{k,q} = -\frac{2}{N}\sum_{q_2}\Big(-2\alpha_{q-q_2+k} + \frac{1}{\Delta}\beta_{q-q_2+k}^2 + 2\gamma_{q-q_2} -$$

$$- \frac{2}{\Delta N}\sum_{q_3}\beta_{q_3}\beta_{q_3-q_2+k} + \frac{1}{\Delta}\beta_k\beta_{q_2} + \frac{1}{\Delta}\beta_{q_2}\beta_{q_2}\Big). \qquad \text{III 2.23}$$

Pomoću spektralne funkcije Grina, slično jednačini III 1.9, koncentracija bozona može da se piše /u prvoj popravci/ na sledeći način:

$$\langle B_k^{+} B_k \rangle = \int dE \, I_{\langle\langle B_k | B_k^{+} \rangle\rangle} = \frac{1+2C_0}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 2.24}$$

Koncentracija eksitona C koja proizilazi iz anharmonijske popravke svojstvenih vrednosti Hamiltonijana za eksitonski sistem, dobiće se kada se na drugi član jednačine III 2.25 primeni Vikova teorema sa desne strane.

$$\langle P_n^{+} P_n \rangle = \langle B_n^{+} B_n - B_n^{+2} B_n^{2} \rangle =$$

$$= \langle B_n^{+} B_n \rangle_{E=E_k} - \langle B_n^{+} B_n^{+} B_n B_n \rangle = \qquad \text{III 2. 25}$$

$$= \langle B_n^{+} B_n \rangle_{E=E_k} - 2 \langle B_n^{+} B_n \rangle_0^2 =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} + 2C_0 \underbrace{\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1}}_{\approx C_0} - 2C_0^2$$

$$\langle P_n^{+} P_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 2. 26}$$

Konačno dobijamo koncentraciju eksitona /prva popravka/:

$$C = \langle P_n^{+} P_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 2.27}$$

$$C_B = \langle B_n^{+} B_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\mathcal{K}}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 2.28}$$

$$\mathcal{K} = 1 + 2C_0$$

$$C_0 = \langle B_n^{+} B_n \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k^{(0)}}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 2.29}$$

Prvo ćemo da izračunamo koncentraciju eksitona u nultoj aproksimaciji, tj. iz harmonijskog spektra.

$$E_k^{(o)} = \tilde{\Delta} + \tilde{\alpha}_k \qquad \tilde{\Delta} = \Delta + \frac{1}{\Delta}\sum_q \beta_q^2 \qquad \tilde{\alpha}_k = \alpha_k - \frac{\beta_k^2}{2\Delta} \qquad \text{III 2.30}$$

Za prostu kubnu strukturu, u aproksimaciji najližih suseda, možemo pisati:

$$\alpha_k = \sum_{n,m} \alpha_{nm}\, e^{ikn} = 2\alpha\left(\cos aK_x + \cos aK_y + \cos aK_z\right)$$

$$\beta_k = 2\beta\left(\cos aK_x + \cos aK_y + \cos aK_z\right)$$

a - parametar rešetke, k - talasni vektor

U aproksimaciji malih talasnih vektora dobija se:

$$\alpha_k = 2\alpha\left\{3 - \frac{1}{2}a^2K^2 + \frac{1}{24}a^2\left(K_x^4 + K_y^4 + K_z^4\right)\right\}$$

$$K_x = K\cos\varphi\sin\vartheta \qquad K_y = K\sin\varphi\sin\vartheta \qquad K_z = K\cos\vartheta$$

$$\alpha_k = 6\alpha - \alpha a^2K^2 + \frac{\alpha}{12}a^4K^4\underbrace{\left\{\cos^4\varphi\sin^4\vartheta + \sin^4\varphi\sin^4\vartheta + \cos^4\vartheta\right\}}_{\tilde{\Omega}}$$

$$\alpha < 0 \;\rightarrow\; \alpha = -\alpha_o \;\rightarrow\; \alpha_o > 0$$

Energija prenosa eksitona α je negativna.

$$\alpha_k = -6\alpha_o + \alpha_o a^2K^2 - \frac{\alpha_o}{12}a^4K^4\cdot\tilde{\Omega}$$

Slično se dobija i sledeći izraz:

$$\beta_k = 6\beta - a^2K^2\beta + \frac{\beta}{12}a^4K^4\cdot\tilde{\Omega}$$

$$-\frac{\beta_k^2}{2\Delta} = -\frac{36\beta^2}{2\Delta} - \frac{\beta^2 a^4 k^4}{2\Delta} + \frac{12\beta^2 a^2 k^2}{2\Delta} - \frac{\beta^2 a^4 k^4 \tilde{\Omega}}{2\Delta}$$

$$\tilde{\alpha}_k = \overline{h} + a^2 k^2 \mathcal{U}_1 + a^4 k^4 \mathcal{U}$$

