

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Кафедра за физику

Фаик Х. Каџар



# ЕКСИТОН-ФОНОН ИНТЕРАКЦИЈА И МИГРАЦИЈА ЕКСИТОНА

Дипломски рад

Нови Сад 1975.

Најискреније се захваљујем ментору професору  
Dr. БРАТИСЛАВУ С. ТОШИЋУ на указаној помоћи и ко-  
рисним сугестијама које ми је дружио при изради овог  
дипломског рада.

Захваљујем се колеги Добрици Шошићу, сту-  
денцу Машинског факултета, на помоћи око техничке  
реализације дипломског рада.

Ф.Х. Каџар



## САДРЖАЈ

Увод	I
I глава – ЕКСИТОН-ФОНОН ИНТЕРАКЦИЈА	
11. Френкелови екситони	1
12. Фонони	15
13. Хамилтонијан екситон-фонон интеракције	21
II глава – ПРОБЛЕМ ЕКСИТОНСКЕ МИГРАЦИЈЕ	
II 1. Средњи слободни пут екситона	25
II 2. О дифузији у оштеће	36
II 3. Коефицијент дифузије на високим и ниским шематурама	43
Закључак	46
Литература	47

# I

## УВОД

Циљ овог дипломског рада је исучавање процеса миграције екситонских стобуђења у молекуларним кристалима. Механизам који је одговоран за карактер миграције је екситон-фонон интеракција. Физички је ово пошто је разумљиво, јер екситонски стапац пролази кроз објава молекула која га деформишу и утичу на карактер његовог кретања. Уколико молекули осцилују, поље свакој молекула прими деформацију у времену, а самим тим мијења просторне и временске карактеристике екситонског стапаца.

У овом дипломском раду биће коришћен нови приказ проблему екситон-фонон интеракције који се састоји у томе што се по молекулским помјерајима развијају и мајични елементи дипол-диполне интеракције и екситонски оператори. Ова идеја мотивисана је познатим Доплеровим ефектом у затријаним гасовима. Овај ефекат састоји се у томе, што се са промјеном стемпрашире гаса мијења стапацна дужина израчуне објектости. То значи да интеракција са фотонима мијења и енергију стобуђења изолованог молекула. Ова процјена може се узети у обзир само ако по молекулским помјерајима развијемо екситонске операторе. Стандардни приказ екситон-фонон интеракције, у коме се по молекулским помјерајима развијају само мајични елементи дипол-диполне интеракције не

би могао да објасни Дослеров ефекат, јер су у тасу ови матрични елементи равни нули.

Од величина карактеристичних за миграцију, биће израчунати средњи слободни јуж екситона, затим коefицијент дифузије екситона и количина дифундованих екситона на датој температури. Све ове величине биће израчунате и са новим и са стандардним хамилонијјоном екситон-фонон интеракције.

## *1 ГЛАВА*

# *ЕКСИТОН-ФОНОН ИНТЕРАКЦИЈА*

## II. ФРЕНКЕЛОВИ ЕКСИТОНИ

Прве теорије обичночних побудајења у кристалима дали су Френкел и Пајерлс за молекуларне кристале, а Ваније и Мош за полупроводнике. Оваква побудајења, која су индукована сјејашлошћу, називају се екситони. Екситони у молекуларним кристалима зову се Френкелови екситони, док екситони у полупроводницима носе назив Ваније-Моша. У енергетском смислу оба поменута типа су слични, јер им је енергија реда величине 3-5 eV шт. реда величине видљиве сјејашлости која их индукује.

Битна разлика између ова два типа екситона је у величини њиховог радијуса, ако их схвадимо као квазичеснице сферног облика. Френкелови екситони имају мали радијус реда величине неколико ангстрема, док радијус екситона Ваније-Моша може да буде и неколико микрона.

Екситон Ваније-Моша настаје шако што сјејашлости из побуде електронске зоне у полупроводнику избаци један електрон у проводну зону. То значи да се у побудујеној зони појављује „шупљина“ која се наза као позитивно наелектрисање, док је електрон у проводној зони негативно наелектрисан. Електрон и „шупљина“ привлаче се Кулоновом силом и док је она довољно јака да их држи везане, у полупроводни-

ку не стече струја, већ се овај везани комплекс електирон-„шумљина“ понаша као неуправљена целина. Овој неуправљеним комплексима помера се кроз кристал као неки шалас (квазичесница) и шај шалас назива се екситон Ваније-Мота. У случају раскидања Кулоновских веза и раздвајања „шумљине“ и електирона екситон Ваније-Мота престаје да постоји, електирон и „шумљина“ почињу да се крећу независно један од другог и кроз пољу проводника стече струја, у проводнијој зони струја електирон а у побуђеној струја „шумљина“.

Код Френкелових екситона свјетлосни шакоје снабвара електирон и „шумљину“, или овај неуправљени комплекс остаје на самом молекулу. Због што екситони Френкела имају мали радијус. То са друге стране не значи да екситација једног молекула остигаје локализована на самом молекулу. Кад се један молекул у кристалу екситира што одмах изазива промјену мачричних елемената индракције између молекула и екситација, услед овог прелази следећи молекул шако да се после извесног времена пренесе на све молекуле кристала. Овакав шалас побудења назива се Френкелов екситон.

Френкелови екситони најчешће се јављају у молекуларним кристалима. У молекуларне кристале спадају: антраксен, нафталин, бензол у чврстом са-

њу, и сплеменити гасови шакође у чврстом стању. Молекули оваквих кристала су јако изражени дисоли и због штоа између њих дјелују сile дисол-дисолног шара. Потенцијал дисол-дисолне интеракције између молекула има облик:

$$V_{\vec{r}\vec{m}} = e^2 \frac{\vec{r}_{\vec{r}} \cdot \vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{r} - \vec{m}|^3} - 3e^2 \frac{[\vec{r}_{\vec{r}}(\vec{r} - \vec{m})][\vec{r}_{\vec{m}}(\vec{r} - \vec{m})]}{|\vec{r} - \vec{m}|^5} \quad (1.1.1)$$

тје је

- $e$  - наелектрисање електрона

-  $\vec{r}, \vec{m}$  - вектори кристалне решење

-  $\vec{r}_r, \vec{r}_m$  - вектори дисола молекула на мјесану  $r$  и  $m$  у кристалној решењи.

Као што видимо дисол-дисолна интеракција обада са ширећим смејеном расстојањем између молекула. Ова интеракција има два дјела која су битно различита. Први дјо зависи само од интензитета расстојања између молекула и овај дјо се назива аналишички дјо дисол-дисолне интеракције. Други дјо зависи од интензитета расстојања и од улога које вектори-дисоли заклапају са расстојањем  $r - m$  и назива се неаналишички дјо дисол-дисолне интеракције. Овај назив „неаналишички“ дошао је услед што Фурије лик овог дјела интеракције зависи од правца простирања експоненцијално, шако да за оваки правци простирања експоненцијал има другачији закон дисперзије. Често се у рачунима из разноразних разлога неаналишички дјо закона дисперзије обдаљује и експоненцијал добијајући у оваквој апроксимацији називају се механи-

чки екситони. Свјештосћ која индукује екситон у молекулу, може да изазове два ефекта. Први ефект је промјена стања електрона у молекулу, а други ефекат састоји се у промјени стања унутрашњих молекулских вибрација. Ове друге промјене до којих доводи свјештосћ мање енергије (инфрацрвена) колективизацију се у кристалу и обаквим колективним екситонијама понекад се називају екситони Френкела, а чешће вибронима. Погледатељи честично екситоне Френкела, ш.ј. екситоне који настају услед промјене стања електрона у индивидуалним молекулама.

Ако се ограничимо само на овај случај онда хамилонијан молекуларног кристала у односу на процес общијих добуђивања његовог електронског подсистема можемо да посматрамо као хамилонијјак од двочестионим фермионским интеракцијама. У репрезентацији друге квантизације обакав хамилонијјак има облик:

$$H = \sum_{\vec{n}f} E_{\vec{n}f} A_{\vec{n}f}^+ A_{\vec{n}f} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}} (f_1 f_2 f_3 f_4) A_{\vec{n}f_1}^+ A_{\vec{m}f_2}^+ A_{\vec{m}f_3} A_{\vec{n}f_4} \quad (II.2)$$

Идеје су

- $\vec{n}, \vec{m}$ -чворови решетке

- $f, f_1, f_2, f_3, f_4$ -скупови квантиних бројева који карактеришу стање електрона

- $E_{\vec{n}f}$ -енергије електрона у стању  $f$

- $V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1, f_2, f_3, f_4)$ -матрични елементи оператора дисполидажне интеракције, по својственим стањима електрона у изолованом молекулу.

Оператори  $A_{\vec{n}}^+$  и  $A_{\vec{n}}^-$  креирају, односно аничишују електроне на чвору  $\vec{P}$  у стању  $f$ . Ако са  $H_{\vec{n}}$  означимо хамилтонијан молекула на мјесецу  $\vec{P}$ , онда његов бројеви проблем можемо наћи-савиши као:

$$H_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}}^+ = E_{\vec{n}}^+ \Psi_{\vec{n}}^+ \quad (I.3.)$$

На основу овог видимо да су  $E_{\vec{n}}^+$  енергије изолованог молекула, док су функције  $\Psi_{\vec{n}}^+$  својствене функције хамилтонијана изолованог молекула. Маштини елеменит интеракције два молекула са различним нивоима  $f_1, f_2, f_3, f_4$  има облик:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1, f_2, f_3, f_4) = \int \Psi_{\vec{n}}^{*f_1} \Psi_{\vec{m}}^{*f_2} V_{\vec{n}\vec{m}} \Psi_{\vec{m}}^{f_3} \Psi_{\vec{n}}^{f_4} d\vec{\tau}_{\vec{n}} d\vec{\tau}_{\vec{m}}, \quad (I.4)$$

Де  $d\vec{\tau}_{\vec{n}}, d\vec{\tau}_{\vec{m}}$  представљају елементарне зајремине простора, који заузимају молекули на мјесетима  $\vec{n}$  и  $\vec{m}$ .

Таласне функције  $\Psi$  јако брзо садају са расстојањем па се интеграл (I.4.) може схватити, без велике грешке као интеграл по бесконачној зајремини.

У даљој анализи сматраћемо да електрон у молекулу може да се нађе само у два стања, основном „0“ и побудженом  $f$ . Оваја шема назива се шема са два нивоа и она је обједињена или у случају када кристал подуђује монохроматским фотонима, или ако фотони нијесу монохроматски, шема је обједињена ако су остале могући нивои енергетски јако различити од нивоа  $f$ .

