UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET - GRUPA FIZIKA

DIPLOMSKI RAD

Tema: EKSITONI U PRIMESNOM MOLEKULARNOM KRISTALU

PONJEVIĆ R. ILIJA

NOVI SAD
1975.

Iskreno se zahvaljujem Dr BRATISLAVU TOŠIĆU
na pomoći ukazanoj pri izradi ovog diplomskog rada!

Sadržaj :

Uvod

Ovaj diplomski rad ispituje stanje molekularnog kristala u slučaju kada on sadrži primese. Kao što je poznato primesa vakansija ili bilo kakvo narušenje simetrije dovodi do pojave dopunskih stanja u odnosu na stanja idealne strukture. Ova dopunska stanja su po pravilu lokalizovana i to oko mesta narušenja simetrije.

Sobzirom da teorijska analiza strukture sa narušenom simetrijom sadrži u sebi veoma komplikovane račune, koji se najčešće mogu dovesti do kraja samo upotrebom računara, ovde će biti razmatran slučaj jednodimenzionalnog molekularnog kristala sa jednom primesom.

Glava I

EKSITONI U IDEALNOM KRISTALU

I 1. Pojam Frenkelovog eksitona

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

Ovaj rad biće posvećen pitanjima teorije Frenkelovih eksitona i zato ćemo u daljem izlaganju izložiti detaljnije teoriju ovih elementarnih ekscitacija.

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

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

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

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.

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

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

Sam nastanak eksitona kao kolektivne kristalne ekscitacije može se slikovito predstaviti na sledeći način: Pre osvetljavanja svi molekuli kristala nalaze se u osnovnom stanju tj. u stanju najniže energije. Predpostavimo da kvant svetlosti na jednom molekulu u kristalnoj rešetci prevede jedan od elektrona iz osnovnog u neko pobuđeno stanje. Pošto su molekuli u kristalu povezani, ostali molekuli reagovaće na ovo pobuđenje jednoga od njih, tj. zbog izmene matričnih elemenata interakcije u osnovnom i pobuđenom stanju ekscitiraće se i neki sledeći molekul. Ekscitacija se sa njega prenosi na njegovog suseda itd.

Posle izvesnog vremena veliki broj molekula u kristalu će biti ekscitiran. Ovaj talas pobuđenja čiji se izvor nalazi samo u jednom molekulu naziva se Frenkelov eksiton. Dalja istraživanja biće usmerena isključivo na čiste eksitone Frenkela tj. na one eksitone koji nastaju usled promene stanja elektrona u individualnim molekulima. Hamiltonijan molekularnog kristala može se predstaviti u sledećem obliku:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' W_{\vec{n}\vec{m}} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots I\ 1.2.$$

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

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

$$H=\sum_{\vec{n}\lambda} E_{\vec{n}\lambda}\, a^{+}_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda_1} a^{+}_{\vec{m}\lambda_2} a_{\vec{m}\lambda_3} a_{\vec{n}\lambda_4} \quad \ldots\ldots I\ 1.3.$$

gde $\vec{n},\vec{m}$ – označavaju čvorove kristalne rešetke, $\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4$ predstavljaju skupove kvantnih brojeva koji karakterišu stanje elektrona, $E_{\vec{n}\lambda}$ su energije elektrona u stanju λ, a $W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)$ su matrični elementi operatora dipol-dipolne interakcije po svojstvenim stanjima elektrona u izolovanom molekulu. Operatori $a^{+}_{\vec{n}\lambda}$ i $a_{\vec{n}\lambda}$ kreiraju, odnosno anihiliraju elektron na čvoru $\vec{n}$ u stanju λ. Ako sa $H_{\vec{n}}$ označimo hamiltonijan molekula na mestu $\vec{n}$, onda njegov svojstveni problem možemo napisati kao:

$$H_{\vec{n}}\varphi^{\lambda}_{\vec{n}} = E^{\lambda}_{\vec{n}}\varphi^{\lambda}_{\vec{n}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots I\ 1.4.$$

Na osnovu ovog vidimo da su $E_{\vec{n}}$ energije izolovanog molekula, dok su funkcije $\varphi^{\lambda}_{\vec{n}}$ svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula. Matrični element interakcije dva molekula sa raznim nivoima $\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4$ ima oblik:

$$W_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)=\int \varphi^{*\lambda_1}_{\vec{n}}\varphi^{*\lambda_2}_{\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}\varphi^{\lambda_3}_{\vec{m}}\varphi^{\lambda_4}_{\vec{n}}\, d\tau_{\vec{n}}\, d\tau_{\vec{m}} \quad \ldots I\ 1.5.$$

gde $d\tau_{\vec{n}}$, $d\tau_{\vec{m}}$ predstavljaju elemente zapremine prostora koji zauzimaju molekuli na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$. Talasne funkcije φ jako brzo opadaju sa rastojanjem pa se integral (I 1.5.) može shvatiti bez velike pogreške kao integral po beskonačnoj zapremini.

Osnovno stanje molekula označićemo indeksom nula (o). Da bi smo uprostili situaciju predpostavićemo da monohromatska svetlost, koja pada na kristal može da pobuđuje elektrone u samo jednom stanju, koje ćemo okarakterisati indeksom f. Tada na svakom molekulu elektroni imaju na raspolaganju samo dva stanja. To su stanja sa indeksom nula (0, osnovno stanje) i jedno pobuđeno stanje sa indeksom f. Zbog Paulijevog principa sasvim je očigledno da uz gornju predpostavku na svakom molekulu mogu da se realizuju samo sledeća kvantno-mehanička stanja :

$$h_1 \equiv (|0_0\, 0_f>\, ;\, |1_0\, 1_f>) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \text{I } 1.6.$$

$$h_2 \equiv (|1_0\, 0_f>\, ;\, |0_0\, 1_f>) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \text{I } 1.7.$$

Pošto radimo u aproksimaciji najbližih suseda elektronski hamiltonijan (I 1.3.) za jednodimenzionu strukturu ima oblik :

$$H = \sum_{\vec{n}\lambda} E_{\vec{n}\lambda}\, a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n} \\ \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}} W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)\, a^+_{\vec{n}\lambda_1} a_{\vec{n}\lambda_4} \left(a^+_{\vec{n}+1,\lambda_2} a_{\vec{n}+1,\lambda_3} + a^+_{\vec{n}-1,\lambda_2} a_{\vec{n}-1,\lambda_3} \right) \qquad \text{I } 1.8.$$

Razmatrati hamiltonijan (I 1.8.) kao elektronski hamiltonijan nije zgodno ni sa matematičke tačke gledišta, a ni sa fizičke tačke gledišta, jer fizički posmatrano, eksiton nije pobuđen elektron već kvant pobuđenja molekula kristala. Zbog toga se umesto Fermi operatora $a_{\vec{n}f}$ uvode novi operatori $P_{\vec{n}}$ koji se nazivaju Pauli operatori i definišu na sledeći način :

$$P^+_{\vec{n}} = a^+_{\vec{n}f}\, a_{\vec{n}0} \qquad P_{\vec{n}} = a^+_{\vec{n}0}\, a_{\vec{n}f} \qquad \ldots\ldots\ldots \text{I } 1.9.$$

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 stvorio se u pobuđenom stanju f. Prema tome operator $P^+_{\vec{n}}$ kreira kvant pobuđenja sa energijom $E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}0}$. Operator $P_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome je iščezao elektron u pobuđenom stanju f a stvorio se u osnovnom stanju 0. Prema tome operator $P_{\vec{n}}$ uništava (anihilira) kvant pobuđenja sa energijom $E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}0}$. Sobzirom na definiciju Pauli operatora (I 1.9.) lako se vidi da su oni identički ravni nuli u podprostoru

(I 1.6.) što znači da ovaj podprostor ne može uticati na fizičke karakteristike sistema, pa ga isključujemo iz daljih razmatranja. U podprostoru (I 1.7.) 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 (I 1.6) opravdano. Takođe je očigledno da u podprostoru (I 1.7.) važi uslov:

$$a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}f}+a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}o}=1 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{I } 1.\,10.$$

Kombinovanjem ovog uslova sa poznatim komutacionim relacijama za Fermi operatore, za Pauli operatore (I 1.9.) dobijamo sledeće komutacione zakone:

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

$$[P_{\vec{n}},P_{\vec{m}}]=[P^{+}_{\vec{n}},P^{+}_{\vec{m}}]=0 \qquad m\neq n \quad \ldots\ldots \text{I } 1.\,11.$$

$$P^{2}_{\vec{n}}=P^{+2}_{\vec{n}}=0 \qquad P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}}=a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}f}=0 \text{ ili } 1$$

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. Hamiltonijan (I 1.8.) se sastoji iz dva dela:

$$H=H^{(1)}_{id}+H^{(2)}_{id} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{I } 1.\,12.$$

gde je $H^{(1)}_{id}=\sum\limits_{\vec{n}\lambda}E_{\vec{n}\lambda}a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}$

$$H^{(2)}_{id}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{n}\lambda_1}a_{\vec{n}\lambda_4}\left(a^{+}_{\vec{n}+1,\lambda_2}a_{\vec{n}+1,\lambda_3}+a^{+}_{\vec{n}-1,\lambda_2}a_{\vec{n}-1,\lambda_3}\right)$$

Ako u hamiltonijanu (I 1.8.) uzmemo u obzir činjenicu da indeksi $\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4$ mogu uzimati samo dve vrednosti 0 i f, iskoristimo definiciju Pauli operatora i njihove komutacione relacije dobijamo hamiltonijan $H^{(1)}_{id}$ u paulionskoj reprezentaciji u obliku:

$$H^{(1)}_{id}=\sum_{\vec{n}}(E_{\vec{n}f}-E_{\vec{n}o})P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+NE_{o} \quad \ldots\ldots\ldots \text{I } 1.\,13.$$

gde je N – broj molekula.