$$\overline{h} = -6\alpha_0 - \frac{18\beta^2}{\Delta}$$

$$\mathcal{U}_1 = \alpha_0 + \frac{6\beta^2}{\Delta}$$

$$\mathcal{U} = -\frac{1}{12}\left(\alpha_0 + \frac{6\beta^2}{\Delta}\right)\tilde{\Omega} - \frac{\beta^2}{2\Delta} = -\frac{1}{12}\mathcal{U}_1\tilde{\Omega} - \frac{\beta^2}{2\Delta}$$

$$E_k^{(0)} = \overline{\mathfrak{z}} + a^2 k^2 \mathcal{U}_1 + a^4 k^4 \mathcal{U} \qquad \text{III 2.31}$$

$$\overline{\mathfrak{z}} = \tilde{\Delta} + \overline{h}$$

$$\tilde{\Omega} = \cos^4\varphi \sin^4\vartheta + \sin^4\varphi \sin^4\vartheta + \cos^4\vartheta$$

$$C_0 = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k^{(0)}}{\theta}} - 1}$$

Predimo sa sume na integral:

$$C_0 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \, d\vartheta \int_0^{k_m} \frac{k^2 dk}{e^{\frac{E_k^{(0)}}{\theta}} - 1}$$

I smena: $\quad ak = \varrho \quad ; \; dk = \frac{1}{a} d\varrho$

II smena: $\quad \frac{\mathcal{U}_1 \varrho^2}{\theta} = x \quad ; \; \varrho = \left(\frac{\theta}{\mathcal{U}_1}\right)^{\frac{1}{2}} x^{\frac{1}{2}} \quad ; d\varrho = \left(\frac{\theta}{\mathcal{U}_1}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} x^{-\frac{1}{2}} dx$

$$C_0 = \frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{\theta}{\mathcal{U}_1}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n\overline{\mathfrak{z}}}{\theta}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \, d\vartheta \int_0^{\infty} dx \, x^{\frac{1}{2}} e^{-nx - n\frac{\mathcal{U}}{\mathcal{U}_1^2}\theta x^2}$$

Smena: $\quad nx = y \quad ; \quad dx = \frac{dy}{n}$

Sledeći izraz razvijamo u red i zadržavamo se na drugom članu jer je θ malo.

$$e^{-y-\frac{4}{\text{Ц}^2}\frac{\theta}{n}y^2} \cong e^{-y}\left(1-\frac{4}{\text{Ц}_1^2}\frac{\theta}{n}y^2\right)$$

$$C_0 = C_0' + C_0''$$

$$C_0' = \frac{1}{2}\frac{1}{8\pi^3}\left(\frac{\theta}{\text{Ц}_1}\right)^{\frac{3}{2}} Z_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\bar{\mu}}{\theta}\right)\cdot 4\pi\cdot\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right)$$

$$\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) = \int_0^\infty y^{\frac{1}{2}} e^{-y}\,dy = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$Z_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\bar{\mu}}{\theta}\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\left(\frac{\bar{\mu}}{\theta}\right)}}{n^{3/2}} \qquad \text{III 2.31a}$$

Smena: $\tau = \dfrac{\theta}{4\pi\text{Ц}_1}$; $\theta = 4\pi\text{Ц}_1\tau$

$$C_0' = Z_{\frac{3}{2}}(u)\,\tau^{\frac{3}{2}} \qquad \text{III 2.32}$$

$$u = \frac{\bar{\mu}}{4\pi\text{Ц}_1\tau}$$

$$C_0'' = -\frac{1}{16\pi^3}\left(\frac{\theta}{\text{Ц}_1}\right)^{\frac{5}{2}} Z_{\frac{5}{2}}\left(\frac{\bar{\mu}}{\theta}\right)\Gamma\left(\tfrac{7}{2}\right)\frac{1}{\text{Ц}_1}\left(-\frac{1}{12}\text{Ц}\frac{12\pi}{5}-\frac{6}{2\Delta}4\pi\right)$$

$$\frac{12\pi}{5} = \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\tilde{\Omega}(\vartheta,\varphi)\sin\vartheta\,d\vartheta$$

$$4\pi = \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\cos\vartheta\,d\vartheta$$

$$\Gamma\left(\tfrac{7}{2}\right) = \int_0^\infty y^{\frac{5}{2}}e^{-y}\,dy = \frac{15}{8}\sqrt{\pi} \ ; \ Z_{\frac{5}{2}}\left(\frac{\bar{\mu}}{\theta}\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\left(\frac{\bar{\mu}}{\theta}\right)}}{n^{5/2}}$$

Smena: $\tau = \dfrac{\theta}{4\pi\text{Ц}_1}$; $\theta = 4\pi\text{Ц}_1\tau$

$$\varepsilon = \frac{10\,\beta^2}{\Delta\,\text{Ц}_1} \qquad \text{III 2. 33}$$

$$C_0'' = \frac{3\pi}{4}Z_{\frac{5}{2}}(u)(1+\varepsilon)\,\tau^{\frac{5}{2}} \qquad \text{III 2. 34}$$

Anharmonijsku popravku koncentracije eksitona dobićemo iz anharmonijskog spektra. Dobićemo i popravku koncentracije eksitona koja proizilazi samo iz harmonijskog spektra.

