Prirodno-matematički fakultet

Diplomski rad

Novi Sad

Eksitoni u polubeskonačnim strukturama i u tankim filmovima

STUDENT; ADAMOVIĆ VLADIMIR

NAJISKRENIJE SE ZAHVALJUJEM

PROFESORU Dr. BRATISLAVU TOŠIĆU.

UVOD

Izučavanje strukture sa narušenom simetrijom oduvek jepredstavljalo predmet interesovanja kako teoretskih tako i eksperimentalnih fizičara. Ovo interesovanje pravda se time što u praksi nema idealnih kristala a to znači takvih kristala čije su dimenzije beskonačne, i koji nemaju nikakve unutrašnje defekte u vidu primesa ili vakancija. S druge strane, u odnosu na idealne strukture, kristali sa narušenom simetrijom i njihove osobine relativno su loše izučeni i to iz opravdanih razloga. Za teoretičare ti razlozi su teškoće matematičke prirode. Lako se vidi da bilo kakav konkretan račun zahteva upotrebu računara i da je broj problema koji se mogu analitički rešiti veoma mali. Za eksperimentalne fizičare izučavanje strukture sa narušenom simetrijom i njihovih osobina zahteva veoma dugu prethodnu pripremu, koja se u slučaju da kristal ima unutrašnje defekte, sastoji u odredjivanju mesta i tipa defekta, priprema se sastoji u tome što se dugim i mukotrpnim procesom raščenja kristala formiraju filmovi potrebne debljine. Cilj ovog diplomskog rada je, da se teorijski ispitaju stanja Frenkelovih eksitona u polubeskonačnim molekularnim kristalima i u tankim molekularnim filmovima.

Treba napomenuti da u radovima Pecara i njegovih učenika vršena analiza eksitonskih stanja u polubeskonačnim kristalima, ali cela teorija nije bila realizovana u reprezentaciji druge kvantizacije, pa je to izazvalo izvestan zastoj u teoriji, jer je koordinatna reprezentacija koju su oni koristili bila suviše glomazna da bi se na osnovu nje proračunali bilo kakvi fizički efekti.

Što se tiče tankih filmova, do sada teorija harmonijskih eksitonskih stanja u literaturi nije formulisana.

GLAVA I.

Osnovni pojmovi teorije eksitona

I. OSNOVNI POJMOVI TEORIJE EKSITONA

Jedan od problema kojim su se fizičari bavili i kojim se i danas bave je problem apsorpcije, emisije i prenošenje energije kroz kristal. Smatra se da energiju prenose odredjene kvazičestice, a u fizici čvrstog stanja postoji čitav niz ovakvih kvazičestica. Jedna od tih je i eksiton. Prve teorije dali su Frenkel i Pajersl za molekularne, a Vanije i Mot za poluprovodničke kristale.

Eksiton nastaje onog trenutka kada elektron u valentnoj zoni primi odredjenu energiju i prelazi u provodnu zonu i ostaje vezan kulonovskim silama za šupljinu koja je nastala njegovim odlaskom. Ovakav kompleks elektron-šupljina, koja se ponaša kao neutralna celina naziva se eksiton. On se može pomeriti kroz kristal kao talas prenoseći energiju. Energija eksitona može preći u drugi vid energije i tom prilikom dolazi do rekombinacije eksitona. Njihov srednji život iznosi oko 10^{-9} sec.

Naelektrisanje ne može da prenosi jer je električno neutralan.

Radijus ovakvih eksitona može da bude i do nekoliko mikrona. Njihov veliki radijus se objošnjava slabom vezom elektrona i šupljine. Do sada spomenuti eksitoni nazivaju se eksitoni Vanije-Mota.

Za rozliku od pomenutih eksitona postoje još eksitoni sa jakom vezom i takav kompleks elektron-šupljina lokalizovan je na jednom molekulu.

Veličina njihovog radijusa je reda veličine ~~nekoliko~~ angstrema. Ovakvi eksitoni najčešće se javljaju u molekularnim kristalima kao što su: plemeniti gasovi, benzol u čvrstom stanju, antrancen i naftalin. U ovim kristalima ekscitacije se prenose tako što se jedan molekul ekscitira i posle izvesnog vremena ekscitacije se prenose na sve ostale molekule kristala. Zbog toga eksitone u molekularnim kristalima shvatamo kao kvante ekscitacije molekula. Eksitoni takvog tipa nazivaju se Frenkelovi eksitoni.

Energija i jednih i drugih eksitona je reda veličine vidljive svetlosti koja ih indukuje tj. 3-5 eV. U daljem radu mi ćemo se ograničiti samo na eksitone koji nastaju usled promene stanja elektrona u individualnom molekulu. Takodje, smatramo da je elektronu dopušteno da zauzme dva stanja 0 i λ, pa prema Paulijevom principu kompletan elektronski prostor je:

$$|0_0\ 0_\lambda\rangle \qquad |1_0\ 1_\lambda\rangle \qquad \text{(I.1)}$$

$$|1_0\ 0_\lambda\rangle \qquad |0_0\ 1_\lambda\rangle \qquad \text{(I.2)}$$

Hamiltonijan molekularnog kristala posmatramo kao hamiltonijan sa dvočestičnim interakcijama:

$$H=\sum_{\vec{n}\lambda} E_{\vec{n}\lambda}\, a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2;\lambda_3,\lambda_4)\times$$
$$\times\, a^+_{\vec{n}\lambda_1} a^+_{\vec{m}\lambda_2} a_{\vec{m}\lambda_3} a_{\vec{n}\lambda_4} \qquad \text{(I.3)}$$

- $\vec{n}$ i $\vec{m}$ označavaju čvorove rešetke
- $E_{\vec{n}\lambda}$ energija elektrona u stanju λ
- $a^+_{\vec{n}\lambda}\, a_{\vec{n}\lambda}$ kreiraju, odnosno anihiliraju elektron na čvoru $\vec{n}$ u stanju λ i to su Fermi operatori.
- $V_{\vec{n}\vec{m}}$ matrični elementi operatora dvočestične interakcije
- $(\lambda_1,\lambda_2;\lambda_3,\lambda_4)$ skupovi kvantnih brojeva koji karakterišu stanje elektrona

U daljem radu prelazimo sa Fermi operatora na Pauli operatore (kvazistatičke operatore), koji se definišu;

$$P^+_{\vec{n}}=a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} \qquad P_{\vec{n}}=a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} \qquad \text{(I.4)}$$

Operator $P^+_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome nestaje jedan elektron u osnovnom stanju 0, a rodi se jedan u pobudjenom stanju λ. Sa stanovišta energije kreira se kvant pobudjenja sa energijom $E_\lambda - E_0$. Operator $P_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome isčezava elektron u pobudjenom stanju, a rodi se u osnovnom stanju, znači on uništava (anihilira) kvant pobuđenja sa energijom $E_\lambda - E_0$.

Za jedan čvor ($\vec{n} = \vec{m}$) Pauli operatori zadovoljavaju Fermionske komutacione relacije, a za različite čvorove ($\vec{n} \neq \vec{m}$) Bozonske komutacione relacije. Znači ovi operatori gledani sa statističke tačke gledišta predstavljaju sredinu izmedju Boze i Fermi operatora.

Definicija Pauli operatora nam daje da su oni u podprostoru (I.1) identički jednaki nuli pa prema tome ovaj podprostor ne utiče na fizičke karakteristike sistema i mi ga isključujemo u daljem radu. U podprostoru (I.2) Pauli operatori daju:

$$P^+_{\vec{n}} |1_0\, 0_\lambda\rangle = a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} |1_0\, 0_\lambda\rangle = |0_0\, 1_\lambda\rangle$$

$$P^+_{\vec{n}} |0_0\, 1_\lambda\rangle = a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}0} |0_0\, 1_\lambda\rangle = 0$$

$$P_{\vec{n}} |1_0\, 0_\lambda\rangle = a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} |1_0\, 0_\lambda\rangle = 0$$

$$P_{\vec{n}} |0_0\, 1_\lambda\rangle = a^+_{\vec{n}0} a_{\vec{n}\lambda} |0_0\, 1_\lambda\rangle = |1_0\, 0_\lambda\rangle$$

Komutacione relacije za Pauli operatore su:

$$\left.\begin{array}{l} [P_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = P_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} - P^+_{\vec{m}} P_{\vec{n}} = (1 - 2P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}})\delta_{\vec{n}\vec{m}} \ldots\ldots \\ P^{+2}_{\vec{n}} = P^2_{\vec{n}} = 0\ ;\ P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = a^+_{\vec{n}\lambda} a_{\vec{n}\lambda} = 0 \text{ ili } 1 \ldots\ldots\ldots \\ [P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P^+_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{array}\right\} \quad (I.5)$$

Broj elektrona na nivou λ i 0 dat je relacijom:

$$a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}+a^{+}_{\vec{n}0}a_{\vec{n}0}=1 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.6)$$

gde je $a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}$ broj elektrona na nivou λ a $a^{+}_{\vec{n}0}a_{\vec{n}0}$ broj elektrona na nivou 0.