	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
I	0	0	0	0
II	f	f	0	0
III	0	0	f	f
IV	f	0	0	f
V	0	f	f	0
VI	f	0	f	0
VII	0	f	0	f
VIII	f	f	f	f

Šema 1.

Razvijajući hamiltonijan $H_{id}^{(2)}$ po šemi 1. i koristeći komutacione relacije dobijamo $H_{id}^{(2)}$ izražen u kvazičestičnim Pauli operatorima.

$$H_{id}^{(2)} = \sum_{\vec{n}} W(0,0,0,0) + \sum_{\vec{n}} \{W(f,0,0,f) - W(0,0,0,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,f,f,0) - W(0,0,0,0)\} P_{\vec{n}+1}^{+} P_{\vec{n}+1} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,f,f,0) - W(0,0,0,0)\} P_{\vec{n}-1}^{+} P_{\vec{n}-1} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(f,0,f,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}+1} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(f,0,f,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}-1} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,f,0,f)\} P_{\vec{n}+1}^{+} P_{\vec{n}} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,f,0,f)\} P_{\vec{n}-1}^{+} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(f,f,0,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}+1}^{+} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(f,f,0,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}-1}^{+} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,0,f,f)\} P_{\vec{n}} P_{\vec{n}+1} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,0,f,f)\} P_{\vec{n}} P_{\vec{n}-1} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,0,0,0) + W(f,f,f,f) - W(f,0,0,f) - W(0,f,f,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} P_{\vec{n}+1}^{+} P_{\vec{n}+1} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \{W(0,0,0,0) + W(f,f,f,f) - W(f,0,0,f) - W(0,f,f,0)\} P_{\vec{n}}^{+} P_{\vec{n}} P_{\vec{n}-1}^{+} P_{\vec{n}-1} \quad \ldots\ldots \text{I } 1.14.$$

Konačno za kompletan hamiltonijan izražen u kvazičestičnim Pauli operatorima dobijamo:

$$H=\sum_{\vec n}(E_f - E_0)P^+_{\vec n}P_{\vec n} + NE_0 + \sum_{\vec n} W(0,0,0,0) + \sum_{\vec n}\{W(f,0,0,f) - W(0,0,0,0)\}P^+_{\vec n}P_{\vec n} +$$

$$+\sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,f,f,0)-W(0,0,0,0)\}P^+_{\vec n+1}P_{\vec n+1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,f,f,0)-W(0,0,0,0)\}P^+_{\vec n-1}P_{\vec n-1}+$$

$$+\sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(f,0,f,0)\}P^+_{\vec n}P_{\vec n+1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(f,0,f,0)\}P^+_{\vec n}P_{\vec n-1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,f,0,f)\}P^+_{\vec n+1}P_{\vec n}+$$

$$+\sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,f,0,f)\}P^+_{\vec n-1}P_{\vec n} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(f,f,0,0)\}P^+_{\vec n}P^+_{\vec n+1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(f,f,0,0)\}P^+_{\vec n}P^+_{\vec n-1}+$$

$$+\sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,0,f,f)\}P_{\vec n}P_{\vec n+1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,0,f,f)\}P_{\vec n}P_{\vec n-1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,0,0,0)+W(f,f,f,f)-$$

$$-W(f,0,0,f)-W(0,f,f,0)\}P^+_{\vec n}P_{\vec n}P^+_{\vec n+1}P_{\vec n+1} + \sum_{\vec n}\tfrac{1}{2}\{W(0,0,0,0)+W(f,f,f,f)-W(f,0,0,f)-$$

$$-W(0,f,f,0)\}P^+_{\vec n}P_{\vec n}P^+_{\vec n-1}P_{\vec n-1} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad I\ 1.15.$$

Pri dobijanju hamiltonijana (I 1.15.) iskorišćena je činjenica da su svi molekuli identični pa $E_{\vec n f}$ i $E_{\vec n 0}$ ne zavise od indeksa rešetke $\vec n$.

Dalje ćemo račun izvesti u aproksimaciji približno druge kvantizacije koja se sastoji u tome što se Pauli operatori zamene Boze operatorima B^+ i B po približnim formulama :

$$P^+_{\vec n} \cong B^+_{\vec n} \qquad P_{\vec n} \cong B_{\vec n} \qquad P^+_{\vec n}P_{\vec n} \cong B^+_{\vec n}B_{\vec n} \qquad \ldots\ldots \quad I\ 1.16.$$

i zadrže samo kvadratni delovi hamiltonijana. Osim toga da bismo uprostili račun zanemarićemo efekt neodržanja eksitona što znači da ćemo iz kvadratnog dela hamiltonijana odbaciti članove koji su proporcionalni B^+B^+ i BB. Približno druga kvantizacija je poznat aproksimativni metod fizike čvrstog stanja dok su efekti neodržanja u teoriji eksitona, kao što smo ranije videli reda $\frac{W_{\vec n \vec m}}{\Delta}$ i veoma mali jer $W_{\vec n \vec m}$ iznosi $0{,}1 \div 0{,}01$ eV dok je Δ reda veličine 5 eV. U ovoj aproksimaciji formula (I 1.15) postaje :

$$H_{eff}^{pdk} = \sum_{\vec{n}} \Delta B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} W(f,0,f,0) B_{\vec{n}}^{+} (B_{\vec{n}+1} + B_{\vec{n}-1}) \quad \ldots\ldots\ldots \text{I } 1.17$$

Ovde su uvedene oznake : $\Delta = \mathcal{E} + W(f,0,0,f) - W(0,0,0,0)$

$$\mathcal{E} = E_f - E_0$$

Ako izvršimo Furije transformaciju Boze operatora :

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

uz $\sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{n}} = N\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}$

nalazimo da je hamiltonijan našeg sistema u impulsnom prostoru :

$$H_{eff}^{pdk} = \sum_{\vec{k}} \{\Delta + W(\vec{k})\} B_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{k}} \quad \ldots\ldots\ldots \text{I } 1.18.$$

gde je : $W(\vec{k}) = 2W(f,0,f,0) \cos a\vec{k}$

I 2 Zakon disperzije za eksitone

Da bi smo našli zakon disperzije za eksitone polazimo od hamiltonijana našeg sistema u impulsnom prostoru.

$$H=\sum_{\vec{k}}\left\{\Delta+W(\vec{k})\right\}B_{\vec{k}}^{+}B_{\vec{k}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ I\ 1.19.$$

Zakon disperzije za eksitone u harmonijskoj aproksimaciji dobijamo po formuli :

$$E_e(\vec{k})=\frac{\partial H_{eff}^{pdk}}{\partial B_{\vec{k}}^{+}B_{\vec{k}}}=\Delta+W(\vec{k}) \quad \ldots\ldots\ I\ 1.20.$$

Ako se ograničimo prostom kubnom strukturom (najbližih 6 suseda), aproksimacijom najbližih suseda i aproksimacijom malih talasnih vektora $ka \ll 1$ onda je:

$$W(k)=2W(\cos k_x a+\cos k_y a+\cos k_z a)\cong 2W\left(1-\frac{k_x^2a^2}{2}+1-\frac{k_y^2a^2}{2}+1-\frac{k_z^2a^2}{2}\right)\cong$$

$$\cong 6W-Wk^2a^2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ I\ 1.21.$$