$$E_K = E_K^{(0)} + \underbrace{\frac{1}{N}\sum_q \langle B_q^+ B_q \rangle_0 \left(H_{K,q,K} + H_{K,q,q} - 2\Lambda_{K,q} \right)}_{\delta E}$$

$$\Sigma_{K,q} = H_{K,q,K} + H_{K,q,q} \qquad \text{III 2.35}$$

Iz III 2.23, III 2.24 i III 2.25 dobija se:

$$\Sigma_{K,q} = 2\left(\gamma_0 + \gamma_{K-q} - \alpha_K - \alpha_q + \frac{\beta_K \beta_q}{\Delta} - \frac{1}{N}\sum_p \frac{\beta_p^2 + \beta_{p+K-q}^2 + \beta_{p-K-q}^2}{\Delta} \right)$$

$$-2\Lambda_{K,q} = -2\frac{1}{N}\sum_{q_2} \frac{\beta_{q+K-q_2}^2}{\Delta} \qquad \text{III 2.36}$$

Ostali članovi u izrazima III 2.36 ravni su nuli. Ojlerove transformacije za našu aproksimaciju daće sledeće rezultate:

$$\gamma_0 = 6\gamma$$

$$\gamma_{K-q} = 6\gamma - \gamma a^2 (K^2 + q^2 - 2Kq\cos\vartheta)$$

$2\gamma a^2 Kq\cos\vartheta \,(=) 0$ (kad uđe u integral daje nulu/

$$\alpha_K = 6\alpha - \alpha a^2 K^2 \equiv -6\alpha_0 + \alpha_0 a^2 K^2$$

$$\alpha_q = 6\alpha - \alpha a^2 q^2 \equiv -6\alpha_0 + \alpha_0 a^2 q^2$$

$$\beta_K \beta_q = 36\beta^2 - 6\beta^2 a^2 (K^2 + q^2)$$

Prelazeći sa sume na integral dobijamo:

$$-\frac{1}{N}\sum_p \frac{\beta_p^2}{\Delta} = -\frac{6\beta^2}{\Delta} \; ; \; -\frac{1}{N}\sum_p \frac{\beta_{p+K-q}^2}{\Delta} \underset{p+K=p'}{=} -\frac{1}{N}\sum_{p'} \frac{\beta_{p'-q}^2}{\Delta}$$

$$-\frac{2}{N}\sum_{p'} \frac{\beta_{p'-q}^2}{\Delta} = -\frac{12\beta^2}{\Delta} \; ; \; -\frac{1}{N}\sum_p \frac{\beta_{p-K-q}^2}{\Delta} \underset{p-K=p'}{=} -\frac{1}{N}\sum_{p'} \frac{\beta_{p'-q}^2}{\Delta}$$

$$-\frac{2}{N}\sum_{q_2}\frac{\beta^2_{q+k-q_2}}{\Delta}=-\frac{12\beta^2}{\Delta}$$

$$Б_{k,q}-2\Lambda_{k,q}=M+La^2(k^2+q^2) \qquad \text{III 2.37}$$

$$M=24\left(\gamma-\alpha+\frac{\beta^2}{4\Delta}\right)$$

$$L=\alpha-\gamma-\frac{6\beta^2}{\Delta} \qquad \text{III 2.38}$$

$$\delta E=\frac{1}{N}\sum_q\langle B_q^+B_q\rangle_0\left[M+La^2(k^2+q^2)\right]$$

$$\delta E=\frac{a^3N}{N}\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\vartheta\,d\vartheta\int_0^{q_{max}}\frac{M+La^2(k^2+q^2)}{e^{\frac{\frac{\mathcal{E}}{}+a^2q^2\mathcal{U}}{\theta}}-1}q^2dq$$

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\vartheta\,d\vartheta=4\pi$$

I smena: $aq=p\ ;\ dq=\frac{dp}{a}$

II smena: $\frac{\mathcal{U}p^2}{\theta}=x\ ;\ p=\left(\frac{\theta}{\mathcal{U}}\right)^{\frac{1}{2}}x^{\frac{1}{2}}\ ;\ dp=\frac{1}{2}\left(\frac{\theta}{\mathcal{U}}\right)^{\frac{1}{2}}x^{-\frac{1}{2}}dx$

$$\delta E=(M+La^2k^2)\frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{\theta}{\mathcal{U}}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^{\infty}dx\,x^{\frac{1}{2}}\underline{\frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}}{\theta}+x}-1}}+$$

$$+L\frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{\theta}{\mathcal{U}}\right)^{\frac{5}{2}}\int_0^{\infty}dx\,x^{\frac{3}{2}}\underline{\frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}}{\theta}+x}-1}}$$

Razvijanjem u red podvučenih članova, zaustavljajući se na drugom članu reda, i smenom $\mu x=y$, dobijamo:

$$\delta E=(M+La^2k^2)Z_{\frac{3}{2}}(\mu)\,\tau^{\frac{3}{2}}+L\frac{6}{\pi}Z_{\frac{5}{2}}(\mu)\,\tau^{\frac{5}{2}}$$