Разматрати хамилтонијан (I.2.) као електронски хамилтонијан са двачестичним интеракцијама

није због то ни са математичке шаке следишића, а ни са физичке шаке следишића, јер физички посматрано, експулсивније је добуђен електирон већ квант добуђења молекула кристала. Због што се умјесто фермионског обраштора  $A_{\vec{n}}^+$  уводе нови обраштори  $P_{\vec{n}}$  и што на следећи начин:

$$P_{\vec{n}}^+ = A_{\vec{n}f}^+ A_{\vec{n}o} \quad P_{\vec{n}}^- = A_{\vec{n}o}^+ A_{\vec{n}f} \quad (I.1.5)$$

Физички смисао новоуведених обраштора је очигледан, обраштор  $P_{\vec{n}}^+$  описује процес у коме је несашао један електирон у основном стању, а „родио“ се у добуђеном стању  $f$ . Према томе обраштор  $P_{\vec{n}}^+$  креира квант добуђења са енергијом  $E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}o}$ . Обраштор  $P_{\vec{n}}^-$  описује процес у коме је ишчезао електирон у добуђеном стању  $f$ , а „родио“ се у основном стању „o“. Према томе обраштор  $P_{\vec{n}}^-$  уништава (анихилира) квант добуђења са енергијом  $E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}o}$ .

Обраштори  $P_{\vec{n}}^+$  и  $P_{\vec{n}}^-$  немају фермионске комутационе релације, а ни бозонске и са статистичке шаке следишића представљају средину између Бозе и Ферми обраштора. Овакви обраштори називају се Паули обраштори. Комутационе релације за Паули обрашторе можемо извесни на основу комутационих релација за Ферми обрашторе, уз један допунски услов који ћемо дештајније објаснити. Ако је електирону додуштено да заузима свећа два стања „o“ и  $f$ , онда због Пау-

лијевог јединица за сваки чвор решетке комилејдан  
фермионски простор изгледа овако:

$$|0_0 \ 0_f\rangle |1_0 \ 1_f\rangle \quad (I.6)$$

$$|1_0 \ 0_f\rangle |0_0 \ 1_f\rangle. \quad (I.7).$$

Обзиром на дефиницију Паули оператора (I.5.), бију се да су они идентички равни нули у подпростору (I.6.), што значи да овај подпростор не може учињати на физичке карактеристике система, па је искључујемо из даљег разматрања. У подпростору (I.7.) Паули оператори нису равни нули и што је још важније, делујући на функције из обогађеног простора, они дају функције из тог подпростора, па је због тога искључивање подпростора (I.6.) оправдано. Очигледно да у подпростору (I.7.) важи услов:

$$A_{\vec{n}f}^+ A_{\vec{n}f} + A_{\vec{n}0}^+ A_{\vec{n}0} = 1 \quad (I.8.)$$

Комбинирајем овој услова са познатим комутационим релацијама за ферми операторе, за Паули операторе (I.5) добијамо следеће комутационе законе:

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^\pm] = [1 - 2 P_{\vec{n}}^\pm P_{\vec{m}}^\pm] \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P_{\vec{n}}^\pm, P_{\vec{m}}^\pm] = 0 \quad \vec{n} \neq \vec{m} \quad (I.9.)$$

$$P_{\vec{n}}^2 = P_{\vec{n}}^{+2} = 0$$

$$P_{\vec{n}}^\pm P_{\vec{n}}^\pm = A_{\vec{n}f}^+ A_{\vec{n}f} = 0 \text{ или } 1.$$

Одабре се бију да се за један чвор решетке Паули оператори понашају као ферми оператори, док се за различите чворове решетке понашају као Бозе

оператори.

Ako u хамилонијану (I.1.2.) узмемо у обзир чињеницу да индекси  $f, f_1, f_2, f_3, f_4$  могу узимати само две вредности „0“ и „f“, искоришћимо дефиницију Паули оператора и њихове комутационе релације добијамо хамилонијан система у паулионској рејрезентацији у облику:

$$H = E_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^{\pm} P_{\vec{n}}^{\mp} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \tilde{\mathcal{L}}_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^{\pm} P_{\vec{m}}^{\mp} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \beta_{\vec{n}, \vec{m}} (P_{\vec{n}}^{\pm} P_{\vec{m}}^{\pm} + P_{\vec{m}}^{\mp} P_{\vec{n}}^{\mp}) + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \gamma_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^{\pm} P_{\vec{m}}^{\pm} P_{\vec{m}}^{\mp} P_{\vec{n}}^{\mp} \quad (I.1.10)$$

Ознаке су следеће:

$$E_0 = N [E_0 + \frac{1}{2} V_0 (00, 00)]$$

$$\Delta = E_{ff} - E_{00} - V_0 (00, 00) + \frac{1}{2} V_0 (f0, of) + \frac{1}{2} V_0 (of, fo)$$

$$2 \tilde{\mathcal{L}}_{\vec{n}, \vec{m}} = V_{\vec{n}, \vec{m}} (f0, fo) + V_{\vec{n}, \vec{m}} (of, of)$$

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

$$2 \gamma_{\vec{n}, \vec{m}} = V_{\vec{n}, \vec{m}} (ff, ff) + V_{\vec{n}, \vec{m}} (00, 00) - V_{\vec{n}, \vec{m}} (f0, of) - V_{\vec{n}, \vec{m}} (of, fo)$$

$$V_0 (f_1, f_2, f_3, f_4) = \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}, \vec{m}} (f_1, f_2, f_3, f_4) \quad (I.1.11.)$$

При добијању хамилонијана (I.1.10) искоришћена је чињеница да се молекули међусобно не разликују, па  $E_{ff}$  и  $E_{00}$  не зависе од индекса решешке  $\vec{n}$ . Осим што стрештосостављено је да кристал има центрар инверзије и он се поклапа са центром инверзије изолованих молекула, па су због штоа матрични елеменди штава:

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

$$V_{\vec{n}, \vec{m}} (ff, fo) \quad V_{\vec{n}, \vec{m}} (ff, of) \quad V_{\vec{n}, \vec{m}} (fo, ff) \quad V_{\vec{n}, \vec{m}} (of, ff)$$

равни нули.

Прелазећи са Ферми на Паули операторе, као што се види из добијених формулa, велики дисо фермионских интеракција је укључен у квадратни дисо паулионског хамилтонијана. Физички, то значи да смо оваквим преласком укључили интеракције честича у хамилтонијан таса квазичестича. Аутор ове идеје је Богољубов, а сам мешод се зове мешод приближне друже квантизације, а његова физичка суштина је замјена система јако интерагујућих честича, суштемом слабо интерагујућих квазичестича.

Следећи корак у анализи је замјена Паули оператора у хамилтонијану (I 1.10.) Бозе операторима  $B^+$  и  $B$  по приближним формулама:

$$P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} \quad P_{\vec{n}}^+ = B_{\vec{n}}^+ \quad P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} \quad (I 1.12.)$$

Замјена Паули оператора Бозе операторима, уносчи у рачун извјесну грешку која је ушолико мања, уколико је број ексцистираних молекула у кристалу мањи. Тачна формула за прелаз са Паули оператора на Бозе операторе има облик:

$$P_{\vec{n}} = \left[ \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu} B_{\vec{n}}^{\nu} \right]^{1/2} B_{\vec{n}} \quad ; \quad P_{\vec{n}}^+ = B_{\vec{n}}^+ \left[ \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu} B_{\vec{n}}^{\nu} \right]^{1/2}$$
$$P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu+1} B_{\vec{n}}^{\nu+1} \quad (I 1.13)$$

Ако посљедњи дисо формуле (I 1.13.) развијемо, добићемо:

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

И на основу овог видимо да број паулиона  $P^+ P$  доби-

ја правилне вриједности 0 и 1 само док је број до-  
зона раван 0, 1 и 2. Већ за  $N=3$  добијамо неправи-  
лан резултат за број паулиона  $P^+P$ . На овај начин  
ислусиробали смо горњу тврдњу да је замјена Паули  
оператора бозонима по формулама (I.12.) добра само  
док је број бозона мали, што док је систем слабо екс-  
циширан. Због што се највећи приближне друге ква-  
нтизације саслоји не само у замјени Паули опера-  
тора бозонима, већ и у одбацивању свих чланова  
чешћег реда по Бозе операторима. Одбацивање  
чланова чешћег реда је нужно, јер су прве  
корекције које долазе услед разлике између Па-  
ули и Бозе комутационих релација чешћег и  
виших редова по Бозе операторима.

На основу овог, хамилонијан методе при-  
ближне друге квантизације за експонентски си-  
стем има облик:

$$H = E_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n} \vec{m}} \tilde{\alpha}_{\vec{n} \vec{m}} B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} \beta_{\vec{n} \vec{m}} (B_{\vec{n}}^\dagger B_{\vec{m}}^\dagger + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}}) \quad (I.14.)$$

Послије Фурије трансформације Бозе оператора:

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

$$B_{\vec{n}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^\dagger e^{-i \vec{k} \vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B_{-\vec{k}}^\dagger e^{i \vec{k} \vec{n}} \quad (I.15.)$$

Хамилонијан (I.14.) постаје:

$$H = E_0 + \sum_{\vec{k}} (\Delta + \tilde{\alpha}_{\vec{k}}) B_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} (B_{\vec{k}}^\dagger B_{-\vec{k}}^\dagger + B_{-\vec{k}} B_{\vec{k}})$$

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

$$\beta_k = \sum_{\vec{n}} \beta_{\vec{n}0} e^{i\vec{k}\vec{n}} \quad (I.16.)$$

Овако добијени хамилтонијан може се даље дистонализовани преласком на нове базе операторе  $B_k$ , на следећи начин:

$$B_k = U_k b_k + V_k b_{-k}$$

$$B_k^+ = U_k b_k^+ + V_k b_{-k}^+ \quad (I.17.)$$

Трансформационе функције  $U_k$  и  $V_k$  су по претпоставци парне и реалне. Да би  $b_k$  били базе оператори на функције  $U$  и  $V$  треба постовати једноставнији једносмерни услов каноничности трансформације. Ако образујемо комутатор оператора  $B^+$  и  $B$ , на основу формуле (I.17.) добијамо:

$$[B_k, B_k^+] = U_k^2 [b_k, b_k^+] + V_k^2 [b_{-k}, b_{-k}^+] +$$

$$+ U_k V_k \{ [b_k, b_{-k}] + [b_{-k}^+, b_k^+] \},$$

да би  $b^+, b$  били базе оператори, мора да јесу:

$$[b_k, b_k^+] = 1, \quad [b_{-k}^+, b_{-k}] = -1, \quad [b_k, b_{-k}] = [b_{-k}^+, b_k^+] = 0.$$

Како је  $[B_k, B_k^+] = 1$ , услов каноничности постаје

$$U_k^2 - V_k^2 = 1. \quad (I.18.)$$

Замјеном (I.17.) у (I.16.) добијамо:

$$H = E_0 + \sum_k [V_k^2 (\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_k) + U_k V_k \beta_k] + \sum_k [(\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_k)(U_k^2 + V_k^2) +$$

$$+ 2U_k V_k \beta_k] b_k^+ b_k + \sum_k [(\Delta + \tilde{\mathcal{L}}_k) \cdot U_k V_k + \frac{1}{2} \beta_k (U_k^2 + V_k^2)] (b_k^+ b_{-k}^+ + b_{-k} b_k). \quad (I.19.)$$