Analiziramo sada (I.3). Član $\sum_{\vec{n}\lambda} E_{\vec{n}\lambda}a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}$ u podprostoru (I.2) i korišćenjem (I.5) i (I.6) je $\sum_{\vec{n}\lambda} E_{\vec{n}\lambda}a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}=$

$$=E_0\sum_{\vec{n}}1+\sum_{\vec{n}}(E_{\vec{n}\lambda}-E_{\vec{n}0})P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.7)$$

Stavljanjem da je $\sum_{\vec{n}}1=N$ i $E_{\vec{n}\lambda}-E_{\vec{n}0}=\Delta$ dobija se:

$$\sum_{\vec{n}\lambda}E_{\vec{n}\lambda}a^{+}_{\vec{n}\lambda}a_{\vec{n}\lambda}=E_0N+\Delta\sum_{\vec{n}}P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.8)$$

Dalje analiziramo u (I.3) član

$$\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2;\lambda_3,\lambda_4)a^{+}_{\vec{n}\lambda_1}a^{+}_{\vec{m}\lambda_2}a_{\vec{m}\lambda_3}a_{\vec{n}\lambda_4} \qquad \ldots\ldots \quad (I.9)$$

Tabela mogućih vrednosti λ_1; λ_2; λ_3 i λ_4.

RB \ λ	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
1	0	0	0	0
2	f	0	0	0
3	f	f	0	0
4	f	0	f	0
5	f	0	0	f
6	0	f	f	0
7	0	f	0	f
8	0	0	f	f
9	f	f	f	0
10	f	f	f	f

Odgovarajuće vrednosti za λ zamenjujemo u (I.9) i članove gde se pojavljuju $V(f,0;0,0)$ i $V(f,f;f,0)$ izjednačavamo sa nulom zbog postojanja centra inverzije, zato nećemo ga analizirati pod R.B. 2 i 9.

1) $\lambda_1=0, \lambda_2=0, \lambda_3=0, \lambda_4=0$; $\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2;\lambda_3,\lambda_4)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda_1} a^{+}_{\vec{m}\lambda_2} \times$

$$\times\, a_{\vec{m}\lambda_3} a_{\vec{n}\lambda_4} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0)\, a^{+}_{\vec{n}0} a^{+}_{\vec{m}0} a_{\vec{m}0} a_{\vec{n}0} \ldots \quad (I.10)$$

Korišćenjem prve relacije (I.5) i uvodjenjem smene

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0) = \sum_{\vec{\ell}} V_{\vec{\ell}}(0,0;0,0)\sum_{\vec{m}} 1 = \sum_{\vec{m}} 1 V_0 = NV_0 \ldots (I.11)$$

relacija (I.10) se svodi na:

$$\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(\lambda_1,\lambda_2;\lambda_3,\lambda_4)\, a^{+}_{\vec{n}\lambda_1} a^{+}_{\vec{m}\lambda_2} a_{\vec{m}\lambda_3} a_{\vec{n}\lambda_4} = \frac{NV_0}{2} -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0)(P^{+}_{\vec{m}}P_{\vec{m}} - P^{+}_{\vec{n}}P_{\vec{n}}P^{+}_{\vec{m}}P_{\vec{m}})$$

Sličan postupak primenjujemo za R.B. 3, 4, 5, 6, 7, 8 i 10.

Kompletan hamiltonijan je

$$H = E_0 N + \Delta\sum_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \frac{NV_0}{2} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0) P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f,f;0,0) P^{+}_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;f,0) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;0,f) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;0,f) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;f,0) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;f,0) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;0,f) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{m}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;f,f) P_{\vec{n}} P_{\vec{m}} +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f,f;f,f) P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.12)$$

Sve članove gde se pojavljuju operatori $P^{+}P$ stavljamo u H_2 s tim što odbacujemo članove gde se pojavljuju $P^{+}P^{+}$ i PP.

$$H_2=\Delta\sum_{\vec{n}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}-\sum_{\vec{n}\vec{m}}V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0)P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}[V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;0,f)+$$
$$+V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;f,0)]P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}[V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;f,0)+V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;0,f)]P^+_{\vec{n}}P_{\vec{m}}. \quad (I.13)$$

Vršenjem smene

$$D_{\vec{n}\vec{m}}=\frac{1}{2}V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;0,f)+\frac{1}{2}V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;f,0)-V_{\vec{n}\vec{m}}(0,0;0,0)$$

$$M_{\vec{n}\vec{m}}=\frac{1}{2}V_{\vec{n}\vec{m}}(f,0;f,0)+\frac{1}{2}V_{\vec{n}\vec{m}}(0,f;0,f)$$

gde su $D_{\vec{n}\vec{m}}$ i $M_{\vec{n}\vec{m}}$ matrični elementi, (I.13) je

$$H_2=\Delta\sum_{\vec{n}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+\sum_{\vec{n}\vec{m}}D_{\vec{n}\vec{m}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{n}}+\sum_{\vec{n}\vec{m}}M_{\vec{n}\vec{m}}P^+_{\vec{n}}P_{\vec{m}} \; . \; . \; . \; . \; . \; . \quad (I.14)$$

GLAVA II

II. EKSITONI U POLUBESKONAČNIM STRUKTURAMA

II.1. Jednodimenzionalna struktura

II.2. Dvodimenzionalna struktura

II.3. Trodimenzionalna struktura

II. EKSITONI U POLUBESKONAČNIM STRUKTURAMA

Kristali sa savršeno pravilnom rešetkom skoro su idealizacija realnog stanja rešetki, jer su u praksi manje ili više narušene geometrijske pravilnosti. Struktura koja sa jedne strane poseduje graničnu površinu, naziva se polubeskonačna struktura. Kod ovakvih kristala smatramo da je rešetka savršeno pravilna osim na graničnoj površini. Znači, na granici kristala postoji deformacija. Kod idealnih kristala eksitacije se prostiru po celoj zapremini, dok kod polubeskonačnih struktura pored ovih pojavljuju se i eksitacije koje su lokalizovane oko granične površine. Prva vrsta stanja zovu se zapreminska stanja, a druga vrsta površinska stanja eksitona.

II.1. JEDNODIMENZIONALNA STRUKTURA

Posmatramo lanac atoma proste strukture u aproksimaciji najbližih suseda, ograničen sa leve strane.

$$\underset{0}{\bullet}\quad\underset{1}{\bullet}\quad\underset{2}{\bullet}\quad\underset{3}{\bullet}\quad\underset{4}{\bullet}\quad\underset{5}{\bullet}\quad\underset{6}{\bullet}\;\cdots\cdots\;\underset{N}{\bullet}$$

Konstantu rešetke obeležavamo sa a.

Polazimo od hamiltonijana

$$H_2=\Delta\sum_n P_n^+P_n+\sum_n(D_{n,n+1}P_n^+P_n+D_{n,n-1}P_n^+P_n)+$$
$$+\sum_n(M_{n,n+1}P_n^+P_{n+1}+M_{n,n-1}P_n^+P_{n-1})$$

Pretpostavlja se da se za granični molekul menja i energija pobudjenja izolovanog molekula Δ i matrični elementi dipol-dipolne interakcije M i D. Pošto je Δ za red veličine veće od M i D ($\Delta\sim5$eV; $M,D\sim0{,}1-0{,}01$eV), mi ćemo uzeti u daljem radu samo promenu Δ, dok promenu M i D zanemarićemo. Uzevši ovo u obzir hamiltonijan možemo napisati u sledećem obliku

$$H_2=(\Delta+\Delta')P_0^+P_0+D_{0,1}P_0^+P_0+M_{0,1}P_0^+P_1+\Delta\sum_{n=1}^{N}P_n^+P_n+\sum_{n=1}^{N}(D_{n,n+1}+$$
$$+D_{n,n-1})P_n^+P_n+\sum_{n=1}^{N}(M_{n,n+1}P_n^+P_{n+1}+M_{n,n-1}P_n^+P_{n-1})\ldots\quad(II.1.1)$$

Prelazimo sada sa Pauli na Boze operatora i kako su za ista rastojanja matrični elementi isti, možemo pisati da je $D_{n,n\pm1}=D$ i $M_{n,n\pm1}=M$.