gde je a – konstanta rešetke

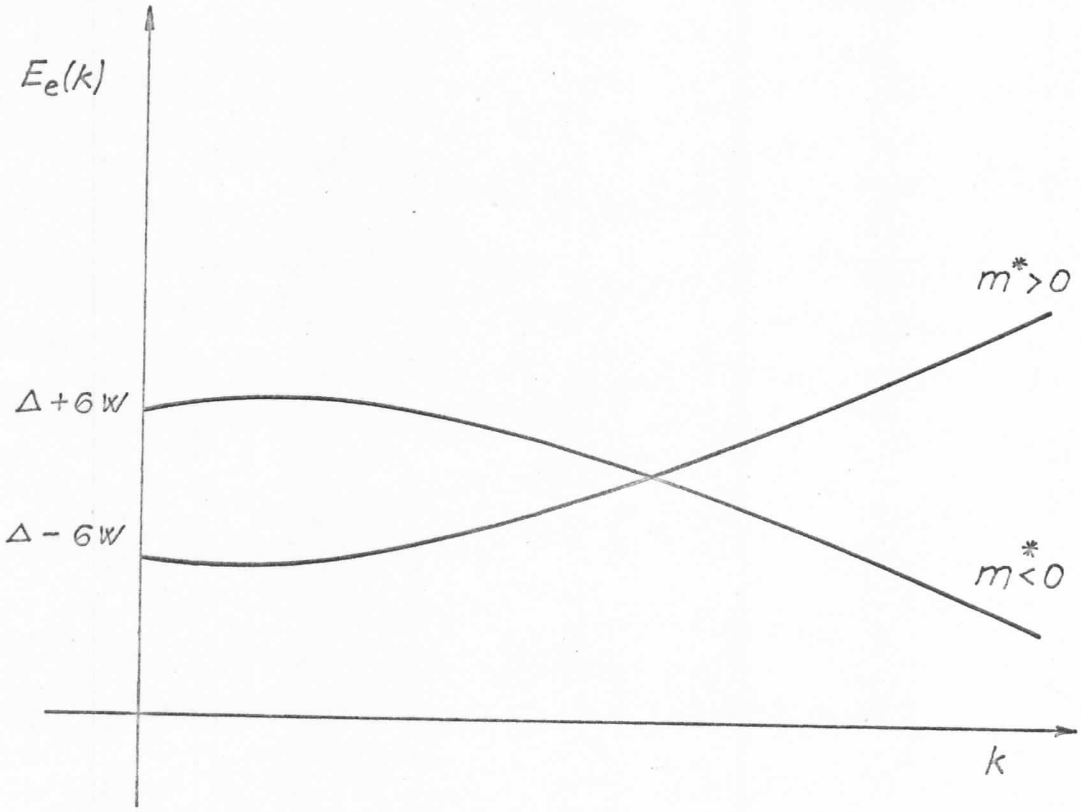
W – matrični elementi dipol-dipolne interakcije za najbliže susede.

U ovoj aproksimaciji energiju eksitona možemo napisati na sledeći način : $E_e(|\vec{k}|)=\Delta+6W+\frac{h^2k^2}{2m^*}$; $m^*=-\frac{h^2}{2Wa^2}$ $\ldots$ I 1.22.

Kao što vidimo u oblasti malih impulsa eksiton ima kvadratni zakon disperzije. To znači da se eksiton ponaša kao slobodna čestica, čija je kinetička energija oblika : $E_{ke}=\frac{h^2k^2}{2m^*}$

U ovom slučaju stvarnu masu čestice zamenjuje efektivna masa $m^*=-\frac{h^2}{2Wa^2}$, koja kao što vidimo zavisi od kristalne strukture (konstanta rešetke a) i od veličine i znaka interakcije između molekula.

U slučaju da je $W<0$ efektivna masa je pozitivna i na jeziku klasične optike imamo tkz. pozitivnu disperziju na kristalu. Ako je W veće od nule efektivna masa je negativna i to odgovara klasičnom slučaju negativne disperzije. Grafički se zakon disperzije za eksitone može predstaviti na sledeći način :



Sl. 2

Glava II

PRIMESNI MOLEKUL U IDEALNOJ STRUKTURI

II 1 Hamiltonijan sistema sa primesom

Ako na mesto $\vec{l}$ u idealnoj strukturi ubacimo primesu stanje sistema se menja i polazimo od hamiltonijana u reprezentaciji druge kvantizacije koji glasi :

$$H=\sum_{\nu}\mathcal{E}_{\vec{l}\nu}b^{+}_{\vec{l}\nu}b_{\vec{l}\nu}+\sum_{\substack{\vec{n}\lambda\\ \vec{n}\neq\vec{l}}}E_{\vec{n}\lambda}a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}+\frac{1}{2}\sum_{\nu_1\lambda_2\lambda_3\nu_4}\widetilde{W}(\nu_1,\lambda_2,\lambda_3,\nu_4)b^{+}_{\vec{l}\nu_1}b_{\vec{l}\nu_4}(a^{+}_{\vec{l}+1,\lambda_2}a_{\vec{l}+1,\lambda_3}+$$

$$+a^{+}_{\vec{l}-1,\lambda_2}a_{\vec{l}-1,\lambda_3})+\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4\\ \vec{n}\neq\vec{l},\vec{l}+1,\vec{l}-1}}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{n}\lambda_1}a_{\vec{n}\lambda_4}(a^{+}_{\vec{n}+1,\lambda_2}a_{\vec{n}+1,\lambda_3}+a^{+}_{\vec{n}-1,\lambda_2}a_{\vec{n}-1,\lambda_3})+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{l}+1,\lambda_1}a_{\vec{l}+1,\lambda_4}a^{+}_{\vec{l}+2,\lambda_2}a_{\vec{l}+2,\lambda_3}+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\nu_2\nu_3\lambda_4}\widetilde{W}(\lambda_1,\nu_2,\nu_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{l}+1,\lambda_1}a_{\vec{l}+1,\lambda_4}b^{+}_{\vec{l}\nu_2}b_{\vec{l}\nu_3}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\nu_2\nu_3\lambda_4}\widetilde{W}(\lambda_1,\nu_2,\nu_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{l}-1,\lambda_1}a_{\vec{l}-1,\lambda_4}b^{+}_{\vec{l}\nu_2}b_{\vec{l}\nu_3}+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{l}-1,\lambda_1}a_{\vec{l}-1,\lambda_4}a^{+}_{\vec{l}-2,\lambda_2}a_{\vec{l}-2,\lambda_3}\quad\ldots\quad \text{II } 1.1.$$

gde $\vec{l}$ označava čvor rešetke u koji je ubačen primesni molekul, ν_1,ν_2,ν_3,ν_4 predstavljaju skupove kvantnih brojeva koji karakterišu stanje elektrona molekula primese, $\widetilde{W}$ je matrični element operatora dipol-dipolne interakcije između molekula matrice i primese, $\mathcal{E}_{\vec{l}\nu}$ su energije elektrona molekula primese u stanju ν.

Hamiltonijan sistema se sastoji iz dva dela :

$$H=H^{(1)}+H^{(2)}\quad\ldots\ldots\ldots\ldots\quad \text{II } 1.2.$$

pri čemu je :

$$H^{(1)}=H^{(1)}_{id}+H^{(1)}_{int}\quad\ldots\ldots\ldots\ldots\quad \text{II } 1.3.$$

$$H^{(2)}=H^{(2)}_{id}+H^{(2)}_{int}\quad\ldots\ldots\ldots\ldots\quad \text{II } 1.4.$$

$$H^{(1)}=\sum_{\vec{n}\lambda}E_{\vec{n}\lambda}a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}+\sum_{\nu}\mathcal{E}_{\vec{l}\nu}b^{+}_{\vec{l}\nu}b_{\vec{l}\nu}-\sum_{\lambda}E_{\vec{l}\lambda}a^{+}_{\vec{l}\lambda}a_{\vec{l}\lambda}\quad\ldots\ldots\ldots\quad \text{II } 1.5.$$

$$H^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{n}\lambda_1}a_{\vec{n}\lambda_4}(a^{+}_{\vec{n}+1,\lambda_2}a_{\vec{n}+1,\lambda_3}+a^{+}_{\vec{n}-1,\lambda_2}a_{\vec{n}-1,\lambda_3})+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\nu_1\lambda_2\lambda_3\nu_4}\widetilde{W}(\nu_1,\lambda_2,\lambda_3,\nu_4)b^+_{\vec{l}\nu_1}b_{\vec{l}\nu_4}(a^+_{\vec{l}+1,\lambda_2}a_{\vec{l}+1,\lambda_3}+a^+_{\vec{l}-1,\lambda_2}a_{\vec{l}-1,\lambda_3})+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}+1,\lambda_1}a_{\vec{l}+1,\lambda_4}a^+_{\vec{l}+2,\lambda_2}a_{\vec{l}+2,\lambda_3}+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\nu_2\nu_3\lambda_4}\widetilde{W}(\lambda_1,\nu_2,\nu_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}+1,\lambda_1}a_{\vec{l}+1,\lambda_4}b^+_{\vec{l}\nu_2}b_{\vec{l}\nu_3}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\nu_2\nu_3\lambda_4}\widetilde{W}(\lambda_1,\nu_2,\nu_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}-1,\lambda_1}a_{\vec{l}-1,\lambda_4}b^+_{\vec{l}\nu_2}b_{\vec{l}\nu_3}+\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}-1,\lambda_1}a_{\vec{l}-1,\lambda_4}a^+_{\vec{l}-2,\lambda_2}a_{\vec{l}-2,\lambda_3}-$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}\lambda_1}a_{\vec{l}\lambda_4}(a^+_{\vec{l}+1,\lambda_2}a_{\vec{l}+1,\lambda_3}+a^+_{\vec{l}-1,\lambda_2}a_{\vec{l}-1,\lambda_3}-\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}-1,\lambda_1}a_{\vec{l}-1,\lambda_4}(a^+_{\vec{l}\lambda_2}a_{\vec{l}\lambda_3}+$$

$$+a^+_{\vec{l}-2,\lambda_2}a_{\vec{l}-2,\lambda_3})-\frac{1}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}W(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)a^+_{\vec{l}+1,\lambda_1}a_{\vec{l}+1,\lambda_4}(a^+_{\vec{l}+2,\lambda_2}a_{\vec{l}+2,\lambda_3}+a^+_{\vec{l}\lambda_2}a_{\vec{l}\lambda_3}) \quad \ldots\ldots\ \underline{II}\ 1.6.$$

Iz matematičkih, a više iz fizičkih razloga umesto elektronskih operatora $b^+_{\vec{l}}$ i $b_{\vec{l}}$ zgodnije je uvesti kvazičestične operatore $Q^+_{\vec{l}}$ i $Q_{\vec{l}}$ koji se definišu na sledeći način :

$$Q^+_{\vec{l}}=b^+_{\vec{l}g}b_{\vec{l}0} \qquad Q_{\vec{l}}=b_{\vec{l}0}b_{\vec{l}g} \quad \ldots\ldots\ \underline{II}\ 1.7.$$

Prema gornjoj definiciji operator $Q^+_{\vec{l}}$ opisuje proces u kome je nestao jedan elektron u osnovnom stanju (0), a stvorio se u pobuđenom stanju g. Prema tome operator $Q^+_{\vec{l}}$ kreira kvant pobuđenja sa energijom $\mathcal{E}_{\vec{l}g}-\mathcal{E}_{\vec{l}0}$. Operator $Q_{\vec{l}}$ opisuje proces u kome je iščezao elektron u pobuđenom stanju g, a stvorio se u osnovnom stanju (0). Prema tome operator $Q_{\vec{l}}$ uništava (anihilira) kvant pobuđenja sa energijom $\mathcal{E}_{\vec{l}g}-\mathcal{E}_{\vec{l}0}$.