Да би се ослободили негујајонских чланова тројордионалних  $b_k^+ b_k^+ + b_{-k} b_k$ , изједначитимо кофицијенти који садају уз њих са нулом. Тако добијамо:

$$(\Delta + \tilde{\alpha}_R) U_R^2 V_R^2 + \frac{1}{2} \beta_R^2 (U_R^2 + V_R^2) = 0$$

$$U_R^2 - V_R^2 = 1.$$

Решавајући овај систем једначина имамо:

$$U_R^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\Delta + \tilde{\alpha}_R}{\sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2 - \beta_R^2}} + 1 \right]; \quad V_R^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\Delta + \tilde{\alpha}_R}{\sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2 - \beta_R^2}} - 1 \right]$$

$$U_R V_R = -\frac{1}{2} \frac{\beta_R^2}{\sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2 - \beta_R^2}}; \quad U_R^2 + V_R^2 = \frac{\Delta + \tilde{\alpha}_R}{\sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2 - \beta_R^2}} \quad (I.20)$$

Замјеном ових резултата у израз (I.19) добијамо дигитализован експоненцијал хамилтонијан у облику:

$$H = E_0 + \frac{1}{2} \sum_k [V(\Delta + \tilde{\alpha}_k)^2 - \beta_k^2] - \Delta - \tilde{\alpha}_R +$$

$$+ \sum_k \sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_k)^2 - \beta_k^2} b_k^+ b_k^- \quad (I.21.)$$

Закон дисперзије за експоненцијал добијамо:

$$E_{e(R)} = \frac{\partial H}{\partial b_R^+ b_R^-} = \sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2 - \beta_R^2} \quad (I.22.)$$

$\Delta$  је реда 3-5 eV, док су  $\tilde{\alpha}$  и  $\beta$  0,1-0,01 eV. На основу овог можемо коријети у формули (I.22.) разбивши у ред:

$$E_{e(R)} = \sqrt{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2 - \beta_R^2} = (\Delta + \tilde{\alpha}_R) \sqrt{1 - \frac{\beta_R^2}{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2}} \approx$$

$$\approx (\Delta + \tilde{\alpha}_R) \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{\beta_R^2}{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)^2} \right] = \Delta + \tilde{\alpha}_R - \frac{1}{2} \frac{\beta_R^2}{(\Delta + \tilde{\alpha}_R)} \approx \Delta + \tilde{\alpha}_R - \frac{\beta_R^2}{2\Delta}.$$

Па приближан израз за енергију стапа:

$$E_{e(R)} = \Delta + \tilde{\alpha}_R - \frac{\beta_R^2}{2\Delta} \quad (I.23.)$$

Да бисмо одређеније узимали карактеристике експоненцијала, прешосставићемо:

a) да је у  $\tilde{\alpha}_R$  и  $\beta_R$  дашан само аналитички део оператора дисперсионе интеракције,

b) да је апроксимација најближих сусједа добра апроксимација,

c) ограничимо се на област малих шаласних вектора и

d) посматраћемо кристал простирајући структуре.

На основу a, b и d имамо:

$$\tilde{\mathcal{L}}_k = 2\tilde{\alpha}(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

$$\beta_k = 2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a),$$

тје су  $\tilde{\mathcal{L}}_k$  и  $\beta_k$  матрични елементни интеракције за најближе сусједе и A константа решетке, гдје на основу прештосавке (C) имамо:

$$\tilde{\mathcal{L}}_k \cong 6\tilde{\alpha} - \tilde{\alpha}a^2 k^2$$

$$\beta_k \cong 6\beta - \beta a^2 k^2.$$

Ако последњи израз заменимо у израз за енергију експансије добијамо:

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

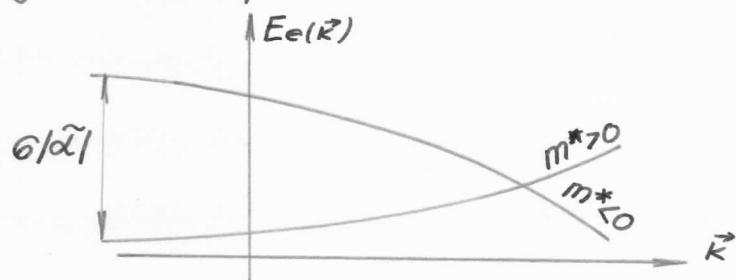
и ако се занемари члан пропорционалан  $k^4$ , добије:

$$E_e(k) = \tilde{\Delta} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \quad \tilde{\Delta} = \Delta + 6\tilde{\alpha} - \frac{18\beta^2}{\Delta}; \quad m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^3(\tilde{\alpha} - \frac{6\beta^2}{\Delta})} \quad (I 1.24.)$$

Одабре се види да се експанзија у области малих шаласних вектора понавља као честица са ефективном масом  $m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^3(\tilde{\alpha} - 6\beta^2/\Delta)}$ . Овако матричног елемента  $\tilde{\mathcal{L}}$  зависи да ли ће експанзија имати позитивну или негативну масу, или другим речима, користећи се Шерминима класичне облике, да ли ће сировост у кристалу имати позитивну

или негаšivnu disperziju.

У случају да је  $\tilde{\alpha} < 0$ , екситон има позитивну ефектичну масу (позитивну дисперзију), док за  $\tilde{\alpha} > 0$  екситон има негаšivnu ефектичну масу (негаšivnu дисперзију). Графички се ова два случаја могу представити тако:



Сл. 1

Екситон има „тежи“ закон дисперзије. Физички смисао овог „тежи“ је очигледан: шо је енергија добуђивања изолованог молекула.

## I 2. ФОНОНИ

Ако су у кристалу доминантне двочесличне интеграције између његових саставних дијелова (молекула или атома), онда се укупна поштенцијална енергија кристала може написати као:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}), \quad (I 2.1.)$$

Тада су  $\vec{n}$  и  $\vec{m}$  вектори чворова решетке на асолу-  
тној нули. При повишењу температуре атоми починују да осцилацију и сваки од чворова решетке добија неки промаштај  $\vec{U}_{\vec{n}}, \vec{U}_{\vec{m}}$ :

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{U}_{\vec{n}} \text{ и } \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{U}_{\vec{m}} \quad (I 2.2.)$$

С обзиром на (I 2.2.) и чињеницу да су помаџи  $\vec{U}_{\vec{n}}, \vec{U}_{\vec{m}}$  мали, поштенцијалну енергију кристала можемо, до-  
слије развијања функције у ред, написати као:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V[(\vec{n} - \vec{m}) + (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}})] \cong \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}} [(\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) V_{\vec{n}-\vec{m}}]^2 V(\vec{n} - \vec{m}) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha} (\vec{U}_{\vec{n}}^\alpha - \vec{U}_{\vec{m}}^\alpha) \frac{\partial}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} V(\vec{n} - \vec{m}) + \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta} (\vec{U}_{\vec{n}}^\alpha - \vec{U}_{\vec{m}}^\alpha) (\vec{U}_{\vec{n}}^\beta - \vec{U}_{\vec{m}}^\beta) \frac{\partial^2}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha \partial(\vec{n} - \vec{m})_\beta} V(\vec{n} - \vec{m}) \quad (I 2.3.) \end{aligned}$$

$$\alpha, \beta = x, y, z$$

$\vec{U}_{\vec{n}}$  је пројекција вектора  $\vec{U}_{\vec{n}}$  на осу  $\alpha$ . Пошто функција  $V(\vec{n} - \vec{m})$  мора имати екстремуме између чворова, то је:

$$\frac{\partial}{\partial(\vec{n} - \vec{m})_\alpha} V(\vec{n} - \vec{m}) = 0$$

за све  $\vec{n}, \vec{m}$  и  $\alpha$ .

Друге изводе који физички су у формулама (I 2.3.)

означићемо са:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_\alpha \partial(\vec{n}-\vec{m})_\beta}. \quad (I 2.4.)$$

Ове функције имају следећа својства симетрије:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{n}-\vec{m}) = \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{m}-\vec{n}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{m}-\vec{n}). \quad (I 2.5.)$$

Занемаримо први члан из формулe (I 2.3.), јер он представља поштенцијалну енергију замрзнутог кристала, осимаје нам поштенцијална енергија кристала услед повишења температуре, као израз:

$$U_{f\vec{m}} = \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}\alpha\beta} \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})(U_{\vec{n}}^\alpha - U_{\vec{m}}^\alpha)(U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{m}}^\beta) \quad (I 2.6.)$$

Сила на  $\vec{n}$ -ти чвор (ш. њена  $\alpha$ -компоненту), дати је као не зависни извод поштенцијалне енергије по пројекцији, ш.:

$$F_{\vec{n}}^\alpha = -\frac{\partial U_{f\vec{m}}}{\partial U_{\vec{n}}^\alpha} = -\sum_{\vec{k}\vec{m}\beta} \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})(U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{m}}^\beta) \quad (I 2.7.)$$

За најближе сусједе имамо:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m}) \rightarrow \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{v}) \equiv \Lambda_{\alpha\beta},$$

тје  $\vec{v}$  сада најближе сусједе за фиксираним атомом. Поништо се ради о истом расстојању  $\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{v})$  не зависи од  $\vec{v}$ . Па ће бити за најближе сусједе:

$$F_{\vec{n}}^\alpha = -\sum_{\beta} \Lambda_{\alpha\beta} \sum_{\vec{v}} (U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{n}+\vec{v}}^\beta). \quad (I 2.8.)$$

Ако са  $M$  означимо масу атома, на основу другог Куинбовог закона имамо:

$$M \ddot{U}_{\vec{n}}^\alpha = F_{\vec{n}}^\alpha = \sum_{\beta} \Lambda_{\alpha\beta} \sum_{\vec{v}} (U_{\vec{n}}^\beta - U_{\vec{n}+\vec{v}}^\beta). \quad (I 2.9.)$$

Ако прештавимо да су компоненте помака  $(U_{\vec{n}}^\alpha)$  периодичне функције простора и времена, ш.:

$$U_{\vec{n}}^\alpha = A^\alpha e^{ik\vec{n} \cdot \vec{r} - i\omega t}, \quad (I 2.10.)$$

Послије замјене (I 2.10.) у (I 2.9.) и сређивањем до-  
бијамо хомогени систем једначина за одређивање  
компоненти ашомских појединачних:

$$\left. \begin{array}{l} \left[ \Lambda_{xx} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 \right] U_n^x + \Lambda_{xy} U_n^y + \Lambda_{xz} U_n^z = 0 \\ \Lambda_{yx} U_n^x + \left[ \Lambda_{yy} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 \right] U_n^y + \Lambda_{yz} U_n^z = 0 \\ \Lambda_{zx} U_n^x + \Lambda_{zy} U_n^y + \left[ \Lambda_{zz} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 \right] U_n^z = 0 \end{array} \right\} (I 2.11.)$$

Igje je

$$f_k = \sum_D (1 - e^{ik^D}) \quad (I 2.12.)$$

По ди систем једначина (I 2.11.) имао нешриби-  
јална рјешења, дештерминанта система мора бити  
једнака нули. Та дештерминанта има облик:

$$\begin{vmatrix} \Lambda_{xx} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 & \Lambda_{xy} & \Lambda_{xz} \\ \Lambda_{yx} & \Lambda_{yy} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 & \Lambda_{yz} \\ \Lambda_{zx} & \Lambda_{zy} & \Lambda_{zz} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (I 2.13.)$$

Ова једначина даје шри дозвољене фреквенције фено-  
на. У даљем раду ограничено се на простору је-  
днодимензиону решетку. Тада имамо:

$$f_k = 1 - e^{i k a} + 1 - e^{-i k a} = 4 \sin^2 \frac{k a}{2}.$$

Функција се своди на:

$$\Lambda_{xx} - \frac{M}{f_k^2} \omega_k^2 = 0$$

И добијамо:

$$\omega_k = 2 \sqrt{\frac{1}{M}} \left| \sin \frac{k a}{2} \right| \quad (I 2.14.)$$

$$\Lambda \equiv \Lambda_{xx}.$$

У случају малих штапасних вектора формула (I 2.14.) до-  
сније:

$$w_k = c k; \quad c = a \sqrt{\frac{\Lambda}{M}} \quad (I.2.15.)$$

$c$  - брзина звука.