Na osnovu ovoga, hamiltonijan (II.1.1) dobija sledeći oblik

$$H_2=(\Delta+\Delta'+D)B_0^+B_0+MB_0^+B_1+\sum_{n=1}^{N}(\Delta+2D)B_n^+B_n+$$

$$+M\sum_{n=1}^{N}(B_n^+B_{n+1}+B_n^+B_{n-1}) \qquad \text{(II.1.2)}$$

U cilju dijagonalizovanja ovog hamiltonijana koristimo Hajzenbergovu jednačinu kretanja:

$i\dot{B}_f=[B_f,H]$ gde je $B_f\equiv B_f(t)$ i dat je izrazom

$$B_f(t)=\sum_k U_f(ak)e^{-i\varepsilon t}B_k \qquad \text{(II.1.3)}$$

U našem slučaju $H=H_2$, pa je Hajzenbergova jednačina

$$i\dot{B}_f=[B_f,H_2] \qquad \text{(II.1.4)}$$

Za nulti atom ($f=0$) je:

$$[B_0,H_2]=(\Delta+\Delta'+D)B_0+MB_1 \qquad \text{(II.1.5)}$$

Ovom izrazu dodamo MB_{-1} i DB_0 i oduzmemo to isto, pa je konačan oblik jednačine (II.1.5)

$$[B_0,H_2]=(\Delta+2D)B_0+M(B_1+B_{-1})+(\Delta'-D)B_0-MB_{-1} \qquad \text{(II.1.6)}$$

Za f-ti atom ($f=1,2,\ldots,N$)

$$[B_f,H_2]=(\Delta+2D)B_f+M(B_{f+1}+B_{f-1}) \qquad \text{(II.1.7)}$$

U jednačini (II.1.3) stavljamo da je $t=0$, tj.

$$B_f(0)=\sum_k U_f(ak)B_k \qquad \text{(II.1.8)}$$

Ovu jednačinu konjugujemo: $B_{f'}^+(0)=\sum_{k'}U_{f'}^*(ak')B_{k'}^+$

Komutator operatora $B_f(0)$ i $B_{f'}^+(0)$ je

$$[B_f(0),B_{f'}^+(0)]=\sum_{k,k'}U_f(ak)U_{f'}^*(ak')[B_k,B_{k'}^+] \qquad \text{(II.1.9)}$$

Da bi B_k i $B_{k'}^+$ bili Boze operatori mora da je

$$[B_k,B_{k'}^+]=\delta_{k,k'} \qquad \text{(II.1.10)}$$

Zamenom (II.1.10) u (II.1.9) dobijamo uslov kanoničnosti transformacije koji glasi

$$\delta_{f,f'}=\sum_{f,f'} U_f(ak)U^*_{f'}(ak) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.11)$$

Pored pomenutog uslova uvodimo još granične uslove, koji su potpuno analogni uslovima za žicu utvrdjenu na krajevima:

$$\sin Nak = 0 \;; \quad \cos Nak = (-1)^{\nu} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.12)$$

gde je $k=\frac{\nu\pi}{Na}$ a $\nu=0,1,2,..,N$.

Uzimamo sada da je $f=0$ i radi lakšeg pisanja u daljem radu koristimo identičnost $B(t)=B$. Uzimajući u obzir ove činjenice (II.1.3) glasi;

$$B_0=\sum_k U_0(ak)e^{-iEt}B_k \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.13)$$

a (II.1.4) prelazi u

$$i\dot{B}_0=[B_0,H_2] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.14)$$

Nalaženjem prvog izvoda po vremenu jednačine (II.1.13) i posle sredjivanja dobijamo

$$i\dot{B}_0=EB_0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.15)$$

Na osnovu (II.1.14) i (II.1.15) sledi da je

$$EB_0=[B_0,H_2] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.16)$$

Zamenom u (II.1.16) izraze (II.1.13), (II.1.B) i odgovarajućih izraza za B_1 i B_{-1}, koji se dobijaju iz (II.1.3) stavljanjem da je $f=1$ i $f=-1$ dobijamo

$$[E-(\Delta+2D)]U_0(ak)-M[U_1(ak)+U_{-1}(ak)]=$$
$$=(\Delta'-D)U_0(ak)-MU_{-1}(ak) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.17)$$

Isti postupak primenjujemo iza $f\neq 0$. Nalaženjem prvog izvoda po vremenu (II.1.3), sredjivanjem i uporedjivanjem sa (II.1.4) dobijamo

$EB_f=[B_f,H_2]$ . . . . (II.1.18)

Dalje iz jednačine (II.1.3) dobijamo izraze za B_{f+1} i B_{f-1} .

Zamenom u (II.1.18) izraze (II.1.3), (II.1.7) i odgovarajućih izraza za B_{f+1} i B_{f-1} dobijamo

$[E-(\Delta+2D)]U_f(ak)-M[U_{f+1}(ak)+U_{f-1}(ak)]=0$ . . . . . (II.1.19)

Ako u ovoj jednačini uzimamo da je $f=0$, dobijamo levu stranu jednačine (II.1.17), a to nam daje da je desna strana pomenute jednačine jednaka nuli.

Operatore B_f razvijamo na sledeći način

$B_f=\sum_k U_f(ak)B_k$ gde je $U_f(ak)$ linearna kombinacija tipa $U_f(ak)=\sum_\nu a_\nu \sin(f+\nu)ak$ i zadržavamo se na prva dva člana

$U_f(ak)=a_0 \sin fak+a_1 \sin(f+1)ak$ . . . . (II.1.20)

Iz jednačine (II.1.20) nalazimo $U_{f+1}(ak)$ i $U_{f-1}(ak)$ i to zamenimo u jednačini (II.1.19) koja nam daje izraz za energiju eksitona u idealnoj strukturi

$E=\Delta+2D+2M\cos ak$ . . . . (II.1.21)

Jednačina (II.1.20) daje nam izraze za $U_1(ak)$, $U_{-1}(ak)$ i $U_0(ak)$. Njih zamenjujemo u desnu stranu (II.1.17) i rešavanjem ove dobijamo odnos koeficijenata naše linearne kombinacije:

$$\frac{a_1}{a_0}=-\frac{M}{\Delta'-D}=\theta \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.22)$$

Na osnovu (II.1.22) jednačina (II.1.20) je

$$U_f(ak)=a_0\left[\sin fak+\theta\sin(f+1)ak\right] \quad \ldots\ldots\ldots \quad (II.1.23)$$

Kao što se vidi rešenje $U_f(ak)$ je periodična funkcija mesta f, što nam govori da su ekscitacije eksitona sa istom verovatnoćom rasporedjene duž lanca atoma.