III 2.39

$$\mathcal{U} = \frac{\mathfrak{J}}{4\pi \mathcal{L}_1 \tau}$$

Iz izraza III 2.31 i III 2.39, posle sledećih zamena oznaka, dobija se:

$$C = C_1 \quad ; \quad E_k = E_k^{(1)} \qquad \text{III 2.4o}$$

/Pišemo indeks "1" jer se izvođenje odnosi na popravku prvog reda teorije perturbacije/

$$E_k^{(1)} = \mathfrak{J} + M Z_{\frac{3}{2}(u)} \tau^{\frac{3}{2}} + \frac{6}{\pi} L Z_{\frac{5}{2}(u)} \tau^{\frac{5}{2}} +$$
$$+ (\mathcal{L}_1 + L Z_{\frac{3}{2}(u)} \tau^{\frac{3}{2}}) a^2 k^2 + a^4 k^4 \mathcal{H}(\vartheta, \varphi) \qquad \text{III 2.41}$$

$$C_1 = C_1' + C_1'' \qquad \text{III 2.42}$$

Ako uporedimo III 2.31, III 2.32 i III 2.41, možemo pisati:

$$C_1' = Z_{\frac{3}{2}(\nu)} \tilde{\tau}^{\frac{3}{2}} \qquad \text{III 2.42a}$$

$$\tilde{\tau} = \frac{\theta}{4\pi [\mathcal{L}_1 + L \tau^{\frac{3}{2}} Z_{\frac{3}{2}(u)}]}$$

$$\nu = \frac{\mathfrak{J} + M Z_{\frac{3}{2}(u)} \tau^{\frac{3}{2}} + \frac{6}{\pi} L Z_{\frac{5}{2}(u)} \tau^{\frac{5}{2}}}{4\pi \mathcal{L}_1 \tau}$$

III 2.42b

Za niske temperature računaćemo koncentraciju eksitona u prvoj aproksimaciji sa tačnošću do trećeg stepena temperature $(\tau^3, \tilde{\tau}^3, \theta^3)$.

Iz definicije $Z_{\frac{3}{2}}(\nu)$ /III 2.31a/ proizilazi izračunavanje koje za navedenu tačnost daje:

$$Z_{\frac{3}{2}}(\nu_0) = Z_{\frac{3}{2}}(1) - \frac{M Z_{\frac{3}{2}}(1) Z_{\frac{1}{2}}(1)}{4\pi L_1} \tau^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \frac{M^2 Z^2_{\frac{3}{2}}(1) Z_{-\frac{1}{2}}(1)}{(4\pi L_1)^2} \tau -$$

$$- \left[\frac{1}{6} \frac{M^3 Z^3_{3/2}(1) Z_{-\frac{3}{2}}(1)}{(4\pi L_1)^3} + \frac{6}{\pi} \frac{L Z_{\frac{5}{2}}(1) Z_{\frac{3}{2}}(1)}{4\pi L_1} \right] \tau^{\frac{3}{2}}$$

III 2.43

Ako uporedimo izraze III 2.31, III 2.33 i III 2.41 dobićemo:

$$C_1'' = \frac{3}{4}\pi(1+\varepsilon) Z_{\frac{5}{2}}(\nu_0) \tilde{\tau}^{\frac{5}{2}} \qquad \text{III 2.44}$$

Za najavljenu aproksimaciju dovoljan je i sledeći razvoj:

$$Z_{\frac{5}{2}}(\nu_0) = Z_{\frac{5}{2}}(1) - \frac{M Z^2_{3/2}(1)}{4\pi L_1} \tau^{\frac{1}{2}} \qquad \text{III 2.45}$$

Smena: $\tilde{\tau} = \frac{\theta}{4\pi L_1} \frac{1}{\left(1 + \frac{L}{L_1} Z_{\frac{3}{2}}(1) \tau^{\frac{3}{2}}\right)} \approx \frac{\theta}{4\pi L_1}$

$$\tilde{\tau} \cong \tau$$

$$C_1'' = \frac{3}{4}\pi(1+\varepsilon) Z_{\frac{5}{2}}(1) \tau^{\frac{5}{2}} - \frac{3}{4}\pi(1+\varepsilon) \frac{M Z^2_{3/2}(1)}{4\pi L_1} \tau^3$$

III 2.46

Konačno možemo da pišemo:

$$C_1 = C_{(1)}\text{harmonijsko} + C_{(1)}\text{anharmonijsko} \qquad \text{III 2.47}$$

Dobijaju se sledeći rezultati za niske temperature:

- Koncentracija eksitona u nultoj aproksimaciji, dobijena samo iz harmonijskog spektra, u funkciji temperature τ

$$C_0 = Z_{\frac{3}{2}}(1) \tau^{\frac{3}{2}} + \frac{3}{4}\pi(1+\varepsilon) Z_{\frac{5}{2}}(1) \tau^{\frac{5}{2}} \qquad \text{III 2.48}$$

- Odgovarajući parametar uređenosti

$$\sigma_0 \equiv 1 - 2C_0 \qquad \text{III 2.48}$$

- Prva popravka koncentracije eksitona može da se rasčlani na harmonijski i anharmonijski deo.