За једнодимензиону решетку кинесичка енергија има облик:

$$T = \frac{M}{2} \sum_{\vec{n}} \dot{U}_{\vec{n}}^2, \quad (I.2.16.)$$

док потенцијална енергија, на основу формуле (I.2.6.), за најближе сусједе је:

$$U_{\text{pot}} = \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{n}} (U_{\vec{n}+1} - U_{\vec{n}})^2, \quad (I.2.17.)$$

па је шотални хамилонијан систем:

$$H = T + U_{\text{pot}} = \frac{M}{2} \sum_{\vec{n}} \dot{U}_{\vec{n}}^2 + \frac{\Lambda}{2} \sum_{\vec{n}} (U_{\vec{n}+1} - U_{\vec{n}})^2. \quad (I.2.18.)$$

Умјесто рјешења њица (I.2.10.) узмимо линеарну комбинацију:

$$U_{\vec{n}} = \sum_k D_k (b_k e^{ik\vec{n}\alpha - i\omega_k t} + b_k^* e^{-ik\vec{n}\alpha + i\omega_k t}), \quad (I.2.19.)$$

која шакође задовољава једначину:

$$M \ddot{U}_{\vec{n}} = \Lambda (U_{\vec{n}+1} + U_{\vec{n}-1} - 2U_{\vec{n}}) \quad (I.2.20.)$$

игаје је

$$w_k = 2 \sqrt{\frac{\Lambda}{M}} \sin \frac{k\alpha}{2}$$

Замјеном (I.2.19.) у (I.2.18.), хамилонијан куплованих осцилатора, (I.2.18.) у простору решетке сводимо на хамилонијан суме независних осцилатора у простору инверзне решетке (импулсни простор) који сада има облик:

$$H = \sum_k (b_k^* b_k + \frac{1}{2}) \hbar \omega_k. \quad (I.2.21.)$$

Пошто има облик:

$$U_{\vec{n}} = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN w_k}} (b_k e^{ik\vec{n}\alpha - i\omega_k t} + b_k^* e^{-ik\vec{n}\alpha + i\omega_k t}) \quad (I.2.22.)$$

Бозе оператори  $b_{\vec{k}}$  и  $b_{\vec{k}}^*$  анихилирају и креирају фононе са шаласним вектором  $\vec{K}$ .

На овај начин смјеном (I2.22.) се сисћем везаних осцилатора обписан хамилонијаном (I2.18.), своди на суму хамилонијана независних осцилатора (I2.21.). Закон дисперзије за фононе, ј.ј. зависност фреквенце  $\omega$  од шаласног вектора  $\vec{K}$ , даја је формулом (I2.14.).

За мале шаласне векторе имамо линеарни закон дисперзије  $\omega_{\vec{K}} = c \vec{K}$ , где је је брзина звука  $c = a \sqrt{\frac{\Lambda}{M}}$ . За случај шире димензије дозвољене фреквенце су одређене изразом (I2.13) (дешерминанта сисћена). Ова је једначина би-кубна и даје шире дозишивна рјешења за фреквенце  $\omega$ . У случају сложене решешке за б-молекула-штотма у елементарној ћелији једначине штота (I2.13), била би сложенија и давала би 3б рјешења за дозвољене фреквенције фонона.

У случају простије ћелије, све шире фреквенције добијене из (I2.13.) шеће нули када  $\vec{K}$  шећи нули и шакви фонони називају се акустични фонони.

Код сложене решешке за шире фреквенције важи исто правило када  $\vec{K} \rightarrow 0$ , шећи и  $\omega_{\vec{K}} \rightarrow 0$ , а за преостале 3б-3 фреквенције, фреквенције не постају равне нули када  $\vec{K} \rightarrow 0$  и шакви фо-

нони се називају обшичку фонони.

За случај просте просторне решетке, свакој од шри акустичке фреквенције одговара један поларизациони вектор  $\vec{l}_j(\vec{k})$ ,  $j=1,2,3$  и ови вектори задовољавају услов:

$$\vec{l}_j(\vec{k}) \vec{l}_{j'}(\vec{k}) = \delta_{jj'}$$

Ова шри вектора одговарају шрима компонентама звука, једној лонишчнинијој и двеја шрановерзалим.

Хамилонијан система и оператор помака имају следећи изглед:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}j} (b_{\vec{k}j}^+ b_{\vec{k}j} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{\vec{k}j}$$
$$j=1,2,3$$

и:

$$\hat{U}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{k}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{k}j}}} (b_{\vec{k}j} e^{i\vec{k}\vec{n} - i\omega_{\vec{k}j}t} + b_{\vec{k}j}^+ e^{-i\vec{k}\vec{n} + i\omega_{\vec{k}j}t})$$

### I3. ХАМИЛТОНИЈАН ЕКСИТОН-ФОНОН ИНТЕРАКЦИЈЕ

а) Стандардни прилаз

Потичемо од екситонског хамилтонијана у хармонијској апроксимацији и занемарићемо ефекте неодређености.

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_f B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_0, of) B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_0, fo) B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_0, of) = D_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}}(f_0, fo) = M_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta_f B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} \quad (I3.1.a.)$$

Овај хамилтонијан важи за случај када се сви молекули налазе у својим равнотешетним положајима, а што је за случај ниских температура. Када је кристал затријан, молекули у кристалу почињу да осцилују око својих равнотешетних положаја, што можемо изразити на следећи начин:

$$\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{U}_n; \vec{m} \rightarrow \vec{m} + \vec{U}_m,$$

ције су  $\vec{U}_n$  и  $\vec{U}_m$  ѡомераји атома из равнотешетних положаја и представљају векторе који су функције чвора решетке и времена и за ниске температуре интензитет им је мањи од константе решетке.

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} \quad \left. \right\}$$

$$D_{\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_n-\vec{U}_m} = \frac{1}{N} \sum_{k_3} D_{k_3} e^{ik_3(\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_n-\vec{U}_m)} \quad \left. \right\} (I3.2.a)$$

$$M_{\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_n-\vec{U}_m} = \frac{1}{N} \sum_{k_3} D_{k_3} e^{ik_3(\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_n-\vec{U}_m)}$$

$$B_{\vec{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{n}} \quad \text{и} \quad B_{\vec{n}}^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^- e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{n}}$$

Тада:

$$\begin{aligned} \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}}^- &= \frac{\Delta}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} B_{\vec{q}}^+ B_{\vec{k}}^- \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k} - \vec{q})} = \\ &= \frac{\Delta}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} B_{\vec{q}}^+ B_{\vec{k}}^- N \delta_{\vec{k}\vec{q}} = \Delta \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^-, \end{aligned}$$

такође:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}^- &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^- \sum_{\vec{n}\vec{m}} e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_1) + i\vec{U}_{\vec{n}} \cdot \vec{k}_3} \\ &\cdot e^{-i\vec{m} \cdot \vec{k}_3 - i\vec{U}_{\vec{m}} \cdot \vec{k}_3} = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^- \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_1)} \cdot \sum_{\vec{m}} e^{-i\vec{m} \cdot \vec{k}_3} + \\ &+ \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^- \vec{k}_3 \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_1) - i\vec{m} \cdot \vec{k}_3} \end{aligned}$$

Први члан достаје:

$$\sum_{\vec{k}} D_0 B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^-.$$

У другом члану узимамо:

$$\begin{aligned} \vec{U}_{\vec{n}} &= \sum_{\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}_j}}} \cdot \vec{L}_{\vec{q}_j} (b_{-\vec{q}_j} + b_{\vec{q}_j}^+) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{n}} \\ \vec{U}_{\vec{m}} &= \sum_{\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}_j}}} \cdot \vec{L}_{\vec{q}_j} (b_{-\vec{q}_j} + b_{\vec{q}_j}^+) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{m}} \end{aligned}$$

Да се добија:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^- \vec{k}_3 \sum_{\vec{n}\vec{m}} (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_1) - i\vec{m} \cdot \vec{k}_3} = \\ &= \frac{1}{N^{5/2}} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}_j}}} (\vec{k}_3 \vec{L}_{\vec{q}_j}) D_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1}^+ B_{\vec{k}_2}^- (b_{-\vec{q}_j} + b_{\vec{q}_j}^+) \cdot \\ &\cdot \left\{ \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{q} - \vec{k}_1)} \cdot \sum_{\vec{m}} e^{i\vec{m} \cdot \vec{k}_3} - \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{n} \cdot (\vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_1)} \sum_{\vec{m}} e^{-i\vec{m} \cdot (\vec{k}_3 + \vec{q})} \right\} = \\ &= i \sum_{\vec{k}\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}_j}}} D_{\vec{q}} (\vec{q}_j \vec{L}_{\vec{q}_j}) B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{k}}^- (b_{-\vec{q}_j} + b_{\vec{q}_j}^+). \end{aligned}$$

На аналогочан начин добијамо:

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}}^-,$$

прелази у:

$$\begin{aligned} &\sum_{\vec{k}} M_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}}^- + i \sum_{\vec{k}\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}_j}}} \left\{ (\vec{k} \vec{L}_{\vec{q}_j}) M - [(\vec{k} - \vec{q}) \vec{L}_{\vec{q}_j}] \cdot \right. \\ &\left. \cdot M_{\vec{k}-\vec{q}} \right\} B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{k}}^- (b_{-\vec{q}_j} + b_{\vec{q}_j}^+). \end{aligned}$$

На основу овога узимамо:

$$H = H_{\text{eks}} + H_{\text{int}}, \quad (13.3.9)$$

Igje je:

$$H_{\text{eks}} = \sum_{\vec{q}} (\Delta + D_0 + M_{\vec{q}}) B_{\vec{q}}^+ B_{\vec{q}} \quad (13.4.9)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} = & \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}_j}}} \left\{ D_{\vec{q}}(\vec{q}\vec{l}_{\vec{j}}) + M_{\vec{q}}(\vec{k}\vec{l}_{\vec{q}_j}) - \right. \\ & \left. - M_{\vec{q}-\vec{q}}[(\vec{k}-\vec{q})\vec{l}_{\vec{q}_j}] B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{q}} (b_{-\vec{q}_j} + b_{\vec{q}_j}^+) \right\} \end{aligned} \quad (13.5.9)$$

Овај израз представља стандардни израз за хемијонијан експон-фонон интеракције у линеарној апроксимацији по малим помаџима молекула.