Sada nam je cilj da odredimo izraz za konstantu a_0. Koristićemo uslov (II.1.11) kada je $f=f'$:

$$\sum_f U_f(ak)U_f^*(ak)=1 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.24)$$

Zamenom $U_f(ak)$ i $U_f^*(ak)$ u (II.1.24), primenom pravila geometrijske progresije i graničnih uslova uz zanemarivanje članova koje ne množimo sa N dobijamo konačan izraz za a_0:

$$a_0=\sqrt{\frac{2}{N(1+2\theta\cos ak+\theta^2)}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (II.1.25)$$

Zamenom (II.1.25) u (II.1.23) dobijamo izraz za transformacioni koeficijent eksitona u jednodimenzionalnoj polubeskonačnoj strukturi rasporedjenih duž celog lanca.

$$U_f(ak)=\sqrt{\frac{2}{N(1+2\theta\cos ak+\theta^2)}}\left[\sin fak+\theta\sin(f+1)ak\right] \quad \ldots \quad (II.1.26)$$

Operatori se transformišu na sledeći način:

$$B_f=\sum_k\sqrt{\frac{2}{N(1+2\theta\cos ak+\theta^2)}}\left[\sin fak+\theta\sin(f+1)ak\right]B_k \quad \ldots \quad (II.1.27)$$

a odgovarajuća talasna funkcija je

$$|1_k\rangle=\sqrt{\frac{2}{N(1+2\theta\cos ak+\theta^2)}}\left[\sin fak+\theta\sin(f+1)ak\right]B_k^+|0\rangle \quad \ldots \quad (II.1.28)$$

Sistem jednačina (II.1.17) i (II.1.19) ima još jedno fizički dopustivo rešenje. U cilju iznalaženja tog rešenja položimo od

$$B_f=\sum_{\rho'} U_f(i\rho)B_{\rho'} \qquad (II.1.29)$$

gde je $\rho'=k$ a $ak=i\rho$

Rešenje tražimo u sledećem obliku:

$$U_f(i\rho)=Ce^{-f\rho} \qquad (II.1.30)$$

Veličina ρ mora biti veća od nule jer samo tada ekscitacije su skoncentrisane na graničnoj površini, a sa dubinom kristala verovatnoća njihovog pojavljivanja opada eksponencijalno. Iz jednačina (II.1.19) i (II.1.30) dobijamo izraz za energiju kod površinskih stanja:

$$E_\rho=\Delta+2D+2M\cosh\rho \qquad (II.1.31)$$

Jednačine (II.1.17) i (II.1.30) daju nam izraz za ρ:

$\rho=\ln|(\Delta'-D)/M|$ a kako ρ mora da bude veće od nule, zaključujemo da površinska stanja postoje samo onda ako je $|M|<|\Delta'-D|$ . . . . (II.1.32)

Korišćenjem uslova (II.1.24) nalazimo:

$$C=\sqrt{1-e^{-2\rho}} \qquad (II.1.33)$$

Jednačina (II.1.30) je

$$U_f(i\rho)=\sqrt{1-e^{-2\rho}}\,e^{-f\rho} \qquad (II.1.34)$$

a (II.1.29)

$$B_f=\sum_{\rho'}\sqrt{1-e^{-2\rho}}\,e^{-f\rho}B_{\rho'} \qquad (II.1.35)$$

Talasna funkcija za površinska stanja je oblika

$$|1_{\rho}\rangle = \sqrt{1-e^{-2\rho}}\, e^{-f\rho} B^{+}_{\rho'} |0\rangle \qquad \text{(II.1.36)}$$

II.2. DVODIMENZIONALNA STRUKTURA

Kod dvodimenzionalne strukture uzećemo da je simetrija narušena duž y-ose, a x-osa predstavlja granicu narušenja simetrije. Duž x-ose kristal se može smatrati beskonačnim jer nema narušenja simetrije. Za analizu ove strukture koristimo hamiltonijan (I.14). Direktnim prelazom $P \to B$ i pišući vektore $\vec{n}$ i $\vec{m}$ u komponentama dobijamo:

$$H_2 = \sum_{n_x, n_y} B^+_{n_x, n_y} B_{n_x, n_y} + \sum_{n_x, n_y; m_x, m_y} D_{n_x, n_y; m_x, m_y} B^+_{n_x, n_y} B_{n_x, n_y} + \sum_{n_x, n_y; m_x, m_y} M_{n_x, n_y; m_x, m_y} B^+_{n_x, n_y} B_{m_x, m_y} \qquad (II.2.1)$$

Posle iscrpne analize i izdvajanja članova u kojima figuriše $n_y = 0$ od članova u kojima je $n_y = 1, 2, 3, \ldots N_y$ i koristeći aproksimaciju najbližih suseda, hamiltonijan (II.2.1) je

$$H_2 = (\Delta + \Delta' + 3D) \sum_{n_x} B^+_{n_x,0} B_{n_x,0} + M \sum_{n_x} B^+_{n_x,0} (B_{n_x+1,0} + B_{n_x-1,0} + B_{n_x,1}) + \Delta \sum_{n_x, n_y = 1} B^+_{n_x, n_y} B_{n_x, n_y} + M \sum_{n_x, n_y = 1} B^+_{n_x, n_y} (B_{n_x+1, n_y} + B_{n_x-1, n_y} + B_{n_x, n_y+1} + B_{n_x, n_y-1}) \qquad (II.2.2)$$

Hajzenbergove jednačine kretanja glase:

$$i \dot{B}_{f_x, f_y}(t) = [B_{f_x, f_y}, H_2] \qquad (II.2.3)$$

gde je $B_{f_x, f_y}(t) = B_{f_x, f_y} e^{-iEt}$.

Jednačinu (II.2.3) možemo napisati i u sledećem obliku

$$E B_{f_x, f_y} = [B_{f_x, f_y}, H_2] \qquad (II.2.4)$$

Posle nalaženja komutatora i nekih manjih transformacija jednačina (II.2.2) se svodi na dve;

$$[E-(\Delta+4D)]B_{f_x,0}-M(B_{f_x+1,0}+B_{f_x-1,0}+B_{f_x,1}+B_{f_x,-1})=$$
$$=(\Delta'-D)B_{f_x,0}-MB_{f_x,-1} \quad \ldots \ldots (II.2.5)$$

$$[E-(\Delta+4D)]B_{f_x,f_y}-M(B_{f_x+1,f_y}+B_{f_x-1,f_y}+B_{f_x,f_y+1}+B_{f_x,f_y-1})=0 \quad (II.2.6)$$

Operatore B_{f_x,f_y} razvijamo na sledeći način

$$B_{f_x,f_y}=\sum_{k_x,k_y}U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)B_{k_x,k_y} \quad \ldots \ldots (II.2.7)$$

gde je $U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)=e^{if_xk_xa}[a_0\sin f_yk_ya+a_1\sin(f_y+1)k_ya]$

(II.2.8)

Zamenom (II.2.8) u (II.2.6) vidimo da je ona zadovoljena ako je energija data sledećim izrazom

$$E=\Delta+4D+2M(\cos k_xa+\cos k_ya) \quad \ldots \ldots (II.2.9)$$

Dalje vršimo zamenu (II.2.8) u (II.2.7), a ovu u (II.2.5) iz koje nalazimo odnos koeficijenata:

$$\frac{a_1}{a_0}=-\frac{M}{\Delta'-D}=\theta \quad \ldots \ldots (II.2.10)$$

Znači:

$$U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)=e^{ik_xf_xa}a_0[\sin f_yak_y+\theta\sin(f_y+1)k_ya] \quad \ldots (II.2.11)$$

$$B_{f_x,f_y}=\sum_{k_x,k_y}e^{if_xk_xa}a_0[\sin f_yk_ya+\theta\sin(f_y+1)k_ya]B_{k_x,k_y} \quad \ldots (II.2.12)$$

Konstantu a_0 odredjujemo iz uslova kanoničnosti

$$\sum_{f_x,f_y}U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)U^*_{f_x,f_y}(k_x,k_y)=1 \quad \ldots \ldots (II.2.13)$$

i ona je

$$a_0=\sqrt{\frac{2}{N_xN_y(1+2\theta\cos k_ya+\theta^2)}} \quad \ldots \ldots (II.2.14)$$

Normirana funkcija $U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)$ glasi

$$U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)=e^{if_xk_xa}\sqrt{\frac{2}{N_xN_y(1+2\theta\cos k_ya+\theta^2)}}[\sin f_yk_ya+$$
$$+\theta\sin(f_y+1)k_ya] \quad \ldots \ldots (II.2.15)$$

Operatori se transformišu po pravilu:

$$B_{f_x,f_y}=\sum_{k_x,k_y}\sqrt{\frac{2}{N_xN_y(1+2\theta\cos k_ya+\theta^2)}}\,e^{if_xk_xa}[\sin f_yk_ya+$$

$$+\theta\sin(f_y+1)k_ya]B^+_{k_x,k_y}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.16)$$

tako da je jednočestična talasna funkcija oblika

$$|1_{k_x,k_y}\rangle=\sqrt{\frac{2}{N_xN_y(1+2\theta\cos k_ya+\theta^2)}}\,e^{if_xk_xa}[\sin f_yk_ya+$$

$$+\theta\sin(f_y+1)k_ya]B^+_{k_x,k_y}|0\rangle\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.17)$$

Ako u ravnom talasu $e^{ia(fk_x+f_yk_y)}$ izvršimo prelaz $ak_y\to i\rho$ onda transformacija (II.2.7) postaje

$$B_{f_x,f_y}=\sum_{k_x,\rho'}U_{f_x,f_y}(k_x,\rho')B_{k_x,\rho'}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.18)$$

gde je $\rho'=\frac{i\rho}{a}$, a (II.2.8) je

$$U_{f_x,f_y}(k_x,\rho')=Ce^{if_xk_xa-f_y\rho}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.19)$$

Zamenom (II.2.18) u (II.2.6) nalazimo da je ona zadovoljena ako je energija eksitona data izrazom

$$E_\rho=\Delta+4D+2M(\cos k_xa+\cosh yp\rho)\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.20)$$

Na osnovu (II.2.20) zaključujemo da je leva strana jednačine (II.2.5) jednaka nuli, a sem toga iz nje nalazimo da je

$$\rho=\ln|(\Delta'-D)/M|\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.21)$$

Da bi stanja bila lokalizovana oko površine mora da je $\rho>0$, tj. $|\Delta'-D|>|M|$.