Operatori $Q_{\vec{l}}$ i $Q^+_{\vec{l}}$ nemaju fermionske komutacione relacije a ni bozonske i sa statističke tačke gledišta predstavljaju sredinu između 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 0 i g onda zbog Paulijevog principa za svaki čvor rešetke kompletan fermionski prostor izgleda ovako :

$$|0_o\,0_g\rangle \quad |1_o\,1_g\rangle \qquad \ldots\ldots\ldots\ II\ 1.8.$$

$$|1_o\,0_g\rangle \quad |0_o\,1_g\rangle \qquad \ldots\ldots\ldots\ II\ 1.9.$$

Sobzirom na definiciju Pauli operatora (II 1.7) lako se vidi da su oni identički ravni nuli u podprostoru (II 1.8.) što znači da ovaj podprostor ne može uticati na fizičke karakteristike sistema pa ga isključujemo iz daljih razmatranja. U podprostoru (II 1.9.) 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 (II 1.8.) opravdano. Takođe je očigledno da u podprostoru (II 1.9.) važi uslov:

$$b^+_{\vec{\ell}g}\, b_{\vec{\ell}g} + b^+_{\vec{\ell}o}\, b_{\vec{\ell}o} = 1 \qquad \ldots\ldots\ldots\ II\ 1.10$$

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

$$\{b_{\vec{\ell}g}, b^+_{\vec{n}g'}\} = \delta_{\vec{\ell}\vec{n}}\,\delta_{gg'}\ ;\quad b^+_{\vec{\ell}g}\, b_{\vec{\ell}g} = 0 \text{ ili } 1$$

$$b^{+2}_{\vec{\ell}g} = b^{2}_{\vec{\ell}g} = 0\ ;\ \{b_{\vec{\ell}g}, b_{\vec{n}g'}\} = \{b^+_{\vec{n}g}, b^+_{\vec{n}g'}\} = 0 \qquad \ldots\ldots II\ 1.11.$$

Nije teško pokazati da operatori Q^+ i Q zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[Q_{\vec{\ell}}, Q^+_{\vec{n}}] = (1 - 2Q^+_{\vec{\ell}} Q_{\vec{\ell}})\,\delta_{\vec{\ell}\vec{n}} \qquad Q^{+2}_{\vec{\ell}} = Q^2_{\vec{\ell}} = 0$$

$$[Q^+_{\vec{\ell}}, Q^+_{\vec{n}}] = [Q_{\vec{\ell}}, Q_{\vec{n}}] = 0 \quad \text{za } \vec{\ell} \neq \vec{n} \qquad Q^+_{\vec{\ell}} Q_{\vec{\ell}} = b^+_{\vec{\ell}g}\, b_{\vec{\ell}g} = 0 \text{ ili } 1 \qquad \ldots\ldots II\ 1.12.$$

	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4
I	0	0	0	0
II	g	g	0	0
III	0	0	g	g
IV	g	0	0	g
V	0	g	g	0
VI	g	0	g	0
VII	0	g	0	g
VIII	g	g	g	g

Šema 2.

Razvijajući hamiltonijan (II 1.5) i (II 1.6.) po šemama 1 i 2 i koristeći relacije II 1.10. i II 1.12. dolazimo do kompletnog hamiltonijana (II 1.2) izraženog u kvazičestičnim Pauli operatorima

$$
\begin{aligned}
H =& \sum_{\vec n} (E_f - E_0) P^+_{\vec n} P_{\vec n} + N E_0 + (\mathcal{E}_{\vec l g} - \mathcal{E}_{\vec l o}) Q^+_{\vec l} Q_{\vec l} - (E_{\vec l f} - E_{\vec l o}) P^+_{\vec l} P_{\vec l} + (\mathcal{E}_{\vec l o} - \mathcal{E}_{\vec l o}) + \\
&+ \sum_{\vec n} W(0,0,0,0) + \sum_{\vec n} \{ W(f,0,0,f) - W(0,0,0,0) \} P^+_{\vec n} P_{\vec n} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,f,f,0) - W(0,0,0,0) \} P^+_{\vec n+1} P_{\vec n+1} + \\
&+ \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,f,f,0) - W(0,0,0,0) \} P^+_{\vec n-1} P_{\vec n-1} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(f,0,f,0) \} P^+_{\vec n} P_{\vec n+1} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(f,0,f,0) \} P^+_{\vec n} P_{\vec n-1} + \\
&+ \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,f,0,f) \} P^+_{\vec n+1} P_{\vec n} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,f,0,f) \} P^+_{\vec n-1} P_{\vec n} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(f,f,0,0) \} P^+_{\vec n} P^+_{\vec n+1} + \\
&+ \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(f,f,0,0) \} P^+_{\vec n} P^+_{\vec n-1} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,0,f,f) \} P_{\vec n} P_{\vec n+1} + \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,0,f,f) \} P_{\vec n} P_{\vec n-1} + \\
&+ \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,0,0,0) + W(f,f,f,f) - W(f,0,0,f) - W(0,f,f,0) \} P^+_{\vec n} P_{\vec n} P^+_{\vec n+1} P_{\vec n+1} + \\
&+ \sum_{\vec n} \tfrac{1}{2} \{ W(0,0,0,0) + W(f,f,f,f) - W(f,0,0,f) - W(0,f,f,0) \} P^+_{\vec n} P_{\vec n} P^+_{\vec n-1} P_{\vec n-1} + \\
&+ 2 \{ \tilde W(0,0,0,0) - W(0,0,0,0) \} + \{ \tilde W(g,0,0,g) + \tilde W(0,g,g,0) - 2 \tilde W(0,0,0,0) \} Q^+_{\vec l} Q_{\vec l} + \\
&+ \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(g,0,f,0) + \tilde W(0,g,0,f) \} Q^+_{\vec l} P_{\vec l+1} + \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(g,0,f,0) + \tilde W(0,g,0,f) \} Q^+_{\vec l} P_{\vec l-1} + \\
&+ \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(0,f,0,g) + \tilde W(f,0,g,0) \} Q_{\vec l} P^+_{\vec l+1} + \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(0,f,0,g) + \tilde W(f,0,g,0) \} Q_{\vec l} P^+_{\vec l-1} + \\
&+ \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(0,0,f,g) + \tilde W(0,0,g,f) \} Q_{\vec l} P_{\vec l+1} + \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(0,0,f,g) + \tilde W(0,0,g,f) \} Q_{\vec l} P_{\vec l-1} + \\
&+ \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(0,f,f,0) + \tilde W(f,0,0,f) + 2W(0,0,0,0) - W(0,f,f,0) - W(f,0,0,f) - 2\tilde W(0,0,0,0) \} P^+_{\vec l+1} P_{\vec l+1} + \\
&+ \tfrac{1}{2} \{ \tilde W(0,f,f,0) + \tilde W(f,0,0,f) + 2W(0,0,0,0) - W(0,f,f,0) - W(f,0,0,f) - 2\tilde W(0,0,0,0) \} P^+_{\vec l-1} P_{\vec l-1} +
\end{aligned}
$$

$$+\frac{1}{2}\{\tilde{W}(g,f,0,0)+\tilde{W}(f,g,0,0)\}Q^+_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}+1}+\frac{1}{2}\{\tilde{W}(g,f,0,0)+\tilde{W}(f,g,0,0)\}Q^+_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}-1}+$$

$$+\frac{1}{2}\{2\tilde{W}(0,0,0,0)+\tilde{W}(g,f,f,g)+\tilde{W}(f,g,g,f)-\tilde{W}(0,f,f,0)-\tilde{W}(f,0,0,f)-\tilde{W}(g,0,0,g)-\tilde{W}(0,g,g,0)\}Q^+_{\vec{l}}Q_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}+1}P_{\vec{l}+1}+$$

$$+\frac{1}{2}\{2\tilde{W}(0,0,0,0)+\tilde{W}(g,f,f,g)+\tilde{W}(f,g,g,f)-\tilde{W}(0,f,f,0)-\tilde{W}(f,0,0,f)-\tilde{W}(g,0,0,g)-\tilde{W}(0,g,g,0)\}Q^+_{\vec{l}}Q_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}-1}P_{\vec{l}-1}+$$