### b) Нови приказ

У стандардном приказу експон-фонон интеракције развијали смо по малим помаџима само матричне елементе. Сада ћемо развијати и операнде  $B_{\vec{n}}^+$  и  $B_{\vec{m}}$ , пошто су и они шакађе функције стопаја решења. То значи да имамо хемијонијан (I.3.1.a):

$$H = \sum_{\vec{n}} \Delta B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} D_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} M_{\vec{n}, \vec{m}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{m}} \quad (13.1.b)$$

У овом хемијонијану треба да избршишмо следеће пренсформације (развоје):

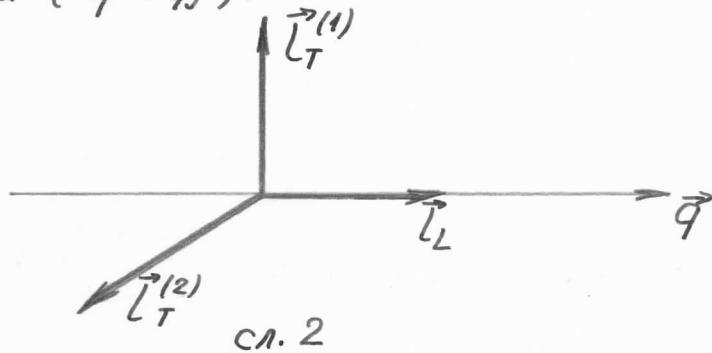
$$\left. \begin{aligned} D_{\vec{n}, \vec{m}} &\equiv D_{\vec{n}-\vec{m}} \rightarrow D_{\vec{n}-\vec{m}} + (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_3} D_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{m}) + i\vec{k}_3(\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}})} \\ M_{\vec{n}, \vec{m}} &\equiv M_{\vec{n}-\vec{m}} \rightarrow M_{\vec{n}-\vec{m}} + (\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_3} M_{\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_3(\vec{n}-\vec{m}) + i\vec{k}_3(\vec{U}_{\vec{n}} - \vec{U}_{\vec{m}})} \\ B_{\vec{n}}^+ &\rightarrow B_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} B_{\vec{k}_1}^+ e^{-i\vec{k}_1 \vec{n} - i\vec{k}_1 \vec{U}_{\vec{n}}} \\ B_{\vec{m}} &\rightarrow B_{\vec{m}+\vec{u}_{\vec{m}}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_2}^+ e^{-i\vec{k}_2 \vec{m} - i\vec{k}_2 \vec{U}_{\vec{m}}} \end{aligned} \right\} \quad (13.2.b)$$

Аналогичним извођењем и аналогним пренсформација—

ма као у стандардном прилазу, екситон-фонон интеракције, долазимо до новог хамилонијана интеракције:

$$H_{int}^{eff} = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{kqj} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{qj}}} (\vec{q} \vec{l}_{qj}) \cdot (\Delta + D_0 + D\vec{q} + M\vec{k} + M\vec{q}) B_k^+ B_q (b_{-qj} + b_{qj}^+) \quad (I.3.3.b)$$

Не треба заборавити да су оператори и матрични елементи развијени у ред до линеарних чланова по стомачима. Као што се види из резултата (I.3.3.b) нови прилаз даје далеко јачу екситон-фонон интеракцију, јер у њему физичке енергије добуђења изолованих молекула  $\Delta$ , која је далеко већа од  $D\vec{q}$  и  $M\vec{q}$ . Осим што интеракција постоји само са понишудиналном трансверзалном трасом, што се види из фактора  $(\vec{q} \vec{l}_{qj})$ .



У стандардном прилазу екситон-фонон интеракције, постоји и интеракција са трансверзалним трасама, мада је она веома слаба.

## *II ГЛАВА*

# **ПРОБЛЕМ ЕКСИТОНСКЕ МИГРАЦИЈЕ**

## II. СРЕДЊИ СЛОБОДНИ ПУТ ЕКСИТОНА

Осциловање кристалне решетке утиче на карактеристике експонских шаласа у кристалу. Посматрано у шаластој слици, шаласи одличних добуђења (експони) и шаласи механичких осцилација прекривају се, па долази до интерференције, која мијења карактеристике једних и других. Формуле које дефинишу ове процесе даје су у I2. и I3. параграфима.

У квазиестичној слици је експоне и фононе смештрамо за квазиестице, ово прекривање шаласа може се схватити као сударење експона и фонона. Очигледно је да експон, сужајући се са фононима, мијења своју дужину чиме изазива различите миграционе процесе, од којих ћемо на исти начин процес дифузије. Међутим, прије него што пређемо на проблем дифузије експона, неопходно је истишати средњи слободни пут експона, а што је он суштински израчунаша дужина, коју експон пређе између два узастопна судара са фононима.

За експонске и фононске шаласе великих шаластих дужина, формулу за средњи слободни пут можемо добити адаптирајући Фрелихову формулу за

средњи слободни пут елекшрона.

Ова формула саси:

$$\frac{1}{\bar{\tau}} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\tau(k)}, \quad (\text{II 1.1.})$$

тјеј је:

$\bar{\tau}$  - средњи слободни пут експонта

$v = \frac{\hbar k}{m}$  - брзина експонта

$k$  - стапни вектор експонта

$m$  - ефективна маса експонта

$\tau(k)$  - бријеме релаксације експонта.

Бријеме релаксације експонта дато је формулом:

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_q \frac{G_f(q)}{G_e(k)} [W_E(k, q) + W_A(k, q)], \quad (\text{II 1.2.})$$

тјеј је:

$G_f(q) = q^2$  - функција дистрибуције фонона

$G_e(k) = k^2$  - функција дистрибуције експонта

$W_E(k, q) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{int}^{(E)} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$

$W_A(k, q) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{int}^{(A)} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$

Функције  $W_E(k, q)$  и  $W_A(k, q)$  представљају ре-  
спективно бјеровашноту емисије фонона и бјерова-  
шиноћу ајсоријације фонона у проценама експон-фон-  
он интеракције. Хамилонијан интеракције  $H_{int}^{(E)}$

дат је у параграфу I.3 и има облик:

$$H_{int}^{(E)} = \frac{i}{VH} \sum_{\vec{k}\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}_j}}} (\vec{q}_j \vec{b}_{\vec{q}_j}) [\Delta + D_0 + D_{\vec{q}} + M_{\vec{k}} + M_{\vec{k}-\vec{q}}] \cdot B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{k}}^- b_{\vec{q}_j}^+ \quad (\text{II 1.4.})$$

— за нови прилаз проблему експон-фонон инте-  
ракције, док у стандарданом случају саси:

$$H_{int}^{(E)} = \frac{i}{VN} \sum_{\vec{k}\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}_j}}} \left\{ D_{\vec{q}}(\vec{q}\vec{l}_j) + M_{\vec{k}}(\vec{k}\vec{l}_{\vec{q}_j}) - M_{\vec{k}-\vec{q}}[(\vec{k}-\vec{q})\vec{l}_{\vec{q}_j}] \right\} B_{\vec{k}\vec{q}}^+ B_{\vec{k}} b_{\vec{q}_j}^+ \quad (II.5.)$$

Део хамилионијана интеракције која одговара апсорбицији фонона, има облик:

$$H_{int}^{(A)} = \frac{i}{VN} \sum_{\vec{k}\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}_j}}} (\vec{q}\vec{l}_{\vec{q}_j})(\Delta + D_0 + D_{\vec{q}} + M_{\vec{k}} + M_{\vec{k}-\vec{q}}) B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{k}} b_{\vec{q}_j}^+ \quad (II.6)$$

У новом приказу. У стандардном, ова формула гласи:

$$H_{int}^{(A)} = \frac{i}{VN} \sum_{\vec{k}\vec{q}_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}_j}}} \left\{ D_{\vec{q}}(\vec{q}\vec{l}_j) + M_{\vec{k}}(\vec{k}\vec{l}_{\vec{q}_j}) - M_{\vec{k}-\vec{q}}[(\vec{k}-\vec{q})\vec{l}_{\vec{q}_j}] \right\} \cdot D_{\vec{k}-\vec{q}} B_{\vec{k}} b_{-\vec{q}_j} \quad (II.7.)$$

За случај емисије, иницијално стање садржи  $\vec{p}_{\vec{q}_j}$  фонона и један експонт са шапасним вектором  $\vec{k}$ . Финално стање има  $\vec{p}_{\vec{q}_j} + 1$  фонона и један експонт са импулсом  $\vec{k}-\vec{q}$ . У случају апсорбиције иницијално стање је исто, док је финално стање шакво да у њему имамо  $\vec{p}_{\vec{q}_j} - 1$  фонон и један експонт са шапасним вектором  $\vec{k}-\vec{q}$ .

Делте функције које изражавају закон одређивања енергије гласе експлицитно за случај емисије:

$$\begin{aligned} \delta_{(E_f - E_i)}^{(E)} &= \delta[E_e(\vec{k}-\vec{q}) - E_e(\vec{k}) + \hbar c q] \\ \delta_{(E_f - E_i)}^{(A)} &= \delta[E_e(\vec{k}-\vec{q}) - E_e(\vec{k}) - \hbar c q] \end{aligned} \quad (II.8.)$$

Ако се за експонт узме квадратни закон дисперзије:

$$E_e(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

онда формуле (II.7.) постају:

$$\left. \begin{aligned} \delta_{(E_f - E_i)}^{(E)} &= \frac{2m}{\hbar^2 q_0} [\delta(q) + \delta(q - q_0)] \\ \delta_{(E_f - E_i)}^{(A)} &= \frac{2m}{\hbar^2 \tilde{q}_0} [\delta(q) + \delta(q - \tilde{q}_0)] \end{aligned} \right\}, \quad (III.9.)$$

Igje je:

$$\left. \begin{aligned} q_0 &= \frac{2m}{\hbar} (v \cos \theta - c) \\ \tilde{q}_0 &= \frac{2m}{\hbar} (v \cos \theta + c) \end{aligned} \right\}. \quad (III.10.)$$

У формулама (III.10.)  $c$ -је брзина звука у кристалу,  $\theta$ -је угао између правца кретања екцишона и фонона. Чланови у (III.9.) који садрже  $\delta(q - q_0)$  и  $\delta(q - \tilde{q}_0)$  показују да су процеси емисије могући ако се угао  $\theta$  креће од  $0$  до  $\arccos \frac{c}{v}$ , док су процеси апсорбиције могући ако се  $\theta$  креће од  $0$  до  $\arccos(-\frac{c}{v})$ . Одавде је јасно да су процеси емисије могући само ако је брзина екцишона већа од брзине звука. Процеси апсорбиције могући су за произвољне брзине екцишона.