Iz uslova kanoničnosti nalazimo konstantu C, tj:

$$\sum_{f_x,f_y}U_{f_x,f_y}(k_x,\rho')U^*_{f_x,f_y}(k_x,\rho')=1\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ (II.2.22)$$

Odakle sledi da je:

$$C=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}} \qquad (II.2.23)$$

pa je

$$U_{f_x,f_y}(k_x,\rho')=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}}\,e^{if_xk_xa-\rho f_y} \qquad (II.2.24)$$

Znači, operatori površinski eksitona transformišu po pravilu

$$B_{f_x,f_y}=\sum_{k_x,\rho'}\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}}\,e^{if_xk_xa-\rho f_y}B_{k_x,\rho'} \qquad (II.2.25)$$

tako da je jednočestična talasna funkcija oblika

$$|1_{k_x,\rho'}\rangle=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}}\,e^{if_xk_xa-\rho f_y}B^{+}_{k_x,\rho'}|0\rangle \qquad (II.2.26)$$

II.3. TRODIMENZIONALNA STRUKTURA

Pretpostavićemo da je translaciona simetrija narušena duž z-ose, u tom slučaju ravan XOY je ravan narušenja simetrije. Komponente vektora $\vec{n}$ i $\vec{m}$ su $\vec{n}=\{n_x, n_y, n_z\}$, $\vec{m}=\{m_x, m_y, m_z\}$. Prelaskom $P\to B$ hamiltonijan (I.14) za ovaj slučaj je:

$$H_2=\Delta \sum_{n_x, n_y, n_z} B^+_{n_x, n_y, n_z} B_{n_x, n_y, n_z} + \sum_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z} D_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z} \times$$
$$\times B^+_{n_x, n_y, n_z} B_{n_x, n_y, n_z} + \sum_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z} M_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z} \times$$
$$\times B^+_{n_x, n_y, n_z} B_{m_x, m_y, m_z} \quad . . . . (II.3.1)$$

Izdvajući članove sa $n_z=0$ i $n_z=1,\dots,N_z$ i koristeći aproksimaciju najbližih suseda, dobija se:

$$H_2=(\Delta+\Delta'+5D)\sum_{n_x,n_y} B^+_{n_x,n_y,0} B_{n_x,n_y,0} + M\sum_{n_x,n_y} B^+_{n_x,n_y,0} (B_{n_x+1,n_y,0} +$$
$$+B_{n_x-1,n_y,0} + B_{n_x,n_y+1,0} + B_{n_x,n_y-1,0} + B_{n_x,n_y,1}) + \Delta \sum_{n_x,n_y,n_z=1} B^+_{n_x,n_y,n_z} B_{n_x,n_y,n_z} +$$
$$+6D \sum_{n_x,n_y,n_z=1} B^+_{n_x,n_y,n_z} B_{n_x,n_y,n_z} + M \sum_{n_x,n_y,n_z=1} B^+_{n_x,n_y,n_z} (B_{n_x+1,n_y,n_z} +$$
$$+B_{n_x-1,n_y,n_z} + B_{n_x,n_y+1,n_z} + B_{n_x,n_y-1,n_z} + B_{n_x,n_y,n_z+1} + B_{n_x,n_y,n_z-1}) . . (II.3.2)$$

Jednačine kretanja glase:

$$E B_{f_x,f_y,0} = (\Delta+6D) B_{f_x,f_y,0} + M(B_{f_x+1,f_y,0} + B_{f_x-1,f_y,0} + B_{f_x,f_y+1,0} +$$
$$+B_{f_x,f_y-1,0} + B_{f_x,f_y,1} + B_{f_x,f_y,-1}) + (\Delta'+D) B_{f_x,f_y,0} + M B_{f_x,f_y,-1} \quad . . . . . (II.3.3)$$

$$E B_{f_x,f_y,f_z} = (\Delta+6D) B_{f_x,f_y,f_z} + M(B_{f_x+1,f_y,f_z} + B_{f_x-1,f_y,f_z} + B_{f_x,f_y+1,f_z} +$$
$$+B_{f_x,f_y-1,f_z} + B_{f_x,f_y,f_z+1} + B_{f_x,f_y,f_z-1}) \quad . . . . (II.3.4)$$

Transformišući operatore na sledeći način

$$B_{f_x,f_y,f_z} = \sum_{k_x,k_y,k_z} U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z) B_{k_x,k_y,k_z} \quad . . . . (II.3.5)$$

gde je

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)=e^{if_xk_xa+if_yk_ya}[a_0\sin f_zk_za+a_1\sin(f_z+1)k_za]$$ (II.3.6)

izamenjujući (II.3.6) u (II.3.5) a ovu u (II.3.3) vidimo da je ona zadovoljena ako je energija data izrazom

$$E=\Delta+6D+2M(\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_za) \quad \text{(II.3.7)}$$

Zamenom (II.3.6) u (II.3.5) a ovu u (II.3.5) a na osnovu (II.3.7) dobijamo:

$$\frac{a_1}{a_0}=-\frac{M}{\Delta'-D}=\Theta \quad \text{(II.3.8)}$$

Funkcija $U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)$ je

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)=e^{if_xk_xa+if_yk_ya}a_0[\sin f_zk_za+$$
$$+\Theta\sin(f_z+1)k_za] \quad \text{(II.3.9)}$$

Konstantu a_0 nalazimo iz uslova kanoničnosti

$$\sum_{f_x,f_y,f_z}U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)U^*_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)=1 \quad \text{(II.3.10)}$$

i ona je

$$a_0=\sqrt{\frac{2}{N_xN_yN_z(1+2\Theta\cos k_za+\Theta^2)}} \quad \text{(II.3.11)}$$

Normirana funkcija (II.3.9) je

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)=\sqrt{\frac{2}{N_xN_yN_z(1+2\Theta\cos k_za+\Theta^2)}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya}\times$$
$$\times[\sin f_zk_za+\Theta\sin(f_z+1)k_za]. \quad \text{(II.3.12)}$$

Operatori se transformišu po pravilu

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,k_z}\sqrt{\frac{2}{N_xN_yN_z(1+2\Theta\cos k_za+\Theta^2)}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya}\times$$

$$[\sin f_zk_za+\Theta\sin(f_z+1)k_za]B_{k_x,k_y,k_z} \quad \text{(II.3.13)}$$

tako da jednočestična talasna funkcija zapreminskih eksitona ima oblik

$$|1_{k_x,k_y,k_y}\rangle=\sqrt{\frac{2}{N_xN_yN_z(1+2\Theta\cos k_za+\Theta^2)}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya}\times$$
$$\times[\sin f_zk_za+\Theta\sin(f_z+1)k_za]B^+_{k_x,k_y,k_z}|0\rangle\,.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(II.3.14)$$

Sistem jednačina (II.3.4) i (II.3.4) ima još jedno dopustivo rešenje. Prelaskom sa $ak\to i\rho$ transformacija (II.3.5) je

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,\rho'}U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,\rho')B_{k_x,k_y,\rho'}\,.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(II.3.15)$$

gde je

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,\rho')=Ce^{if_xk_xa+if_yk_ya-\rho f_z}\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(II.3.16)$$

Zamenom (II.3.16) u (II.3.15) a ovu u (II.3.4) zaključujemo da je ona zadovoljena ako je energija površinskih eksitona data izrazom:

$$E_\rho=\Delta+4D+2M(\cos k_xa+\cos k_ya+\cosh yp\,\rho)\,.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(II.3.17)$$

Jednačina (II.3.3) nam daje

$$\rho=\ln|(\Delta'-D)/M|\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(II.3.18)$$

Da bi u trodimenzionalnoj strukturi stanja bila lokalizovana oko površine mora biti $\rho>0$ odnosno mora da je $|\Delta'-D|>|M|$.