$$C_1 = C_{(1)\,\text{harmonijska}} + C_{(1)\,\text{anharmonijska popravka}}$$

$$C_{(1)\,\text{harmonijska}} = C_0 = Z_{\frac{3}{2}}(u)\,\tau^{\frac{3}{2}} + $$
$$+ \frac{3}{4}\pi(1+\varepsilon)\,Z_{\frac{5}{2}}(u)\,\tau^{\frac{5}{2}} \qquad \text{III 2.49}$$

$$C_{(1)\,\text{anharmonijska popravka}} = -\frac{M Z_{\frac{3}{2}}(u) Z_{\frac{1}{2}}(u)}{4\pi \text{Ц}}\tau^2 + \frac{1}{2}\frac{M^2 Z^2_{\frac{3}{2}}(u) Z_{-\frac{1}{2}}(u)}{(4\pi \text{Ц})^2}\tau^{\frac{5}{2}}$$
$$- \left[\frac{1}{6}\frac{M^3 Z^3_{\frac{3}{2}}(u) Z_{-\frac{3}{2}}(u)}{(4\pi \text{Ц})^3} + \frac{6}{\sqrt{\pi}}\frac{L Z_{\frac{5}{2}}(u) Z_{\frac{3}{2}}(u)}{4\pi \text{Ц}} + \frac{3}{4}\pi(1+\varepsilon)\frac{M Z^2_{3/2}(u)}{4\pi \text{Ц}}\right]\tau^3$$

$$\text{III 2.5o}$$

- Prva popravka parametra uređenosti, takođe, može da se rasčlani na harmonijski i anharmonijski deo

$$\sigma_1 \equiv 1 - 2C_1 = 1 - 2\left(C_{(1)\,\text{harm.}} + C_{(1)\,\text{anharm.}}\right)$$

$$\text{III 2.51}$$

§3. Visoke temperature i superradijativna stanja

Za visoke temperature karakteristična je visoka koncentracija kvazi-čestica. Parametar uređenosti će na nekoj temperaturi prelaza postati ravan nuli. Mi ćemo iz razvoja za temperature veće od temperature prelaza, naći temperaturu prelaza za eksitonski sistem. Postupak je sličan postupku u teoriji magnetizma, koji rezultira u Kiri-Vajsov[19] zakon.

Uzimajući u obzir najavljenu tačnost /kao u izrazu III 2.5/, ekvivalentni Hamiltonijan eksitonskog sistema može da se piše na sledeći način:

$$H_{eq} = \tilde{\Delta} \sum_{n} P_n^{\dagger} P_n + \sum_{n,m} \tilde{\alpha}_{nm} \overbrace{\,}^{(P_n^{\dagger} P_m)} + \sum_{n,m} \tilde{\gamma}_{nm} P_n^{\dagger} P_n P_m^{\dagger} P_m \qquad \text{III 3.1}$$

$$\tilde{\gamma}_{nm} \sim \gamma_{nm}$$

$$\Omega_f = \tilde{\Delta} P_f + \sum_{m} \tilde{\alpha}_{fm} P_m - 2 \sum_{m} \tilde{\alpha}_{fm} P_f^{\dagger} P_f P_m +$$

$$+ 2 \sum_{m} \tilde{\gamma}_{fm} P_m^{\dagger} P_m P_f \qquad \text{III3.2}$$

Potražimo pol funkcije Grina:

$$(E - \tilde{\Delta}) \langle\langle P_f | P_g^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{i\sigma}{2\pi} \delta_{fg} + \sum_{m} \tilde{\alpha}_{fm} \langle\langle P_m | P_g^{\dagger} \rangle\rangle -$$

$$- 2 \sum_{m} \tilde{\alpha}_{fm} \langle\langle P_f^{\dagger} P_f P_m | P_g^{\dagger} \rangle\rangle + 2 \sum_{m} \tilde{\gamma}_{fm} \langle\langle P_m^{\dagger} P_m P_f | P_g^{\dagger} \rangle\rangle$$

III 3.3

Parametar uređenosti je:

$$\sigma = 1 - 2 \langle P_f^{\dagger} P_f \rangle$$

$$\langle P_f^{\dagger} P_f \rangle = \frac{1 - \sigma}{2}$$

Za Pauli operatore nema analognog razvoja Vikovoj teoremi za Boze ili Fermi operatore. Međutim, dobre rezultate daje i sledeći razvoj /poznat pod imenom tjablikovo dekulpovanje/:

$$\langle\langle P_f^\dagger P_f P_m | P_g^\dagger \rangle\rangle \cong \langle P_f^\dagger P_f \rangle \langle\langle P_m | P_g^\dagger \rangle\rangle$$

$$\langle\langle P_m^\dagger P_m P_f | P_g^\dagger \rangle\rangle \cong \langle P_m^\dagger P_m \rangle \langle\langle P_f | P_g^\dagger \rangle\rangle$$

$$\langle P_f^\dagger P_f \rangle = \langle P_m^\dagger P_m \rangle$$

$$(E - \tilde{\Delta}) \langle\langle P_f | P_g^\dagger \rangle\rangle = \frac{i\delta}{2\pi} + \sum_m \tilde{\alpha}_{fm} [1 - (1 - \sigma)] \langle\langle P_m | P_g^\dagger \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_m \tilde{\gamma}_{fm} (1 - \sigma) \langle\langle P_f | P_g^\dagger \rangle\rangle \qquad \text{III } 3.4$$

$$\sum_m \tilde{\gamma}_{fm} = \tilde{\gamma}_0 \qquad \text{III } 3.5$$

U principu, funkcija Grina može da se izvuče ispred znaka sumacije. Izvršimo Furije transformacije pojedinih izraza, a zatim pomnožimo celu jednačinu III 3.4 sa $e^{-ik(f-g)}$.