Моћемо србо израчунати функције  $W_E$  и  $W_A$  ако су хамилтонијанси интеракције дати по формулама из новог прилога проблему екцишон-фонон интеракције. Помоћу је  $\Delta \gg D$  и  $M$ , мићемо у хамилтонијанцу интеракције задржати само члан са  $\Delta$ . Постије кратки рачуна добијамо:

$$\left. \begin{aligned} W_{(k,q)}^{(E)} &= \frac{1}{N} \frac{2\pi m \Delta^2}{\hbar^2 M c q_0} q (n_q + 1) [\delta(q) + \delta(q - q_0)] \\ W_{(k,q)}^{(A)} &= \frac{1}{N} \frac{2\pi m \Delta^2}{\hbar^2 M c \tilde{q}_0} q \cdot n_q [\delta(q) + \delta(q - \tilde{q}_0)] \end{aligned} \right\}. \quad (III.11.)$$

На основу формула (III.11.) и формуле (III.2.)

можемо израчунати бријеме релаксације експон-  
тна. При што је шреда узети у обзир да је:

$$\Pi_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar c q}{k_B T}} - 1}, \quad (\text{II.12.})$$

изје је:

$K_B = 1,638 \cdot 10^{-16}$  erg/ $^\circ\text{K}$  - Болцманова константа,  
 $T$ -абсолутна температура.

Ако у формулама (II.12.) пређемо са суме  
на интеграл по правилу:

$$\sum_q \rightarrow \frac{N q^3}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{q_{\max}} q^2 dq$$

при чему је једно водиши рачуна да угао  $\theta$  има обра-  
нучења и што:

$\theta \in (0, \arccos \frac{c}{v})$  - за емисију

$\theta \in [0, \arccos(-\frac{c}{v})]$  - за акоресију.

Ми за бријеме релаксације добијамо следећи  
израз:

$$\frac{1}{T(k)} = \frac{8q^3 m \Delta^2 k^2}{\pi \hbar^2 m c} \left[ \int_{c/v}^1 \left(x - \frac{c}{v}\right)^4 dx + \right. \\ \left. + \int_{-c/v}^1 \frac{\left(x - \frac{c}{v}\right)^4 dx}{e^{\frac{2\hbar ck}{k_B T} \left(x - \frac{c}{v}\right)} - 1} + \int_{-c/v}^1 \frac{\left(x + \frac{c}{v}\right)^4 dx}{e^{\frac{2\hbar ck}{k_B T} \left(x + \frac{c}{v}\right)} - 1} \right] \quad (\text{II.13.})$$

Први члан одговара спонтаној емисији фо-  
нона и када је температура равна нули, једино  
је он различит од нуле. Друга два члана дају тем-  
пературску зависност бремена релаксације,  
а самим тим и средњег слободног пуша.

Ми ћемо прво израчунати средњи слобо-  
дни пуш на абсолутној нули. Тада средњи слободни

пучи бити на основу формуле (II 1.1.) и формуле (II 1.13.)

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{8a^3 m^2 \Delta^2}{\pi \hbar^3 \mu c} \frac{1}{N} \sum_{K} K \int_{c/v}^1 (x - \frac{c}{v})^4 dx \quad (II 1.14.)$$

Пошто је за процес сопстване емисије минимална дозвољена бриједност брзине експулсона равна брзини звука, што у суми до  $\vec{K}$  (II 1.14.) интензитет шапасног вектора експулсона не иде од нуле, већ од

$$K_{min} = \frac{mc}{\hbar}. \quad (II 1.15.)$$

Ако  $\frac{c}{v}$  занемаримо у односу на јединицу, онда за  $\bar{\lambda}_0$  добијамо следећи израз:

$$\bar{\lambda}_0 = \frac{5\pi^3 \hbar^3 mc}{a^6 m^2 \Delta^2 K_{max}^4} \quad (II 1.16.)$$

Максималну бриједност шапасног вектора одредитељмо из услова да је

$$\frac{1}{N} \sum_{K} 1 = 1,$$

или

$$\frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{K_{max}} K^2 dK = 1.$$

Ово за  $K_{max}$  даје бриједност

$$K_{max} = \frac{1}{a} \sqrt[3]{6\pi^2}, \quad (II 1.17.)$$

шако да средњи слободни пуч експулсона при  $T=0$  можемо рачунаши по формулама:

$$\bar{\lambda}_0 = \frac{5\pi \hbar^3 mc}{6a^2 m^2 \Delta^2} \frac{1}{\sqrt[3]{6\pi^2}} \quad (II 1.18.)$$

Сада ћемо израчунати бријеме релаксације и средњи слободни пуч експулсона на ниским температурама. Као и на нулију температуру за-

немаритемо  $\frac{C}{V}$  у односу на јединицу шако да формулa (III.12.) приближно постаје:

$$\frac{1}{T(K)} = \frac{8a^3 m \Delta^2 K^2}{\pi \hbar^2 \mu c} \left[ \frac{1}{5} + 2 \int_0^1 \frac{x^4 dx}{e^{\frac{2\hbar c k x}{K_B T}} - 1} \right] \quad (\text{III.19.})$$

Пошто је  $T \approx 0$ , налазимо:

$$T(K) = \frac{5\pi \hbar^2 \mu c}{8a^3 m \Delta^2 K^2} \left[ 1 - 10B_4 \left( \frac{K_B T}{2\hbar c k} \right)^5 \right], \quad (\text{III.20.})$$

Тјеје је:

$$B_4 = \int_0^\infty \frac{y^4 dy}{e^y - 1} = 1,0823 \cdot 23,146 = 25,051 \quad (\text{III.21.})$$

Ова формулa има смисла док је

$$10B_4 \left( \frac{K_B T}{2\hbar c k} \right)^5 \ll 1.$$

Као што видимо бријеме релаксације се смањује са порастом температуре и то пропорционално петом степену апсолутне температуре. На основу формулa (III.20.) и (III.2.) може се израчунати и средњи слободни пут на ниским температурама. Овај рачун нећемо изводити, јер очигледно је да ће и средњи слободни пут спадати са порастом температуре и то пропорционално петом степену апсолутне температуре.

Ограничимо се сада областима високих температура и узмимо у формулa (III.19.) да је:

$$\frac{2\hbar c k x}{K_B T} \ll 1.$$

Тада се први члан у формулa (III.19.) може занемарити, док експоненцију можемо развити уред

$$e^{\frac{2\hbar c k x}{K_B T}} \approx 1 - \frac{2\hbar c k x}{K_B T} \quad (\text{III.22.})$$

У овом случају израз за брије релаксације по-  
сни:

$$\bar{\tau}(K) = \frac{\pi \hbar^4 \mu c^2}{2a^3 m^2 \Delta^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{K_B T}} \quad (\text{II 1.23.})$$

На високим температурама средње брије  
релаксације и средњи слободни пут експонта не  
израчунавају се усредњавањем до  $\bar{K}$ , ш. на осно-  
ву формуле (II 1.2.), већ шако што се снажна  
брзина експонта  $V$  замјењује средњом терми-  
чком брзином, која се добија из познатог услова

$$\frac{1}{2} m \bar{v}^2 = \frac{3}{2} K_B T,$$

одакле је

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{3 K_B T}{m}} \quad (\text{II 1.24.})$$

Према томе, на основу формуле (II 1.22.) и  
(II 1.24.), налазимо

$$\bar{\tau} = \frac{\pi \hbar^4 \mu c^2}{2a^3 m^2 \Delta^2} \frac{1}{\sqrt{K_B T}} \quad (\text{II 1.25.})$$

И коначно:

$$\bar{\tau} = \frac{\pi \hbar^4 \mu c^2}{2\sqrt{3} m^{3/2} \Delta^2} (K_B T)^{-3/2} \quad (\text{II 1.26.})$$

Средњи слободни пут добијамо као

$$\bar{\lambda} = \bar{\tau} \bar{v} \quad (\text{II 1.27.})$$

или, с обзиром на (II 1.24.) и (II 1.26.), добијамо:

$$\bar{\lambda} = \frac{\pi \hbar^4 \mu c^2}{2a^3 m^2 \Delta^2} \frac{1}{K_B T} \quad (\text{II 1.28.})$$

Као што видимо, на високим температура-  
ма средњи слободни пут експонта је пропорциона-  
лан  $T^{-1}$ , док је брије релаксације пропорцио-  
нално  $T^{-3/2}$ .

У случају стандардног штрејчнана екситон-фонон интеракције, формуле (III.18.), (III.20.), (III.26.) и (III.28.) постају:

$$\bar{\lambda}_0 = \frac{5\pi\hbar^3 mc}{6a^2 m^2 (D_0 + M_0)^2} \cdot \frac{1}{\sqrt[3]{6\pi^2}} \quad (\text{III.29.})$$

$$\bar{\tau}_{(k)} = \frac{5\pi\hbar^2 mc}{8a^3 m (D_0 + M_0)^2 k^2} \left[ 1 - 10B_4 \left( \frac{K_B T}{2\hbar c k} \right)^5 \right] \quad (\text{III.30.})$$

$$\bar{\tau} = \frac{\pi\hbar^4 mc^2}{2\sqrt{3} m^{3/2} (D_0 + M_0)^2} (K_B T)^{-3/2} \quad (\text{III.31.})$$

$$\bar{\lambda} = \frac{\pi\hbar^4 mc^2}{2a^3 m^2 (D_0 + M_0)^2} \frac{1}{K_B T} \quad (\text{III.32.})$$

Треба напоменути да су формуле добијене из стандардног хамилтонијана екситон-фонон интеракције.

$$H_{\text{int}}^{\text{stand}} = \frac{i}{VN} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar q}{2mc\omega_{\vec{q}}}} \left[ D_{\vec{q}}(\vec{q} \cdot \vec{L}_{\vec{q}}) + M_{\vec{k}}(\vec{k} \cdot \vec{L}_{\vec{q}}) - M_{\vec{k}-\vec{q}}(\vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{L}_{\vec{q}} \right] B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{k}} (b_{-\vec{q}} + b_{\vec{q}}^+) \quad (\text{III.33.})$$

За интеракцију са поништудиналним фононима и у априксимацији малих спасних вектора када је

$$D_{\vec{q}} \approx D_0 \text{ и } M_{\vec{q}} \approx M_0.$$

Тада (III.33.) тласи:

$$H_{\text{int}}^{\text{stand}} = \frac{i}{VN} (D_0 + M_0) \sum_{\vec{k}\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar q}{2mc}} B_{\vec{k}-\vec{q}}^+ B_{\vec{k}} (b_{-\vec{q}} + b_{\vec{q}}^+) \quad (\text{III.34.})$$

Као што се види из формула за  $\bar{\tau}$  и  $\bar{\lambda}$ , разуђавши нове теорије добијају се као:

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{ново}} &= \lambda_{\text{станд}} \left( \frac{D_0 + M_0}{4} \right)^2 \\ \bar{\tau}_{\text{ново}} &= \bar{\tau}_{\text{станд}} \left( \frac{D_0 + M_0}{4} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{III.35.})$$

Ако узмемо да је  $\Delta$  њен пунја веће од сума  $(D_0 + M_0)$ , што је усљеди оштималан случај који може да се појави у кристалу антирачена, онда видимо да су до нове теорије средњи слободни пушеви и времена релаксације око 25 пуша мањи него што даје стандардна теорија.