Iz uslova kanoničnosti dobijamo izraz za konstantu:

$$C=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_xN_y}}\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(II.3.19)$$

pa je

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,\rho')=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_xN_y}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya-\rho f_z}\;.\;.\;.\;.\;(II.3.20)$$

Operatori se transformišu po pravilu:

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,\rho'}\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_xN_y}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_y-\rho f_z}B_{k_x,k_y,\rho'}\,.\;.\;.\;(II.3.21)$$

a jednočestična talasna funkcija je

$$|1_{k_x,k_y,\rho'}\rangle=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_xN_y}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya-\rho f_z}B^+_{k_x,k_y,\rho'}|0\rangle\,.\;.\;.\;(II.3.22)$$

GLAVA III

III. EKSITONI U TANKIM FILMOVIMA

III.1. Jednodimenzionalna struktura

III.2. Dvodimenzionalna struktura

III.3. Trodimenzionalna struktura

III. EKSITONI U TANKIM FILMOVIMA

Dok smo u glavi II analizirali strukture koje poseduju samo jednu graničnu površinu, u ovoj glavi analiziraćemo strukture koje poseduju još jednu graničnu površinu. Ove dve granične površine nemaju zajedničkih tačaka što znači da su paralelne. Struktura koja izmedju pomenutih površina poseduje 10-100 atoma naziva se tanak film.

Ekscitacijama koje smo spominjali u glavi II, pridružićemo još ekscitacije lokalizovane oko druge granične površine.

III. 1. JEDNODIMENZIONALNA STRUKTURA

Kao i u glavi II, posmatramo lanac atoma od 0 do N. U tankim filmovima N nije beskonačno veliki, već N=10-100, pa ne smemo zanemariti jedinicu u odnosu na N. Hamiltonijan za tanak film jednodimenzionalne strukture možemo napisati u sledećem obliku:

$$H_2=(\Delta+\Delta'+D)B_0^+B_0+MB_0^+B_1+(\Delta+\Delta'+D)B_N^+B_N+MB_N^+B_N+$$
$$+\Delta\sum_{n=1}^{N}B_n^+B_n+2D\sum_{n=1}^{N-1}B_n^+B_n+M\sum_{n=1}^{N-1}(B_n^+B_{n+1}+B_n^+B_{n-1})\ldots\ldots \quad (III.1.1)$$

Komutator $[B_f,H_2]$ je:

$$[B_f,H_2]=(\Delta+\Delta'+D)B_0\delta_{0,f}+MB_1\delta_{0,f}+(\Delta+\Delta'+D)\delta_{N,f}+MB_N^+B_{N-1}+$$
$$+\Delta B_f+2DB_f+M(B_{f+1}+B_{f-1})\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (III.1.2)$$

U izrazu (III.1.2) članovi ΔB_f, $2DB_f$, $M(B_{f+1}+B_{f-1})$ poseduju $f\neq 0$ i $f\neq N$.

Za nulti atom $(f=0)$ komutator je:

$[B_0,H_2]=(\Delta+\Delta'+D)B_0+MB_1$, njemu dodamo i oduzmemo DB_0 i MB_{-1} pa je:

$$[B_0,H_2]=(\Delta+2D)B_0+M(B_1+B_{-1})-DB_0-MB_{-1}+\Delta'B_0\ \ldots \quad (III.1.3)$$

Komutator za N-ti atom $(f=N)$ uz dodavanje i oduzimanje članova DB_N i MB_{N+1} je:

$$[B_N,H_2]=(\Delta+2D)B_N+M(B_{N+1}+B_{N-1})-DB_N-MB_{N+1}+\Delta'B_N\ . \quad (III.1.4)$$

a za f-ti atom $(f\neq 0$ i $f\neq N)$.

$$[B_f,H_2]=(\Delta+2D)B_f+M(B_{f+1}+B_{f-1})\ \ldots\ldots\ldots \quad (III.1.5)$$

Hajzenbergova jednačina kretanja (II.1.4) može se napisati i u sledećem obliku

$$E\dot{B}_f=[B_f,H_2] \quad \text{(III.1.6)}$$

Na osnovu (III.1.3), (III.1.4), (III.1.5) i (III.1.6) dobijamo jednačine kretanja:

$$EB_0=(\Delta+2D)B_0+M(B_1+B_{-1})-DB_0-MB_{-1}+\Delta' B_0 \quad \text{(III.1.7)}$$

$$EB_N=(\Delta+2D)B_N+M(B_{N+1}+B_{N-1})-DB_N-MB_{N+1}+\Delta' B_N \quad \text{(III.1.8)}$$

$$EB_f=(\Delta+2D)B_f+M(B_{f+1}+B_{f-1}) \quad \text{(III.1.9)}$$

Razvijajući operatore na sledeći način

$B_f=\sum_k U_f(ka)B_k$ dobijamo:

$$[E-(\Delta+2D)]U_0(ka)-M[U_1(ka)+U_{-1}(ka)]=-DU_0(ka)-MU_{-1}(ka)+$$
$$+\Delta' U_0(ka) \quad \text{(III.1.10)}$$

$$[E-(\Delta+2D)]U_N(ka)-M[U_{N+1}(ka)+U_{N-1}(ka)]=-DU_N(ka)-$$
$$-MU_{N+1}(ka)+\Delta' U_N(ka) \quad \text{(III.1.11)}$$

$$[E-(\Delta+2D)]U_f(ka)-M[U_{f+1}(ka)+U_{f-1}(ka)]=0 \quad \text{(III.1.12)}$$

Funkciju $U_f(ka)$ tražimo u obliku

$$U_f(ka)=\alpha\cos fka+\beta\sin fka \quad \text{(III.1.13)}$$

Ako je energija eksitona data izrazom

$$E=\Delta+2D+2M\cos ka \quad \text{(III.1.14)}$$

onda se jednačina (III.1.12) svodi na identitet (0=0).

Na osnovu (III.1.13) i (III.1.14) jednačine (III.1.10) i (III.1.11) svode se na sistem od dve homogene jednačine sa dve nepoznate veličine:

$\alpha(D-\Delta'+M\cos ka)-\beta M\sin ka=0$ . . . . (III.1.15)

$\alpha(D-\Delta'+M\cos ka)+\beta M\sin ka=0$ . . . . (III.1.16)

Ovaj sistem ima netrivijalna rešenja ako je determinanta sistema jednaka nuli.

Rešavanjem determinante sistema dobijamo da je

$\cos ka=\frac{\Delta'-D}{M}$ . . . . (III.1.17)

a odavde je

$ka=\arccos\frac{\Delta'-D}{M}+2\pi m$ . . . . (III.1.18)

gde je m ceo broj. Medjutim kako je u prvoj Brilvenovoj zoni maksimalna vrednost ka je $\frac{\pi}{2}$, pa otuda sledi da u granicama ove zone k ima samo jednu vrednost:

$k=k_0=\frac{1}{a}\arccos\frac{\Delta'-D}{M}$ . . . . (III.1.19)

Zamenjujući (III.1.17) u (III.1.15) dobijamo da je $\beta=0$ a α proizvoljno, pa je:

$U_f(k_0a)=\alpha\cos fk_0a$ . . . . (III.1.20)

Iz uslova kanoničnosti (II.1.24) dobijamo da je

$\alpha\sum_f\cos^2 fk_0a=1$ . . . . (III.1.21)

tj. $\alpha=\sqrt{\frac{2}{N+2}}$ . . . . (III.1.22)

Normirana transformaciona funkcija zapreminskih stanja u jednodimenzionalnoj strukturi je

$U_f(k_0a)=\sqrt{\frac{2}{N+2}}\cos fk_0a$ . . . . (III.1.23)

Operatori se transformišu po pravilu

$B_f=\sum_k\sqrt{\frac{2}{N+2}}\cos fk_0a\,B_k$ . . . . (III.1.24) tako da je jednočestična talasna funkcija oblika

$$|1_k\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+2}} \cos f k_0 a B_k^+ |0\rangle \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.25)$$

U cilju analiziranja površinski stanja izvršimo prelaz $ka \to i\rho$ i onda je

$$B_f = \sum_{\rho'} U_f(i\rho) B_{\rho'} \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.26)$$

a kako film ima dve granične površine mi ćemo rešenja sistema (III.1.10), (III.1.11) i (III.1.12) tražiti u obliku:

$$U_f(i\rho) = \alpha e^{-f\rho} + \beta e^{-(N-f)\rho} \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.27)$$

Zamenom (III.1.27) u (III.1.12) vidimo da je ona zadovoljena samo ako je energija eksitona data izrazom:

$$E = \Delta + 2D + 2M \cosh yp\rho \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.28)$$

Jednačina (III.1.10) a na osnovu (III.1.27) i (III.1.28) daje

$$\rho = \ln|(\Delta^2 - D)/M| \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.29)$$

ovo isto nam daje i jednačina (III.1.11) Analiza (III.1.29) data je ranije.