$$\langle\langle P_f | P_g^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{N} \sum_k \langle\langle P_k | P_k^\dagger \rangle\rangle e^{ik(f-g)}$$

$$\langle\langle P_m | P_g^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{N} \sum_k \langle\langle P_k | P_k^\dagger \rangle\rangle e^{ik(m-g)}$$

$$\delta_{f,g} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(f-g)} \qquad \text{III } 3.6$$

$$\sum_m \tilde{\alpha}_{fm} e^{ik(m-f)} \equiv \tilde{\alpha}_k$$

$$[E - \tilde{\Delta} - (1 - \sigma)\tilde{\gamma}_0] \langle\langle P_k | P_k^\dagger \rangle\rangle = \frac{i\delta}{2\pi} + \sigma\tilde{\alpha}_k \langle\langle P_k | P_k^\dagger \rangle\rangle$$

$$\langle\langle P_k | P_k^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{i\sigma}{2\pi} \; \frac{1}{E - \tilde{\Delta} - \tilde{\gamma}_0 + \sigma(\tilde{\gamma}_0 - \tilde{\alpha}_k)} \qquad \text{III 3.7}$$

Iz pola poslednje Grinove funkcije dobijamo:

$$E_k = \tilde{\Delta} + \tilde{\gamma}_0 - \sigma(\tilde{\gamma}_0 - \tilde{\alpha}_k) \qquad \text{III 3.8}$$

$$\langle P_k^{\dagger} P_k \rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 3.9}$$

$$\langle P_m^{\dagger} P_m \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \langle P_k^{\dagger} P_k \rangle \qquad \text{III 3.10}$$

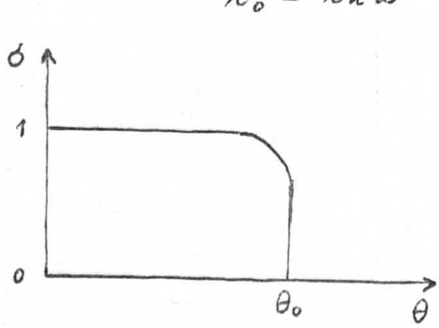
$$\langle P_m^{\dagger} P_m \rangle = \frac{\sigma}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1}$$

$$\frac{1 - \sigma}{2} = \frac{\sigma}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{\tilde{\Delta} + \tilde{\gamma}_0 - \sigma(\tilde{\gamma}_0 - \tilde{\alpha}_k)}{\theta}} - 1} \qquad \text{III 3.11}$$

$$\sigma = \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_k \mathrm{ctgh} \frac{\tilde{\Delta} + \tilde{\gamma}_0 - \sigma(\tilde{\gamma}_0 - \tilde{\alpha}_k)}{2\theta}} \qquad \text{III 3.12}$$

I smena: $x = \frac{\tilde{\Delta} + \tilde{\gamma}_0}{2\theta}$; $y = \frac{-\sigma(\tilde{\gamma}_0 - \tilde{\alpha}_k)}{2\theta}$

II smena: $t_0 = th\, x$; $t_k = th\, y$ III 3.13



sl. 4.

$x \gg y$

$t_0 \gg t_k$

$$\sigma = \frac{t_0}{\frac{1}{N} \sum_k \left[1 + (1 - t_0^2) \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_k}{t_0} \right)^n \right]} \qquad \text{III 3.14}$$

$$\frac{1}{N}\sum_k 1 = 1 \quad ; \quad \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{t_k}{t_o}\right)^n \cong -\frac{t_k}{t_o} \qquad \text{III 3.15}$$

Druga jednačina III 3.15 proizlazi iz činjenice da je $t_k \ll t_o$.

$$\sigma = \frac{t_o}{1-(1-t_o^2)\frac{1}{N}\sum_k \frac{t_k}{t_o}} \qquad \text{III 3.16}$$

t_o može da se izvuče ispred sume jer ne zavisi od indeksa "k".