На крају овога параграфа датемо табелу вриједности средњег слободног пуша при  $T=0,39$  разне вриједности  $\Delta$  и  $C$ , при чemu ћемо дати и вриједности по новој теорији и вриједности по стандардној теорији.

Дати подаци:

$$M = 2 \cdot 10^{-22} \text{ gr}$$

$$m = 10^{-27} \text{ gr}$$

$$C = 5 \cdot 10^5 \text{ cm s}^{-1}$$

$$a = 5 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

$$K_B = 1,638 \cdot 10^{-16} \text{ erg/grad}$$

$$\hbar = 1,02 \cdot 10^{-27} \text{ erg s}$$

$$\Delta_1 = 2 \cdot 10^{-12} \text{ erg}$$

$$\Delta_2 = 3 \cdot 10^{-12} \text{ erg}$$

$$\Delta_3 = 4 \cdot 10^{-12} \text{ erg}$$

$$\Delta_4 = 5 \cdot 10^{-12} \text{ erg}$$

$$\Delta_5 = 6 \cdot 10^{-12} \text{ erg}$$

$$\bar{\lambda}_{\text{stand}} \approx 25 \bar{\lambda}_{\text{ново}}$$

Таблица Т.1.

Реж. др.	$\Delta \cdot 10^{-12}$ [erg]	$\bar{\lambda}_o$ [ $\text{\AA}$ ]		$\bar{\lambda}_o$ [ $a$ ]	
		новы при- лаз	старк. при- лаз	новы при- лаз	старк. прилаз
1	2	680	17000	163	3400
2	3	302	7550	60	1510
3	4	170	4250	34	850
4	5	108	2700	22	540
5	6	75	1875	15	375
$\bar{\lambda}_o = \frac{\sum \bar{\lambda}_{oi}}{5}$		267	6675	53	1335

## II2. О ДИФУЗИЈИ У ОПШТЕ

Прије него што пребјемо на процес дифузије експулсивна, обдје ћемо се упознати са елементима теорије транспорних појава у гасовима и елементима теорије дифузије.

Хаотично кретање молекула у гасу доводи до њиховог неупрекидног мијешања, због штоа продиру-дифундују један у други два различита гаса који су у додиру један са другим. Прелажење молекула ја-са са једног мјесета на друго такође лежи у основи механизма унутрашњег транспорта и превоза стопљене у гасовима. Све те појаве, везане за кретање молеку-ла, називају се транспортне појаве.

У бријеме развијања кинетичке теорије га-сова, истакнути је следећа замјерка: ако су брзине молекула сличарно реда неколико стотина метара у секунди, као што што захисијева кинетичка тео-рија, онда би узајамно продирање тредало да се де-шава веома брзо. Ако се, на пример, на једном кра-ју соде отвори посуда са миришљавом супстан-цијом, мирис би морао да се одмах осјети у ци-јелој соди, пошто је молекулама супстанције пошре-дан само дио секунде да пребу пуш једнак ди-мензијама соде. Међутим, познато је да се дифузија гасова по атмосферском притиском

дешава сноро, па се сноро шире и мириси. У шим расу-  
бичавима грешка је у томе што није узето у обзир  
да се молекули, због мање дужине слободнос пуша при  
атмосферском притиску, неочекивано сударају са  
другим молекулама и, на овај начин, „шакају у чје-  
сту“.

Без обзира на велику брзину, молекул се за  
једну секунду удаљи од мјеста где се налазио са-  
мо мало, његов пуш представља веома сложену и  
затрпану изломљену линију.

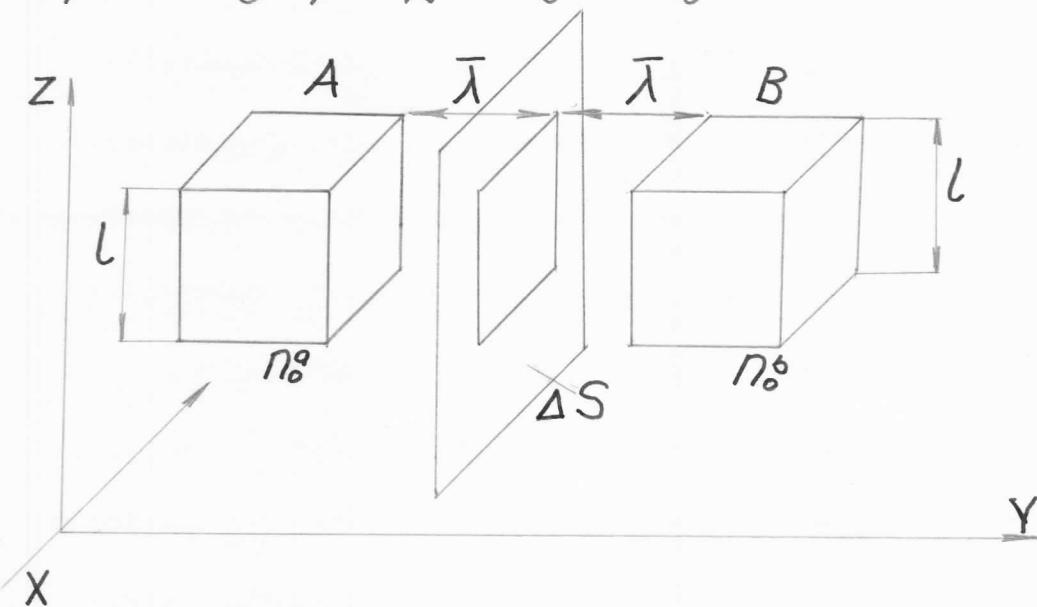
Испитајмо најприје појаву дифузије.

Посматрања покazuју да се при дифузији  
кроз неку површину  $\Delta S$  преноси утолико већа  
маса  $\Delta M$  уколико је већа површина  $\Delta S$ ,  
уколико је већи интервал времена  $\Delta t$  посматра-  
ња дифузије и уколико се брже мијења, у оправ-  
чу нормалном на  $\Delta S$ , парцијална супстанца  $P$  га-  
са који дифунђује. Уведимо осу  $OY$  нормално на  
површину  $\Delta S$ ; нека се парцијалне супстанце посма-  
траног сада у ћије шаке, које су на расстоја-  
њу  $\Delta Y$  једна од друге, разликују за  $dP$ ; тада  
величина  $dP/dY$  карактерише промјену супстанце га-  
са  $P$  по јединици дужине у правцу осе  $OY$ ; ша се  
величина назива градијент супстанце. Према речено-  
му,  $\Delta M$  је сразмјерно градијенту супстанце, површи-

ни  $\Delta S$  и времену  $\Delta t$ :

$$\Delta M = -D\left(\frac{\Delta P}{\Delta y}\right)\Delta S \Delta t. \quad (\text{II 2.1.})$$

Величина  $D$ , која зависи од брзине ћаса и од услоја пошто којима се он налази, назива се којфицијент дифузије. Знак минус означава да се ћаса преноси у правцу опадања концентрације.



Сл. 3.

Формулa (II 2.1.) карактерише појаву дифузије са макроскојском стаповином.

Размотримо сада појаву дифузије са стаповином молекуларно-кинетичке теорије гасова. Ради једноставности посматраћемо два различита ћаса који узајамно спадирају један у други и који имају шолико сличне молекуле да се њихове масе и ефикасни пресеци могу сматрати једнаким. Такви молекули ће имати, при једнаким условима, једнаке слободне пучеве и једнаке брзине.

Израчујмо број молекула једнога од ових тачка, који пролазе кроз површину  $\Delta S$  (сл.3) нормалну на осу  $OY$  дуж које се мења густина гаса  $\rho$ . Извојимо, у мислима, коцкасте зајремине  $A$  и  $B$  на десној члебој сјевани од површине, које су од ње на распојављима једнаким средњој вриједностима слободног пуша  $\lambda$ . Тада се може сматрати да ће молекули, који излијећу из било које од ових коцкица, без судара долешћи до површине  $\Delta S$ .

Нека су дочне сјеване коцкице  $A$  и  $B$  паралелне површини  $\Delta S$  и једнаке са њом по величини; означимо са  $l$  дужину ивице коцкице, очигледно је  $l^2 = \Delta S$ . Означимо са  $\bar{\rho}_A$  број молекула посматраног гаса који се налази у коцкици  $A$ . Услед поштуне хаптичности кретања молекула, може се сматрати да се  $1/3$  оних молекула креће дуж осе  $OY$ , од чега половина у позитивном смјеру осе  $OY$  и половина у негативном смјеру осе  $OY$ . На шај начин, од  $\bar{\rho}_A$  молекула који се налазе у коцкици  $A$ ,  $1/6 \bar{\rho}_A$  молекула креће се ка површини  $\Delta S$ . Пошто је површина  $\Delta S$  на распојављу  $\bar{l}$  од коцкице, сви ши молекули ће досете до површине  $\Delta S$  без судара и први ће кроз њу. Вријеме  $\delta t$ , у шоку код  $1/6 \bar{\rho}_A$  молекула прорују кроз површину  $\Delta S$ , једнако је интervалу за који последњи молекули, који излијећу из коцки-

које је у правцу површине  $\Delta S$ , касније у правцу од ових; оштудаје  $\delta t = \frac{L}{\bar{v}}$ , где је  $\bar{v}$  - средња арифметичка брзина молекула. На тај начин број молекула  $\Delta \Pi_A$ , који у јединици времена пролази кроз површину  $\Delta S$  слијева надесно, износи:

$$\Delta \Pi_A = \frac{1/6 \Pi_A}{\delta t} = \frac{1}{6} \Pi_A \frac{\bar{v}}{L}.$$