U cilju nalaženja konstanti α i β, mi uzimamo uz aproksimaciju da je $\alpha = \beta$ i na osnovu (II.1.24) dobijamo:

$$\alpha = \sqrt{1 - e^{-2\rho}} \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.30)$$

pa je

$$U_f(i\rho) = \sqrt{1 - e^{-2\rho}} \, [e^{-f\rho} + e^{-(N-f)\rho}] \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.31)$$

$$B_f = \sum_{\rho'} \sqrt{1 - e^{-2\rho}} [e^{-f\rho} + e^{-(N-f)\rho}] \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.32)$$

Jednočestična talasna funkcija je oblika

$$|1_{\rho'}\rangle = \sqrt{1 - e^{-2\rho}} [e^{-f\rho} + e^{-(N-f)\rho}] B_{\rho'}^+ |0\rangle \ldots \ldots \ldots \ldots (III.1.33)$$

III.2. DVODIMENZIONALNA STRUKTURA

Kao i kod polubeskonačne strukture polazimo od hamiltonijana (I.14).

Vektore $\vec{n}$ i $\vec{m}$ izrazimo u komponentama a zatim vršimo direktan prelaz sa P na B. Dalje izdvojimo članove u kojima figuriše indeks $n_y=0$ i $n_y=N_y$ i posle aproksimacije najbližih suseda dobijamo hamiltonijan za naš slučaj.

$$H_2=(\Delta+\Delta'+3D)\sum_{n_x}B^+_{n_x,0}B_{n_x,0}+(\Delta+\Delta'+D)\sum_{n_x,N_y}B^+_{n_x,N_y}B_{n_x,N_y}+M\sum_{n_x}B^+_{n_x,0}\times$$
$$\times(B_{n_x+1,0}+B_{n_x-1,0}+B_{n_x,1})+M\sum_{n_x,N_y}B^+_{n_x,N_y}(B_{n_x+1,N_y}+B_{n_x-1,N_y}+B_{n_x,N_y-1})+$$
$$+(\Delta+4D)\sum_{n_x,n_y=1}^{N_y-1}B^+_{n_x,n_y}B_{n_x,n_y}+M\sum_{n_x,n_y=1}^{N_y-1}B^+_{n_x,n_y}(B_{n_x+1,n_y}+B_{n_x-1,n_y}+$$
$$+B_{n_x,n_y+1}+B_{n_x,n_y-1})\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(III.2.1)}$$

Jednačine kretanja glase:

$$[E-(\Delta+4D)]B_{f_x,0}-M(B_{f_x+1,0}+B_{f_x-1,0}+B_{f_x,1}+B_{f_x,-1})=(\Delta'-D)B_{f_x,0}-$$
$$-MB_{f_x,-1}\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(III.2.2)}$$

$$[E-(\Delta+4D)]B_{f_x,N_y}-M(B_{f_x+1,N_y}+B_{f_x-1,N_y}+B_{f_x,N_y+1}+B_{f_x,N_y-1})=$$
$$=(\Delta'-D)B_{f_x,N_y}-MB_{f_x,N_y+1}\ \ldots\ldots\ldots\ldots \text{(III.2.3)}$$

$$[E-(\Delta+4D)B_{f_x,f_y}-M(B_{f_x+1,f_y}+B_{f_x-1,f_y}+B_{f_x,f_y+1}+B_{f_x,f_y-1})=0 \quad \text{(III.2.4)}$$

Operatore razvijamo na sledeći način:

$$B_{f_x,f_y}=\sum_{k_x,k_y}U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)B_{k_x,k_y}\ \ldots\ldots\ldots\ldots \text{(III.2.5)}$$

gde je

$$U_{f_x,f_y}(k_x,k_y)=e^{if_xk_xa}(\alpha\cos f_yk_ya+\beta\sin f_yk_ya)\ \ldots\ldots \text{(III.2.6)}$$

$$\text{Za}\quad E=\Delta+4D+2M(\cos k_xa+\cos k_ya)\ \ldots\ldots\ldots\ldots \text{(III.2.7)}$$

jednačina (III.2.4) svodi se na identitet $(0\equiv 0)$. Na osnovu (III.2.7) i (III.2.5) jednačine (III.2.2) i (III.2.3) svode se na sistem od dve homogene jednačine sa dve nepoznate:

$$\alpha(\Delta' - D - M\cos k_y a) - \beta M \sin k_y a = 0 \qquad \text{(III.2.8)}$$

$$\alpha(\Delta' - D - M\cos k_y a) + \beta M \sin k_y a = 0 \qquad \text{(III.2.9)}$$

Rešavanjem determinante dobijamo da je:

$$k_y = k_0 = \frac{1}{a}\arccos\frac{\Delta' - D}{M} \qquad \text{(III.2.10)}$$

i $\beta = 0$ a α proizvoljno.

Funkcija (III.2.6) je

$$U_{f_x,f_y}(k_x,k_0) = \alpha e^{if_x k_x a}\cos f_y k_0 a \qquad \text{(III.2.11)}$$

Konstantu α nalazimo iz uslova kanoničnosti:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2}{N_x(N_y+2)}} \qquad \text{(III.2.12)}$$

pa je

$$U_{f_x,f_y}(k_x,k_0) = \sqrt{\frac{2}{N_x(N_y+2)}}\, e^{if_x k_x a}\cos f_y k_0 a \qquad \text{(III.2.13)}$$

Operatori se transformišu po pravilu:

$$B_{f_x,f_y} = \sum_{k_x,k_0}\sqrt{\frac{2}{N_x(N_y+2)}}\, e^{if_x k_x a}\cos f_y k_0 a\, B_{k_x,k_0} \qquad \text{(III.2.14)}$$

tako da je jednočestična talasna funkcija oblika

$$|1_{k_x,k_0}\rangle = \sqrt{\frac{2}{N_x(N_y+2)}}\, e^{if_x k_x a}\cos f_y k_0 a\, B^{+}_{k_x,k_0}|0\rangle \qquad \text{(III.2.15)}$$

Za analizu površinskih stanja koristiću transformaciju:

$$B_{f_x,f_y} = \sum_{k_x,\rho'} U_{f_x,f_y}(k_x,\rho')B_{k_x,\rho'} \qquad \text{(III.2.16)}$$

gde je

$$U_{f_x,f_y}(k_x,\rho') = C e^{if_x k_x a}\left[e^{-f_y\rho} + e^{-(N_y-f_y)\rho}\right] \qquad \text{(III.2.17)}$$

Zamenom (III.2.17) u (III.2.8) ili u (III.2.9) dobijamo

$$\rho = \ln|(\Delta^2 - D)/M| \qquad (III.2.18)$$

Konstantu C odredjujemo na sličan način kao i u jednodimenzionalnom slučaju

$$C = \sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}} \qquad (III.2.19)$$

pa je

$$U_{f_x, f_y}(k_x, \rho') = \sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}}\left[e^{-f_y\rho} + e^{-(N_y - f_y)\rho}\right] e^{i f_x k_x a} \qquad (III.2.20)$$