$$\frac{1}{N}\sum_k t_k = -\frac{1}{N}\sum_k th\,\frac{\sigma(\tilde{\gamma}_o+\tilde{\alpha}_k)}{2\theta} \cong$$

$$\cong -\frac{1}{N}\sum_k \frac{\sigma(\tilde{\gamma}_o+\tilde{\alpha}_k)}{2\theta} =$$

$$= -\frac{\sigma\tilde{\gamma}_o}{2\theta} - \frac{\sigma}{2\theta}\,\frac{1}{N}\sum_k\left(\alpha_k - \frac{\beta_k^2}{2\Delta}\right)$$

$$\frac{1}{N}\sum_k \alpha_k = 0 \quad ; \quad \frac{1}{N}\sum_k \frac{\beta_k^2}{2\Delta} \ll \tilde{\gamma}_o$$

$$\frac{1}{N}\sum_k t_k \cong \frac{-\sigma\tilde{\gamma}_o}{2\theta}$$

$$\sigma = \frac{t_o}{1+\frac{(1-t_o^2)}{t_o}\,\frac{\sigma\tilde{\gamma}_o}{2\theta}} \qquad \text{III 3.17}$$

$$\frac{1}{1-(\xi)} \cong 1+(\xi) \quad (\xi<1)$$

$$\sigma = t_o - (1-t_o^2)\frac{\sigma\tilde{\gamma}_o}{2\theta} \qquad \text{III 3.18}$$

Jednačinu III 3.18 /parametar uređenosti/ rešavamo metodom iteracije:

$$\theta \to \infty \quad ; \quad \sigma^{(0)} = t_0$$

$\sigma^{(0)}$ - parametar uređenosti u nultoj aproksimaciji

$$t_0 \leq 1$$

$$\sigma^{(1)} = t_0 - (1-t_0^2)\frac{\sigma^{(0)}\tilde{\gamma}_0}{2\theta} = t_0 - (1-t_0^2)\frac{t_0\tilde{\gamma}_0}{2\theta} \qquad \text{III } 3.19$$

U teoriji magnetizma, iz paramagnetne faze dobija se sličan izraz:

$$\sigma_m^{(1)} = t_0^m + t_0^m\left[1-(t_0^m)^2\right]\frac{1}{\tau} \quad ; \quad t_0^m = th\,\frac{\mu\mathcal{H}}{2\theta}$$

σ_m - magnetizacija, $\mathcal{H}$ - jačina magnetnog polja

Diferenciranjem $\sigma_m^{(1)}$ po $\mathcal{H}$ dobija se magnetna susceptibilnost $\chi_m = \frac{\mu^2}{2}\frac{1}{\theta-\Delta}$. Iz uslova: $\chi_m \to \infty$ dobija se $\theta_c = \Delta$

U cilju izračunavanja temperature prelaza θ_0 za eksitonski sistem /imajući u vidu da je vrednost parametra uređenosti na toj temperaturi minimalna/, analogno teoriji magnetizma, diferenciraćemo izraz $\sigma^{(1)}$ po veličini x datoj u izrazima III 3.13.

$$\frac{\partial\sigma^{(1)}}{\partial x} = \frac{\partial t_0}{\partial x} - \frac{\tilde{\gamma}_0}{2\theta}\frac{\partial t_0}{\partial x} + 3t_0^2\frac{\tilde{\gamma}_0}{2\theta}\frac{\partial t_0}{\partial x} \qquad \text{III } 3.20$$

$$t_0 = th\,x \qquad \frac{\partial t_0}{\partial x} = \frac{1}{ch^2 x}$$

$$\frac{\partial\sigma^{(1)}}{\partial x} = \frac{1}{ch^2 x}\left(1 - \frac{\tilde{\gamma}_0}{2\theta}\right) + \frac{3\,th^2 x}{ch^2 x}\frac{\tilde{\gamma}_0}{2\theta} \qquad \text{III } 3.21$$

Analogno magnetnoj susceptibilnosti, definisaćemo veličinu χ pomoću koje ćemo izračunati θ_0.

$$\chi = \lim_{x\to 0} \frac{\partial \delta^{(1)}}{\partial x} \quad ; \qquad th^2(0) = 0 \; ; \; ch^2(0) = 1$$

$$\chi = \frac{\tilde{\Delta} + \tilde{\gamma}_0}{2\theta} \to \infty \quad ; \quad \chi = 1 - \frac{\tilde{\gamma}_0}{2\theta} \cong \frac{\theta}{\theta + \frac{\tilde{\gamma}_0}{2}} \qquad \text{III 3.22}$$

$x \to 0$, jer $\theta \to \infty$

III 3.23

$\chi \to \infty$ tako da za $\tilde{\gamma}_0 > 0$, što odgovara odbijanju eksitona, ne može da se nađe θ_0 , jer je $\theta_0 > 0$. Za $\tilde{\gamma}_0 < 0$, što odgovara privlačenju eksitona, dobija se temperatura prelaza:

$$\theta_0 = -\frac{\tilde{\gamma}_0}{2} \qquad (\tilde{\gamma}_0 < 0) \qquad \text{III 3.24}$$

Ispitivanje parametra uređenosti u teoriji eksitona postalo je poslednjih godina popularno u vezi sa optičkim pumpanjem kristala. Parametar uređenosti koji predlaže Dajk, predstavlja statističku srednju vrednost razlike broja elektrona u osnovnom stanju i broja elektrona u pobuđenom stanju. Ovaj parametar se prema formulama prelaska na paulione tačno svodi na parametar uređenosti koji je ovde ispitivan. Superradijativna stanja dobijamo na onoj temperaturi na kojoj parametar uređenosti ima minimalnu vrednost, ili što je isto, na kojoj njegov izvod ima singularitet. Na takvoj temperaturi eksitonski sistem je očigledno najbolje optički napumpan. Rezultati ovog paragrafa pokazuju da je prelaz u superradijativna stanja moguć samo ako je dinamička interakcija eksitona privlačna / $\tilde{\gamma}_0 < 0$ /. U slučaju odbijanja / $\tilde{\gamma}_0 > 0$ / prelaz u superradijativna stanja ne postoji.