$$+\{2W(0,0,0,0)-W(f,0,0,f)-W(0,f,f,0)\}P^+_{\vec{l}}P_{\vec{l}}-\{W(0,0,f,f)\}P_{\vec{l}}P_{\vec{l}+1}-\{W(0,0,f,f)\}P_{\vec{l}}P_{\vec{l}-1}-$$

$$-\frac{1}{2}\{W(f,0,f,0)+W(0,f,0,f)\}P^+_{\vec{l}}P_{\vec{l}+1}-\frac{1}{2}\{W(f,0,f,0)+W(0,f,0,f)\}P^+_{\vec{l}}P_{\vec{l}-1}-\frac{1}{2}\{W(0,f,0,f)+W(f,0,f,0)\}P_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}+1}-$$

$$-\frac{1}{2}\{W(0,f,0,f)+W(f,0,f,0)\}P_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}-1}-\{W(f,f,0,0)\}P^+_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}+1}-\{W(f,f,0,0)\}P^+_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}-1}+$$

$$+\{W(f,0,0,f)+W(0,f,f,0)-W(0,0,0,0)-W(f,f,f,f)\}P^+_{\vec{l}}P_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}+1}P_{\vec{l}+1}+$$

$$+\{W(f,0,0,f)+W(0,f,f,0)-W(0,0,0,0)-W(f,f,f,f)\}P^+_{\vec{l}}P_{\vec{l}}P^+_{\vec{l}-1}P_{\vec{l}-1} \quad \ldots\ldots\ldots \quad II\ 1.13.$$

Da bi smo izvršili dalju analizu hamiltonijana (II 1.13.) dalji račun ćemo izvesti u aproksimaciji približno druge kvantizacije. Metod približno druge kvantizacije, koja nam daje eksitonski spektar u harmonijskoj aproksimaciji, sastoji se u tome da se Pauli operatori iz (II 1.13.) zamene Boze operatorima B^+ i B, A^+ i A po približnim formulama:

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

$$Q^+_{\vec{l}} \cong A^+_{\vec{l}} \qquad Q_{\vec{l}} \cong A_{\vec{l}} \qquad Q^+_{\vec{l}}Q_{\vec{l}} \cong A^+_{\vec{l}}A_{\vec{l}} \quad \ldots\ldots \quad II\ 1.14.$$

Osim toga da bismo uprostili račun zanemarićemo efekt neodržanja eksitona što znači da ćemo iz kvadratnog dela hamiltonijana odbaciti članove koji su proporcionalni B^+B^+, A^+A^+, BB i AA. Posle ovih aproksimacija efektivni hamiltonijan glasi:

$$H^{pdk}_{eff} = H_{id} + H_{int}$$

$$H_{eff}^{pdk} = \sum_{\vec{n}} [\mathcal{E} + W(f,o,o,f) - W(o,o,o,o)] B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} W(f,o,f,o) B_{\vec{n}} (B_{\vec{n}+1} + B_{\vec{n}-1}) -$$

$$- \mathcal{E} B_{\vec{\ell}}^{+} B_{\vec{\ell}} + [\eta + \tilde{W}(g,o,o,g) + \tilde{W}(o,g,g,o) - 2\tilde{W}(o,o,o,o)] A_{\vec{\ell}}^{+} A_{\vec{\ell}} + \tilde{W}(g,o,f,o) A_{\vec{\ell}}^{+} (B_{\vec{\ell}+1} + B_{\vec{\ell}-1}) +$$

$$+ \tilde{W}(o,g,o,f) A_{\vec{\ell}} (B_{\vec{\ell}+1}^{+} + B_{\vec{\ell}-1}^{+}) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad II\ 1.15.$$

gde su uvedene oznake : $E_f - E_o = \mathcal{E}$

$$\mathcal{E}_{\vec{\ell}g} - \mathcal{E}_{\vec{\ell}o} = \eta$$

Ako izvršimo Furije transformaciju Boze operatora :

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} B_{\vec{k}} ; \quad B_{\vec{n}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} \cdot B_{\vec{k}}^{+} , \text{ uz } \sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{n}} = N \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}$$

$$B_{\vec{\ell}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}\vec{k}} ; \quad B_{\vec{\ell}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} B_{\vec{q}}^{+} e^{-i\vec{\ell}\vec{q}}$$

$$A_{\vec{\ell}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}\vec{k}} ; \quad A_{\vec{\ell}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} A_{\vec{q}}^{+} e^{-i\vec{\ell}\vec{q}}$$

$$B_{\vec{\ell}+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i(\vec{\ell}+1)\vec{k}} ; \quad B_{\vec{\ell}+1}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} B_{\vec{q}}^{+} e^{-i(\vec{\ell}+1)\vec{q}}$$

$$B_{\vec{\ell}-1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{\ell}-1)\vec{k}} B_{\vec{k}} ; \quad B_{\vec{\ell}-1}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} B_{\vec{q}}^{+} e^{-i(\vec{\ell}-1)\vec{q}}$$

---

gde su $\vec{k}$ i $\vec{q}$ – talasni vektori

nalazimo da je hamiltonijan našeg sistema u impulsnom prostoru:

$$H_{eff}^{pdk} = \sum_{\vec{k}} \{\Delta + W(\vec{k})\} B_{\vec{k}}^{+} B_{\vec{k}} - \frac{\mathcal{E}}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} B_{\vec{q}}^{+} B_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}-\vec{q})} +$$

$$+ \frac{\Delta'}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} A_{\vec{q}}^{+} A_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}-\vec{q})} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \tilde{W}(\vec{k}) A_{\vec{q}}^{+} B_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}-\vec{q})} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \tilde{W}(\vec{q}) B_{\vec{q}}^{+} A_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}-\vec{q})} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad II\ 1.16$$

gde su uvedene oznake :

$$\mathcal{E} + W(f,0,0,f) - W(0,0,0,0) = \Delta$$

$$\eta + \tilde{W}(g,0,0,g) + \tilde{W}(0,g,g,0) - 2\tilde{W}(0,0,0,0) = \Delta'$$

$$2\tilde{W}(g,0,f,0)\cos a\vec{k} = \tilde{W}(\vec{k})$$

$$2\tilde{W}(0,g,0,f)\cos a\vec{q} = \tilde{W}(\vec{q})$$

II 2 Jednačine za funkcije Grina

Da bi smo ispitali energije eksitona za proste jednodimenzione kubne strukture uvodimo metod funkcije Grina. Na osnovu opšte teorije o jednačinama za funkciju Grina polazimo od sledećeg sistema jednačina :

$$E \langle\langle B_{\vec{\alpha}} | B^{+}_{\vec{\alpha}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} + \langle\langle [B_{\vec{\alpha}}, H] | B^{+}_{\vec{\alpha}} \rangle\rangle \quad \ldots\ldots \text{II } 2.1.$$

$$E \langle\langle A_{\vec{k}} | B^{+}_{\vec{\alpha}} \rangle\rangle = \langle\langle [A_{\vec{k}}, H] | B^{+}_{\vec{\alpha}} \rangle\rangle \quad \ldots\ldots \text{II } 2.2.$$

Sledeći korak je da nađemo komutatore: $[B_{\vec{\alpha}}, H], [A_{\vec{k}}, H]$ operatora $B_{\vec{\alpha}}, A_{\vec{k}}$ sa hamiltonijanom sistema (II 1.16.) koji ima oblik :

$$H = \sum_{\vec{k}'} \{\Delta + W(\vec{k}')\} B^{+}_{\vec{k}'} B_{\vec{k}'} - \frac{\varepsilon}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{k}'} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} +$$

$$+ \frac{\Delta'}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} A^{+}_{\vec{q}} A_{\vec{k}'} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} \tilde{W}(\vec{k}') A^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{k}'} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} \tilde{W}(\vec{q}) B^{+}_{\vec{q}} A_{\vec{k}'} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \text{II } 2.3.$$

$$[B_{\vec{\alpha}}, H] = \sum_{\vec{k}'} \{\Delta + W(\vec{k}')\} [B_{\vec{\alpha}}, B^{+}_{\vec{k}'} B_{\vec{k}'}] - \frac{\varepsilon}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} [B_{\vec{\alpha}}, B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{k}'}] +$$

$$+ \frac{\Delta'}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} [B_{\vec{\alpha}}, A^{+}_{\vec{q}} A_{\vec{k}'}] + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} \tilde{W}(\vec{k}') e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} [B_{\vec{\alpha}}, A^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{k}'}] +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} \tilde{W}(\vec{q}) e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} [B_{\vec{\alpha}}, B^{+}_{\vec{q}} A_{\vec{k}'}] \quad \ldots\ldots\ldots \text{II } 2.4.$$

$$[A_{\vec{k}}, H] = \sum_{\vec{k}'} \{\Delta + W(\vec{k}')\} [A_{\vec{k}}, B^{+}_{\vec{k}'} B_{\vec{k}'}] - \frac{\varepsilon}{N} \sum_{\vec{k}'\vec{q}} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})} [A_{\vec{k}}, B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{k}'}] +$$

$$+\frac{\Delta'}{N}\sum_{\vec{k}'\vec{q}} e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})}[A_{\vec{k}}, A^+_{\vec{q}}A_{\vec{k}'}] + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}'\vec{q}} \widetilde{W}(\vec{k}')e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})}[A_{\vec{k}}, A^+_{\vec{q}}B_{\vec{k}'}] +$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}'\vec{q}} \widetilde{W}(\vec{k})e^{i\vec{l}(\vec{k}'-\vec{q})}[A_{\vec{k}}, B^+_{\vec{q}}A_{\vec{k}'}] \qquad \dots\dots\dots\dots\dots \text{II } 2.5.$$