Означимо са  $\Pi_0^a$  број молекула по јединици за време на ономе мјесецу где се налази коцкица  $A$ , што је  $\Pi_A = \Pi_0^a L^3$  и израз за  $\Delta \Pi_A$  може се написати у облику:

$$\Delta \Pi_A = \frac{1}{6} \Pi_A \frac{\bar{v}}{L} = \frac{1}{6} \Pi_0^a \bar{v} L^2 = \frac{1}{6} \Pi_0^a \bar{v} \Delta S \quad (II 2.2.)$$

На постепено исти начин добијамо да је број молекула  $\Delta \Pi_B$  који у јединици времена пролазе кроз површину  $\Delta S$  здесна налијево:

$$\Delta \Pi_B = \frac{1}{6} \Pi_0^b \bar{v} \Delta S, \quad (II 2.3.)$$

Тада је  $\Pi_0^b$  број молекула по јединици за време на мјесецу где се налази коцкица  $B$ . Оштуда разлика између броја молекула који пролазе кроз површину  $\Delta S$  слијева надесно и здесна налијево у неком произвољном интервалу времена  $\Delta t$  износи:

$$\Delta \Pi = \frac{1}{6} \bar{v} (\Pi_0^a - \Pi_0^b) \Delta S \Delta t \quad (II 2.4.)$$

Масу  $\Delta M$ , која се преноси кроз површину  $\Delta S$  за вријеме  $\Delta t$  слијева надесно (у позитивном смјеру осе  $OY$ ) добијамо када помножимо број пренесених молекула  $\Delta \Pi$  са масом једног молекула  $m$ , одакле је:

$$\Delta M = m \Delta P = \frac{1}{6} \bar{v} m (n_0^b - n_0^a) \Delta S at \quad (II 2.5.)$$

Разлика  $n_0^b - n_0^a$  једнака је брзини промјене броја молекула до јединици за време у смјеру  $OY$ , што величини  $\Delta n / \Delta y$  помноженој са распојањем између коцкица  $A$  и  $B$ ; што распојање износи  $2\bar{\lambda}$ , одакле је:

$$n_0^b - n_0^a = \frac{\Delta n_0}{\Delta y} \cdot 2\bar{\lambda}.$$

Замјенивши ову вриједност  $n_0^b - n_0^a$  у (II 2.5.), добијамо:

$\Delta M = -\frac{1}{3} \bar{v} \bar{\lambda} m \frac{\Delta n_0}{\Delta y} \Delta S at$ , или  $m \frac{\Delta n_0}{\Delta y} = \frac{\Delta (mn_0)}{\Delta y}$ ;

величина  $m n_0$  једнака је маси посматраног гаса у јединици за време, што састоји се од  $\rho$ , одакле је:

$$m \frac{\Delta n_0}{\Delta y} = \frac{\Delta \rho}{\Delta y},$$

а одавде:

$$\Delta M = -\frac{1}{3} \bar{v} \bar{\lambda} \left( \frac{\Delta \rho}{\Delta y} \right) \Delta S at. \quad (II 2.6.)$$

Из обе формуле добијамо, у согласности са изразом (II 2.1.) да је маса  $\Delta M$  која се преноси, уједно сразмерна градијенту састојине  $\Delta \rho / \Delta y$ , површини  $\Delta S$  и времену  $at$ . Формуле (II 2.6.) и (II 2.1.) се међусобно подударају ако се стави:

$$D = \frac{1}{3} \bar{v} \bar{\lambda} = \frac{1}{3} \bar{v} \bar{v}^2. \quad (II 2.7.)$$

На овај начин налази се да је коефицијент дифузије  $D$  повезан са средњом брзином кретања  $\bar{v}$  и средњом дужином слободног пута  $\bar{\lambda}$ . Средња брзина кретања молекула  $\bar{v}$  сразмерна је са

$\sqrt{\frac{I}{M}}$ , а дужина слободног пута  $\lambda$  не зависи, при константној температури. Оваште слиједи да је при затребању датог гаса при константној затримини коефицијент дифузије  $D \sim \sqrt{T}$ . За различите гасове који се састоје из молекула једнаких димензија, на једнаким температурама и притисцима,  $D \sim \frac{1}{\sqrt{M}}$ . Средња дужина слободног пута молекула  $\lambda$  обично је сразмјерна притиску гаса, због што је и коефицијент дифузије, обично сразмјеран притиску гаса  $p$ :  $D \sim \frac{1}{p}$ . Обје  $p$  означава укупан притисак смјеше оба гаса. Дифузија се врши брже у разријеђеним гасовима, него у гасовима под високим притисцима.

### III. КОЕФИЦИЈЕНТ ДИФУЗИЈЕ НА ВИСОКИМ И НИСКИМ ТЕМПЕРАТУРАМА

Резултати који су добијени у параграфима (III.1.) и (III.2.) омогућују да лако одредимо којефцијент дифузије експоненцијално на високим и ниским температурима.

У параграфу (III.2.) је показали смо да се којефицијент дифузије даје као:

$$D = \frac{1}{3} \bar{V} \bar{\lambda} = \frac{1}{3} \bar{V}^2 \quad (\text{III.1.})$$

На основу формуле (III.18.), на ниским температурима је:

$$\bar{\lambda} = \frac{5\pi\hbar^3 mc}{6a^2 m^2 \Delta^2} \cdot \frac{1}{\sqrt[3]{6\pi^2}} \quad (\text{III.2.})$$

Квадратни средње брзине израчунат ћемо као

$$\bar{V}^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} K^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{K_{\max}} K^4 dK =$$

$$= \frac{\hbar^2 a^3}{10\pi^2 m^2} K_{\max}^5 = \frac{\hbar^2 a^3}{10\pi^2 m^2} \frac{1}{a^5} \sqrt[3]{6^5 \pi^10}$$

$$\bar{V}^2 = \frac{6^{5/3} \pi^{4/3} \hbar^2}{10 m^2 a^2} \quad (\text{III.3.})$$

Према томе, на ниским температурима којефицијент дифузије се може сматрати константним и равним:

$$D = \frac{5\pi}{3\sqrt{60}} \frac{\hbar^4 mc}{a^3 m^3 \Delta^2} \quad (\text{III.4.})$$

Према стандардном прилазу, којефицијент дифузије у овом случају, који ћемо обилежити са  $D_{\text{stand}}$ , добија се као:

$$D_{\text{stand}} = D \left( \frac{\Delta}{D_0 + M_0} \right)^2. \quad (\text{II 3.5.})$$

На високим температурама, на основу формуле (II 1.28.):

$$\bar{\lambda} = \frac{\pi \hbar^4 M C^2}{2 \alpha^3 m^2 \Delta^2} \frac{1}{K_B T}, \quad (\text{II 3.6.})$$

gde je

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{3 K_B T}{m}}. \quad (\text{II 3.7.})$$

На основу обога:

$$D = \frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{\pi \hbar^4 M C^2}{\alpha^3 m^{5/2} \Delta^2} \frac{1}{\sqrt{K_B T}}. \quad (\text{II 3.8.})$$

У стандардном прилазу проблему екситон-фонон интеракције имамо:

$$D_{\text{stand}} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{\pi \hbar^4 M C^2}{\alpha^3 m^{5/2} (D_0 + M_0)^2} \frac{1}{\sqrt{K_B T}}. \quad (\text{II 3.9.})$$

Израчунатемо сада количину дифундовање материје која је на основу резултата параграфа (II.2.) дати са:

$$\Delta M = -D \frac{\partial \rho}{\partial y} \Delta S dt. \quad (\text{II 3.10.})$$

Ако својствен извор створи у кристалу на мјесецу  $y=0$ ,  $N_0$ -екситона онда се може доказати да са повећањем  $y$  број екситона спада по закону (види: Фриш и Тиморјева „Курс обште физике”, стр. 183):

$$N = N_0 e^{-\frac{y}{\lambda}} \quad (\text{II 3.11.})$$

Тада је:

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{N}{N_0 \alpha^3}, \quad (\text{II 3.12.})$$

тј. је  $N$ -број молекула у кристалу. Ако убедимо концентрацију екситона  $C = \frac{N}{N_0}$ , онда је:

- 45 -

$$P(y) = C_0 e^{-y/\lambda} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \\ C_0 = \frac{N_0}{Na^3} \quad C = \frac{N}{Na^3} \quad (II.3.13.)$$

Toga je:

$$\frac{\partial P}{\partial y} = -\frac{1}{\lambda} C_0 e^{-y/\lambda} \quad (II.3.14.)$$

На основу формулa (II.3.4.), (II.3.10) и (II.3.14.)

на ниским шемијерашурама количина дифунђовање материје не зависи од шемијерашуре и даја је формулом:

$$\Delta M = \frac{25}{18\sqrt{60}\sqrt{6}} \cdot \frac{k'' M^2 C^2 \tau^{4/3}}{a^5 m^5 \Delta^4} \Delta S \Delta t. \quad (II.3.15.)$$

У стандардном прилазу

$$\Delta M_{\text{stand}} = (\Delta M)_{(II.3.15.)} \cdot \left( \frac{\Delta}{D_0 + M_0} \right)^2 \quad (II.3.16.)$$

На високим шемијерашурама количина дифунђовање материје је пропорционална квадратном коријену из шемијерашуре:

$$\Delta M = \frac{C_0}{\sqrt{3m}} \sqrt{k_B T} e^{-y/\lambda} \cdot \Delta S \Delta t \quad (II.3.17.)$$

У стандардном прилазу количина дифунђовање материје се добија множењем формулe (II.3.17.) фактором  $\left( \frac{\Delta}{D_0 + M_0} \right)^2$ .

## ЗАКЉУЧАК

Анализа процеса миграције Френкелових експоната показала је следеће:

а) средњи слободни пут експоната на асолу-  
тној температури креће се између 15 и 150 константи  
решешике. Стандардни прилаз даје, за средњи  
слободни пут експоната око 25 пута већу ври-  
једносћь, од новог прилаза;

б) на ниским температурама средњи сло-  
бодни пут се смањује са порастом температу-  
ре и то пропорционално њеном степеном снажену;

с) на високим температурама средњи  
слободни пут је обратно пропорционалан првом  
степену асолутне температуре;

д) кофицијент дифузије експоната на  
ниским температурама практично не зависи  
од температуре, док је на високим обратно  
пропорционалан квадратном корену из ас-  
олутне температуре;

е) количина дифундованих експоната је  
на ниским температурама практично констан-  
тна (независна од температуре), док је на ви-  
соким температурама пропорционална темпера-  
турској функцији облика  $T^{1/2} e^{-Ty}$ , где је  $y$ -ра-  
сплође односно максималне концентрације експоната.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В.М. Агранович „Теория экситонов“ Москва 1968.
2. А.С. Давыдов „Квантовая механика“ Москва 1973.
3. А. Исихара „Статистическая физика“ Москва 1973.
4. Л.Д. Пондай, Е.М. Лифшиц „Квантовая механика“,  
превод, Београд 1960.
5. H. Fröhlich: Proc. Roy. Soc. 160A. 230 (1937.)
6. С.Е. Фриш, А.В. Тиморјева „Курс общей физике“  
превод, Београд 1962.