ZAKLJUČAK

Rezultati dobijeni u ovom radu mogu se rezimirati na sledeći način:

a. Korišćenjem Vajlovog identiteta dobijen je tzv. ekvivalentni Hamiltonijan eksitonskog sistema, koji održava broj eksitona i to sa tačnošću prvog stepena odnosa širine eksitonske zone i energije pobuđenja izolovanog molekula.

b. Na niskim temperaturama ispitano je ponašanje parametra uređenosti eksitonskog sistema, s obzirom na prisustvo eksiton-eksiton interakcije. Ispostavilo se da su prve korekcije koje nastaju usled ove interakcije proporcionalne kvadratu apsolutne temperature. Treba napomenuti da je izraz "niske temperature" ovde veoma relativan, jer s obzirom na to da je energija pobuđenja izolovanog molekula oko 40000 Bolcmanovih konstanti, rezultati koji se ovde dobijaju važe i na temperaturi od nekoliko hiljada stepeni Kelvina.

c. Ispitana je mogućnost faznog prelaza molekularnog kristala u superradijativno stanje. Ispostavilo se da egzistencija faznog prelaza bitno zavisi od tipa dinamičke interakcije eksitona. Ukoliko je dinamička interakcija privlačna, prelaz postoji i vrši se na temperaturama na kojima postoje toplotni kvanti reda veličine dinamičke interakcije. U slučaju odbojne dinamičke interakcije fazni prelaz ne postoji, pa takvi kristali nisu pogodni za optičko pumpanje.

Na kraju treba napomenuti da su svi proračuni izvedeni za kristal proste kubne strukture i za eksitonsku šemu za samo dva nivoa. Za opštije slučajeve u torijskoj analizi ne bi postojale principijelne teškoće /sva izračunavanja bi mogla da se izvedu na isti način kao i ovde/, ali zato nikakvi konkretni rezultati ne bi mogli da se dobiju bez numeričkog računa. Važno je naglasiti da davidovljevsko i beteovsko cepanje zona u ovim opštijim slučajevima može bitno da izmeni zaključke do kojih se došlo u ovom radu.

LITERATURA

1) В. М. АГРАНОВИЧ, В. Л. ГИНЗБУРГ — „КРИСТАЛЛООПТИКА С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ И ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ" (1965 г.)

2) Я. И. ФРЕНКЕЛЬ, Phys. Rev. 37, 17 (1931); Phys. Rev. 37, 1276 (1931)

3) R.E. PEIERLS, Ann. Physik, 13(5), 905 (1932)

4) G.H WANNIER, Phys. Rev. 52, 191 (1937)

5) А.С. ДАВЫДОВ, ЖЭТФ 18, 210 (1948); ТЕОРИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЭКСИТОНОВ, ИЗД. «НАУКА» (1968)

6) В.М. АГРАНОВИЧ, ФТТ 8, 2801 (1966); [ТЕОРИЯ ЭКСИТОНОВ 1968] V.M. AGRANOVICH, B.S. TOSHICH, SOV. PHYS. 26, 1 (1968)

7) CHARLES KITTEL, UVOD U FIZIKU ČVRSTOG STANJA (1970)

8) E.F. GROSS, B.P. ZAKHARCHENYA, N.M. REINOV, DOKLADY AKAD. NAUKA SSSR 92, 265 (1953)

9) P.W. BAUMEISTER, Phys. Rev. 121, 359 (1961)

10) N.F. MOTT, R.W. GURNEY, Elektronic processes in ionic cristals, OXFORD, 1948 g.

11) D.G. THOMAS, J. HOPFIELD, Phys. Rev. 124, 657 (1961)

12) А. Ф. ПРИХОТЬКО, УФН 67, 99 (1959)

13) H.M. McCONNELL, J. Chem. Phys. 39, 2321 (1963)

14) D.P. CRAIG, J. Chem. Cos. 539, 2309 (1955)

15) H.C. WOLF, SOLID STATE PHYS. 9, 1 (1959)

16) H. FRÖHLICH, Phys. Rev. 79, 845-856 (1950)
R.G. KEPLER, P. AVAKIAN, Phys. Rev. 10, 400 (1963)

17) F. BARDEEN, L.N. COOPER, J.R SCHRIEFER, Phys. Rev. 106, 162 (1957)

18) Н.Н. БОГОЛЮБОВ, ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ, КИЕВ (1949)

19) ТЯБЛИКОВ С.В. — ЖЭТФ, 18, 1023 (1948)

20) R.H. DYCKE, Phys. Rev. 93, str 99 (1954)