Na osnovu komutacionih relacija :

$$[B_{\vec{\alpha}}, B^+_{\vec{k}'}B_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{\alpha}\vec{k}'}B_{\vec{k}'}$$

$$[B_{\vec{\alpha}}, B^+_{\vec{q}}B_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{\alpha}\vec{q}}B_{\vec{k}'}$$

$$\left.\begin{array}{l}[B_{\vec{\alpha}}, A^+_{\vec{q}}A_{\vec{k}'}] = 0 \\ \\ [B_{\vec{\alpha}}, A^+_{\vec{q}}B_{\vec{k}'}] = 0\end{array}\right\} \text{Operatori } A \text{ i } B \text{ komutiraju}$$

$$[B_{\vec{\alpha}}, B^+_{\vec{q}}A_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{\alpha}\vec{q}}A_{\vec{k}'} \qquad \dots\dots \text{II } 2.6$$

$$[A_{\vec{k}}, B^+_{\vec{k}'}B_{\vec{k}'}] = 0$$

$$[A_{\vec{k}}, B^+_{\vec{q}}B_{\vec{k}'}] = 0$$

$$[A_{\vec{k}}, A^+_{\vec{q}}A_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k}\vec{q}}A_{\vec{k}'}$$

$$[A_{\vec{k}}, A^+_{\vec{q}}B'_{\vec{k}}] = \delta_{\vec{k}\vec{q}}B_{\vec{k}'}$$

$$[A_{\vec{k}}, B^+_{\vec{q}}A_{\vec{k}'}] = 0 \qquad \dots\dots\dots\dots \text{II } 2.7.$$

i uloge Kronekerovog simbola zamenom u (II 2.4.) i (II 2.5.) dobijamo :

$$[B_{\vec{\alpha}}, H] = \{\Delta + W(\vec{\alpha})\} B_{\vec{\alpha}} - \frac{\varepsilon}{N} \sum_{\vec{k}'} B_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{\alpha})} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} \tilde{W}(\vec{\alpha}) A_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{\alpha})} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \text{II } 2.8.$$

$$[A_{\vec{k}}, H] = \frac{\Delta'}{N} \sum_{\vec{k}'} A_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{k})} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} B_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{k})} \quad \ldots\ldots \text{II } 2.9.$$

Pošto smo našli komutacione relacije $[B_{\alpha}, H]$ i $[A_{\vec{k}}, H]$ sistem jednačina za funkcije Grina glasi :

$$[E - \Delta - W(\vec{\alpha})] G(\vec{\alpha}) = \frac{i}{2\pi} - \frac{\varepsilon}{N} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{\alpha})} G(\vec{k}') + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} \tilde{W}(\vec{\alpha}) e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{\alpha})} D(\vec{k}') \quad \text{II } 2.10.$$

$$E D(\vec{k}) = \frac{\Delta'}{N} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{k})} D(\vec{k}') + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} \tilde{W}(\vec{k}') e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{k})} G(\vec{k}') \quad \ldots\ldots \text{II } 2.11.$$

gde su uvedene funkcije definisane na sledeći način :

$$G(\vec{\alpha}) = \langle\langle B_{\vec{\alpha}} | B_{\alpha}^{+} \rangle\rangle \qquad D(\vec{k}) = \langle\langle A_{\vec{k}} | B_{\vec{\alpha}} \rangle\rangle$$

$$G(\vec{k}') = \langle\langle B_{\vec{k}'} | B_{\vec{\alpha}}^{+} \rangle\rangle \qquad D(\vec{k}') = \langle\langle A_{\vec{k}'} | B_{\vec{\alpha}}^{+} \rangle\rangle \quad \ldots \text{II } 2.12.$$

$$D(\vec{k}') = \langle\langle A_{\vec{k}'} | B_{\vec{\alpha}}^{+} \rangle\rangle \qquad G(\vec{k}') = \langle\langle B_{\vec{k}'} | B_{\alpha}^{+} \rangle\rangle$$

Ako pređemo sa $\vec{k}'$ na $\vec{k}$ jednačine II 2.10 i II 2.11 glase :

$$[E - \Delta - W(\vec{\alpha})] G(\alpha) = \frac{i}{2\pi} - \frac{\varepsilon}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}-\vec{\alpha})} G(\vec{k}) + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \tilde{W}(\vec{\alpha}) e^{i\vec{\ell}(\vec{k}-\vec{\alpha})} D(\vec{k}) \quad \ldots \text{II } 2.13.$$

$$E D(\vec{k}) = \frac{\Delta'}{N} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{k})} D(\vec{k}') + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} \tilde{W}(\vec{k}') e^{i\vec{\ell}(\vec{k}'-\vec{k})} G(\vec{k}') \quad \ldots\ldots \text{II } 2.14.$$

Primenom Ojlerove formule i adicionih teorema posle izvesnih transformacija jednačine II 2.13. i II 2.14. glase :

$$[E-\Delta-W(\vec{\lambda})]G(\vec{\lambda})=\frac{i}{2\pi}+C_1\cos\vec{l}\vec{\lambda}+C_2\sin\vec{l}\vec{\lambda}+\tilde{W}(\vec{\lambda})(C_3\cos\vec{l}\vec{\lambda}-C_4\sin\vec{l}\vec{\lambda}) \quad \ldots\text{II } 2.15$$

$$ED(\vec{k})=C_1\cos\vec{l}\vec{k}-C_2\sin\vec{l}\vec{k}+C_3\cos\vec{l}\vec{k}-C_4\sin\vec{l}\vec{k} \quad \ldots\ldots\text{II } 2.16.$$

gde su uvedene konstante :

$$C_1=-\frac{\varepsilon}{N}\sum_{\vec{k}}G(\vec{k})e^{i\vec{l}\vec{k}} \qquad C_2=\frac{\varepsilon}{N}\sum_{\vec{k}}iG(\vec{k})e^{i\vec{l}\vec{k}}$$

$$C_3=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}D(\vec{k})e^{i\vec{l}\vec{k}} \qquad C_4=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}iD(\vec{k})e^{i\vec{l}\vec{k}} \quad \ldots\ldots\text{II } 2.17.$$

$$C_1=\frac{\Delta'}{N}\sum_{\vec{k}'}D(\vec{k}')e^{i\vec{l}\vec{k}'} \qquad C_2=\frac{\Delta'}{N}\sum_{\vec{k}'}iD(\vec{k}')e^{i\vec{l}\vec{k}'}$$

$$C_3=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}'}\tilde{W}(\vec{k}')G(\vec{k}')e^{i\vec{l}\vec{k}'} \qquad C_4=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}'}i\tilde{W}(\vec{k}')G(\vec{k}')e^{i\vec{l}\vec{k}'} \quad \ldots\text{II } 2.18.$$

Konstante C_1 i C_3 koje imaju oblik II 2.18. u aproksimaciji $\vec{l}=0$ glase : $C_1=\frac{\Delta'}{N}\sum_{\vec{k}'}D(\vec{k}')$, $C_3=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}'}\tilde{W}(\vec{k}')G(\vec{k}')$ i ako u jednačini II 2.16. pređemo sa $\vec{k}\to\vec{\lambda}$

jednačine za funkcije Grina glase :

$$[E-(\Delta+W(\vec{\lambda}))]G(\vec{\lambda})=\frac{i}{2\pi}+C_1+\tilde{W}(\vec{\lambda})C_3 \quad \ldots\ldots\ldots\text{II } 2.19$$

$$ED(\vec{\lambda})=C_1+C_3 \quad \ldots\ldots\ldots\text{II } 2.20.$$

Rešavajući jednačine (II 2.19.) i (II 2.20.) po $G(\vec{\lambda})$ i $D(\vec{\lambda})$ dobijamo :

$$G(\vec{\lambda})=\frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-\varphi(\vec{\lambda})}+\frac{1}{E-\varphi(\vec{\lambda})}C_1+\frac{\tilde{W}(\vec{\lambda})}{E-\varphi(\vec{\lambda})}C_3 \qquad \Big/\cdot\frac{1}{N}\tilde{W}(\vec{\lambda})\sum_{\vec{\lambda}} \quad \ldots\text{II } 2.21.$$

$$D(\vec{\lambda})=\frac{C_1}{E}+\frac{C_3}{E} \qquad \Big/\cdot\frac{\Delta'}{N}\sum \quad \ldots\ldots\text{II } 2.22.$$

gde je uvedena oznaka : $\Delta + W(\vec{\alpha}) = \varphi(\vec{\alpha})$

Da bismo formirali sistem jednačina po konstantama C_1 i C_3 jednačinu (II 2.21.) množimo sa $\frac{1}{N}\tilde{W}(\vec{\alpha})$ i sumiramo po $\vec{\alpha}$ a jednačinu (II 2.22.) množimo sa $\frac{\Delta'}{N}$ i sumiramo takođe po $\vec{\alpha}$. Nakon kraćeg sređivanja dobijamo :

$$\left(1-\frac{\Delta'}{E}\right)C_1 - \frac{\Delta'}{E}C_3 = 0$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\alpha}}\frac{\tilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})}C_1 + \left(1-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\alpha}}\frac{\tilde{W}^2(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})}\right)C_3 = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_{\vec{\alpha}}\frac{\tilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} \qquad \text{II } 2.23.$$

Dobili smo nehomogeni sistem algebarskih jednačina po konstantama C_1 i C_3 čija su rešenja :

$$C_1 = \frac{D_1}{D} \quad , \quad C_3 = \frac{D_2}{D}$$

gde su uvedene oznake :

$$D = \begin{vmatrix} 1-\dfrac{\Delta'}{E} & -\dfrac{\Delta'}{E} \\ -\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\vec{\alpha}}\dfrac{\tilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} & 1-\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\vec{\alpha}}\dfrac{\tilde{W}^2(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} \end{vmatrix}$$

$$D_1 = \begin{vmatrix} 0 & -\dfrac{\Delta'}{E} \\ \dfrac{i}{2\pi}\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\vec{\alpha}}\dfrac{\widetilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} & 1-\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\vec{\alpha}}\dfrac{\widetilde{W}^2(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} \end{vmatrix}$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} 1-\dfrac{\Delta'}{E} & 0 \\ -\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\vec{\alpha}}\dfrac{\widetilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} & \dfrac{i}{2\pi}\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\vec{\alpha}}\dfrac{\widetilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} \end{vmatrix}$$

Jednačine II 2.21. i II 2.22. postaju

$$G(\vec{\alpha}) = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-\varphi(\vec{\alpha})} + \frac{D_1}{D}\frac{1}{E-\varphi(\vec{\alpha})} + \frac{D_2}{D}\frac{\widetilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} \quad \ldots\ldots \quad \text{II } 2.25.$$

$$D(\vec{\alpha}) = \frac{1}{E}\frac{D_1}{D} + \frac{1}{E}\frac{D_2}{D} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad \text{II } 2.26.$$

Tačke u kojima Grinova funkcija postaje beskonačna određuju pol

Grinove funkcije. Pored standardnog pola koji znamo odrediti $(E=\varphi(\vec{\alpha}))$ postoji i dopunski pol Grinove funkcije (II 2.25.) koji se određuje iz uslova $D=0$

$$D = \begin{vmatrix} 1-\frac{\Delta'}{E} & -\frac{\Delta'}{E} \\ -\frac{1}{N}\sum_{\vec{\alpha}}\frac{\widetilde{W}(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} & 1-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\alpha}}\frac{\widetilde{W}^2(\vec{\alpha})}{E-\varphi(\vec{\alpha})} \end{vmatrix} = 0 \qquad \ldots\ \text{II } 2.27.$$

II 3. Zakon disperzije za dopunske ekscitacije

Da bi smo našli zakon disperzije za dopunske ekscitacije eksitona polazimo od uslova (II 2.27) koji glasi:

$$D = \begin{vmatrix} 1-\frac{\Delta'}{E} & -\frac{\Delta'}{E} \\ -\frac{1}{N}\sum_{\vec{\lambda}}\frac{\tilde{W}(\vec{\lambda})}{E-\varphi(\vec{\lambda})} & 1-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\lambda}}\frac{\tilde{W}^2(\vec{\lambda})}{E-\varphi(\vec{\lambda})} \end{vmatrix} = 0$$

gde je: $\tilde{W}(\vec{\lambda}) = 2\tilde{W}\cos a\vec{\lambda}$

$\varphi(\vec{\lambda}) = \Delta + W(\vec{\lambda}) = \Delta + 2W\cos a\vec{\lambda}$

Ako sa naznačenih suma pređemo na integrale po formulama:

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{\lambda}}\frac{\tilde{W}(\vec{\lambda})}{E-\varphi(\vec{\lambda})} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{2\tilde{W}\cos x\,dx}{\eta-\cos x} \quad \dots\dots\dots \quad \text{II } 3.1.$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{\lambda}}\frac{\tilde{W}^2(\vec{\lambda})}{E-\varphi(\vec{\lambda})} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{4\tilde{W}^2\cos^2 x\,dx}{\eta-\cos x} \quad \dots\dots\dots \quad \text{II } 3.2.$$

pri čemu smo uveli smene: $a\lambda = x$

$$\eta = \frac{E-\Delta}{2W} \gg 1$$

Tada uslov II 2.27. glasi :

$$D = \begin{vmatrix} 1-\dfrac{\Delta'}{E} & -\dfrac{\Delta'}{E} \\ -\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\pi}^{\pi}\dfrac{2\tilde{W}\cos x\,dx}{\eta-\cos x} & 1-\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\pi}^{\pi}\dfrac{4\tilde{W}^2\cos^2 x\,dx}{\eta-\cos x} \end{vmatrix} = 0 \quad \ldots \text{II } 3.3.$$

Rešavajući integrale II 3.1. i II 3.2 uz aproksimaciju $\eta \gg 1$ za rešenje dobijamo :

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{2\tilde{W}\cos x\,dx}{\eta-\cos x} = \frac{\tilde{W}}{W}\left(\frac{\eta}{\sqrt{\eta^2-1}}-1\right) = 0$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{4\tilde{W}^2\cos^2 x\,dx}{\eta-\cos x} = \frac{2\tilde{W}^2}{W}\eta\left(\frac{\eta}{\sqrt{\eta^2-1}}-1\right) = 0$$

tako da uslov(II 3.3) glasi :

$$D = \begin{vmatrix} 1-\dfrac{\Delta'}{E} & -\dfrac{\Delta'}{E} \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 0 \quad \ldots\ldots \text{II } 3.4.$$

Rešavajući determinantu II 3.4. za rešenje energije eksitona dobijamo:

$$1-\frac{\Delta'}{E}=0$$

$$E=\Delta' \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ \text{II } 3.5.$$

Vidimo da je energija eksitona reda veličine energije pobuđenja molekula primese Δ'.

Ako izraz $\frac{1}{\sqrt{\eta^2-1}}$ transformišemo tako da je :

$$\frac{1}{\sqrt{\eta^2-1}}=\frac{1}{\eta}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{1}{\eta}}}\cong\frac{1}{\eta}\frac{1}{1-\frac{1}{2\eta^2}}\cong\frac{2\eta}{2\eta^2-1}$$

i ograničimo se na aproksimaciju $\eta\gg1$ za rešenje integrala II 3.1. i II 3.2. dobijamo :

$$\int_{-\pi}^{\pi}\frac{2W\cos x\,dx}{\eta-\cos x}=\frac{2\tilde{W}W}{(E-\Delta)^2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ \text{II } 3.6.$$

$$\int_{-\pi}^{\pi}\frac{4\tilde{W}^2\cos^2x\,dx}{\eta-\cos x}=\frac{2\tilde{W}^2}{E-\Delta} \qquad \ldots\ldots\ldots\ \text{II } 3.7.$$

gde je izvršena zamena : $\eta=\frac{E-\Delta}{2W}$. Nađena rešenja za gornje integrale zamenimo u uslov II 3.3. koji tada glasi :

$$D=\begin{vmatrix}\frac{E-\Delta'}{E} & -\frac{\Delta'}{E}\\ -\frac{2\tilde{W}W}{(E-\Delta)^2} & \frac{E-\Delta-\tilde{W}^2}{E-\Delta}\end{vmatrix}=0 \qquad \ldots\ \text{II } 3.8.$$

Rešavajući determinantu II 3.8. i izjednačavajući je sa nulom dobijamo:

$$\frac{E-\Delta'}{E}\cdot\frac{(E-\Delta-2\tilde{W}^2)}{E-\Delta} - \frac{\Delta'}{E}\cdot\frac{2\tilde{W}W}{(E-\Delta)^2} = 0 \qquad \Big/ \cdot E(E-\Delta)^2$$

$$E^3-(\Delta'+2\Delta+2\tilde{W}^2)E^2+(2\Delta\Delta'+\Delta^2+2\Delta'\tilde{W}^2+2\Delta\tilde{W}^2)E -$$

$$-(\Delta^2\Delta'+2\Delta\Delta'\tilde{W}^2+2\Delta'\tilde{W}W) = 0 \qquad \ldots\ldots\ \text{II } 3.9.$$

Dobili smo algebarsku jednačinu trećeg stepena po energiji eksitona E. Rešenja ćemo potražiti u obliku:

$$E = \Delta' + \mathcal{E} \quad , \mathcal{E} - \text{mala veličina} \qquad \ldots \text{II } 3.10.$$

Uz aproksimacije: $E^3=(\Delta+\mathcal{E})^3 \cong \Delta'^3+3\Delta'^2\mathcal{E}$

$$E^2=(\Delta'+\mathcal{E})^2 \cong \Delta'^2+2\Delta'\mathcal{E}$$

Zamenom u jednačinu II 3.9. dobijamo da je popravka energije $\mathcal{E}$ oblika:

$$\mathcal{E} = \frac{2W\Delta'\tilde{W}}{(\Delta-\Delta')^2+2(\Delta\tilde{W}^2-\Delta'\tilde{W}^2)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ \text{II } 3.11.$$

Vidimo da je popravka energije $\mathcal{E}$ pozitivna veličina. Zamenom II 3.11. u II 3.10. tada rešenje jednačine II 3.9. glasi:

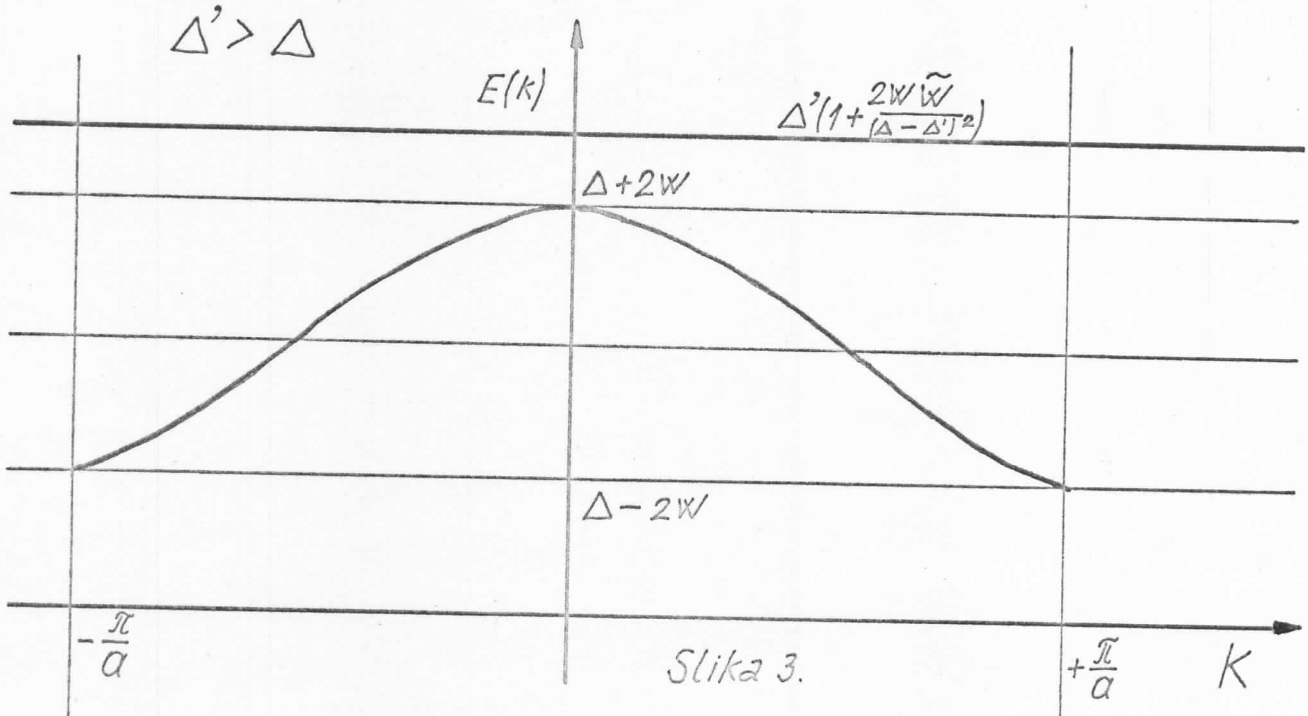
$$E = \Delta' + \frac{2\Delta'W\tilde{W}}{(\Delta-\Delta')^2+2(\Delta\tilde{W}^2-\Delta'\tilde{W}^2)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ \text{II } 3.12.$$

Pošto je $\Delta, \Delta' \gg W, \tilde{W}$ tako da možemo pisati:

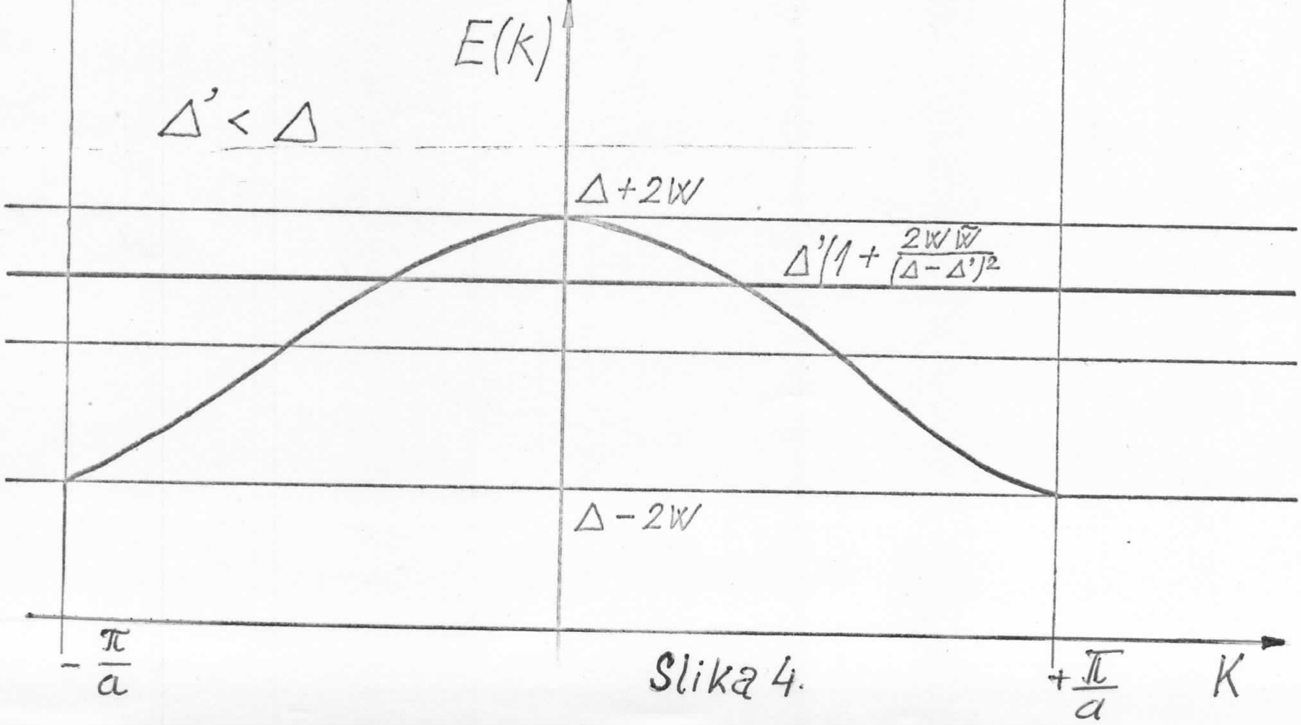
$$E \cong \Delta' + \frac{2\Delta'W\tilde{W}}{(\Delta-\Delta')^2}$$

$$E \cong \Delta'\left[1 + \frac{2W\tilde{W}}{(\Delta - \Delta')^2}\right] \qquad \ldots\ldots\ \text{II } 3.13$$

Kao što vidimo dopunski nivo koji se pojavljuje kao posledica prisustva primese u molekularnom kristalu ima energiju koja je reda veličine energije pobuđenja primese Δ'. Mala popravka na ovu energiju proporcionalna je veličini rezonantnih interakcija za molekule matrice i primese a obrnuto je srazmerna kvadratu razlike energija pobuđenja molekula matrice i molekula primese $(\Delta - \Delta')^2$.



Slika 3.



Slika 4.

Zaključak

U radu su ispitivana eksitonska stanja jednodimenzione rešetke sa jednom primesom. Energija pobuđenja primese razlikuje se od energije pobuđenja ostalih molekula u kristalu a takođe je uzeto u obzir da primesa drukčije interaguje sa okolinom nego identični molekuli matrice između sebe.

Analiza je vršena tako što je hamiltonijan sistema kristal+primesa napisan kao suma hamiltonijana idealne strukture i dodatka koji nastaje usled narušenja simetrije kao perturbacije. Prilikom nalaženja zakona disperzije korišćen je metod Grinovih funkcija. Lokalni nivo koji je dobijen na ovaj način sadrži kao glavni član energiju pobuđenja primese i dopunski član koji je proporcionalan matričnim elementima rezonantne interakcije i obrnuto proporcionalan razlici energija pobuđenja primese i energije pobuđenja molekula matrice.

Takođe je interesantno napomenuti da u slučaju kada je energija pobuđenja primese veća od energije pobuđenja ostalih molekula onda lokalni nivo leži van eksitonske zone (sl. 3). U obrnutom slučaju lokalni nivo preseca eksitonsku zonu (sl. 4) tako da su nova stanja rezonantna stanja slobodnih eksitona, a to znači da se za neke vrednosti talasnog vektora intenzivnost slobodnih eksitonskih talasa naglo povećava usled prisustva primese.

Literatura

1. А. С. ДАВИДОВ ЖЭТФ (1951)
2. А. С. ДАВИДОВ: Теория молекул экситонов наука Москва (1968)
3. Л. Ландау Е. Лифшиц: Квантна механика, превод Београд (1966)
4. В. М. Агранович: Теория экситонов наука Москva (1968)
5. Dr. Đ. Mušicki: Uvod u teorijsku fiziku I i II Beograd (1965)
6. Charles Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, prevod Beograd (1970)