Operatori površinskih eksitona transformišu se po pravilu:

$$B_{f_x, f_y} = \sum_{k_x, \rho'} \sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}}\, e^{i f_x k_x a}\left[e^{-f_y\rho} + e^{-(N_y - f_y)\rho}\right] B_{k_x, \rho'} \qquad (III.2.21)$$

tako da je jednočestična talasna funkcija oblika

$$|1_{k_x, \rho'}\rangle = \sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x}}\, e^{i f_x k_x a}\left[e^{-f_y\rho} + e^{-(N_y - f_y)\rho}\right] B^+_{k_x, \rho'}|0\rangle \qquad (III.2.22)$$

III.3. TRODIMENZIONALNA STRUKTURA

Hamiltonijan za ovaj slučaj je

$$H_2=(\Delta+\Delta'+5D)\sum_{n_x,n_y;n_x,n_y,N_z}(B^+_{n_x,n_y,0}B_{n_x,n_y,0}+B^+_{n_x,n_y,N_z}B_{n_x,n_y,N_z})+$$
$$+M\sum_{n_x,n_y;n_x,n_y,N_z}[B^+_{n_x,n_y,0}(B_{n_x+1,n_y,0}+B_{n_x-1,n_y,0}+B_{n_x,n_y+1,0}+B_{n_x,n_y-1,0}+$$
$$+B_{n_x,n_y,1})+B^+_{n_x,n_y,N_z}(B_{n_x+1,n_y,N_z}+B_{n_x-1,n_y,N_z}+B_{n_x,n_y+1,N_z}+B_{n_x,n_y-1,N_z}+$$
$$+B_{n_x,n_y,N_z+1}+B_{n_x,n_y,N_z-1})]+(\Delta+6D)\sum_{n_x,n_y,n_z=1}^{N_z-1}B^+_{n_x,n_y,n_z}B_{n_x,n_y,n_z}+$$
$$+M\sum_{n_x,n_y,n_z=1}^{N_z-1}B^+_{n_x,n_y,n_z}(B_{n_x+1,n_y,n_z}+B_{n_x-1,n_y,n_z}+B_{n_x,n_y+1,n_z}+B_{n_x,n_y-1,n_z}+$$
$$+B_{n_x,n_y,n_z+1}+B_{n_x,n_y,n_z-1})\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(III.3.1)$$

Jednačine kretanja glase;

$$[E+(\Delta+6D)]B_{f_x,f_y,0}-M(B_{f_x+1,f_y,0}+B_{f_x-1,f_y,0}+B_{f_x,f_y+1,0}+B_{f_x,f_y-1,0}+$$
$$+B_{f_x,f_y,1}+B_{f_x,f_y,-1})=(\Delta'-D)B_{f_x,f_y,0}-MB_{f_x,f_y,-1}\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(III.3.2)$$

$$[E-(\Delta+6D)]B_{f_x,f_y,N_z}-M(B_{f_x+1,f_y,N_z}+B_{f_x-1,f_y,N_z}+B_{f_x,f_y+1,N_z}+$$
$$+B_{f_x,f_y-1,N_z}+B_{f_x,f_y,N_z+1}+B_{f_x,f_y,N_z-1})=$$
$$=(\Delta'-D)B_{f_x,f_y,N_z}-MB_{f_x,f_y,N_z+1}\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(III.3.3)$$

$$[E-(\Delta+6D)]B_{f_x,f_y,f_z}-M(B_{f_x+1,f_y,f_z}+B_{f_x-1,f_y,f_z}+B_{f_x,f_y+1,f_z}+$$
$$B_{f_x,f_y-1,f_z}+B_{f_x,f_y,f_z+1}+B_{f_x,f_y,f_z-1})=0\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(III.3.4)$$

Operatori se transformišu;

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,k_z}U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_z)B_{k_x,k_y,k_z}\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(III.3.5)$$

gde je

$$U_{f_x,f_y,f_v}(k_x,k_y,k_z)=e^{if_xk_xa+if_yk_ya}[a_0\cos f_zk_za+$$
$$+a_1\sin f_zk_za)\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;.\;(III.3.6)$$

Jednačina (III.3.4) je zadovoljena ako je:

$$E=\Delta+6D+2M(\cos k_x a+\cos k_y a+\cos k_0 a) \quad \ldots\ldots \quad (III.3.7)$$

gde je

$$k_z=k_0=\frac{1}{a}\arccos\frac{\Delta'-D}{M} \quad \ldots\ldots \quad (III.3.8)$$

Konstanta a_0 je:

$$a_0=\sqrt{\frac{2}{N_x N_y(N_z+2)}} \quad \ldots\ldots \quad (III.3.9)$$

a

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,k_0)=\sqrt{\frac{2}{N_x N_y(N_z+2)}}\, e^{if_x k_x a+if_y k_y a}\, \times$$

$$\times \cos f_z k_0 a \quad \ldots\ldots \quad (III.3.10)$$

Operatori se transformišu po pravilu:

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,k_0}\sqrt{\frac{2}{N_x N_y(N_z+2)}}\, e^{if_x k_x a+if_y k_y a}\cos f_z k_0 a\, B_{k_x,k_y,k_0} \quad (III.3.11)$$

tako da je jednočestična talasna funkcija data izrazom $|1_{k_x,k_y,k_0}\rangle=\sqrt{\frac{2}{N_x N_y(N_z+2)}}\, e^{if_x k_x a+if_y k_y a}\cos f_z k_0 a\, B^{+}_{k_x,k_y,k_0}|0\rangle$

Za analizu površinskih stanja operatore transformišemo po pravilu:

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,\rho'}U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,\rho')\,B_{k_x,k_y,\rho'} \quad \ldots\ldots \quad (III.3.11)$$

gde je

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,\rho')=C\,e^{if_x k_x a+if_y k_y a}\left[e^{-f_z\rho}+e^{-(N_z-f_z)\rho}\right] \quad \ldots \quad (III.3.12)$$

Ako uzimamo da je:

$$U_{f_x,f_y,f_z}(k_x,k_y,\rho')=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_x N_y}}\, e^{if_x k_x a+if_y k_y a}\,\times$$

$$\times\left[e^{-f_z\rho}+e^{-(N_z-f_z)\rho}\right] \quad \ldots\ldots \quad (III.3.13)$$

ona zadovoljava jednačine (III.3.2), (III.3.3) i (III.3.4) ako je

$$\rho=\ln|(\Delta'-D)/M| \quad \ldots\ldots \quad (III.3.14)$$

$$E_\rho=\Delta+6D+2M(\cos k_x a+\cos k_y a+\cosh\rho) \quad \ldots\ldots \quad (III.3.15)$$

Pri tome stanja ovog tipa postoje ako je $|\Delta^2-D|>|M|$.
Operatori se transformišu po pravilu:

$$B_{f_x,f_y,f_z}=\sum_{k_x,k_y,\rho'}\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_xN_y}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya}\left[e^{-f_z\rho}+e^{-(N_z-f_z)\rho}\right]\times$$
$$\times B_{k_x,k_y,\rho'}\qquad\qquad(III.3.18)$$

tako da je jednočestična talasna funkcija

$$|1_{k_x,k_y,\rho'}\rangle=\sqrt{\frac{1-e^{-2\rho}}{N_xN_y}}\,e^{if_xk_xa+if_yk_ya}\left[e^{-f_z\rho}+e^{-(N_z-f_z)\rho}\right]\times$$
$$\times B^{+}_{k_x,k_y,\rho'}|0\rangle\qquad\qquad(III.3.19)$$

Kao što vidimo za sve tri dimenzije uslovi za postojanje zapreminskih i površinskih stanja su jedan drugome kontradiktorni. To znači da u tankim filmovima ne mogu postojati istovremeno i zapreminska i površinska stanja već ili samo jedna ili samo druga. Kako smo videli u polubeskonačnim strukturama ovo nije slučaj i postojanje jednih stanja ne isključuje mogućnost postojanja drugih.

ZAKLJUČAK

Rezultati ovog diplomskog rada se mogu rezimirati na sledeći način:

a) Formulisana je teorija površinskih i zapreminskih eksitona u polubeskonačnim molekularnim kristalima i to u jednoj, dve i tri dimenzije.

Hamiltonijan sistema i jednočestične talasne funkcije date su u reprezentaciji druge kvantizacije, što omogućuje široku primenu dobijenih rezultata.

Pokazano je da zapreminska stanja polubeskonačne strukture postoje uvek, dok površinska stanja postoje samo ako su ispunjeni izvesni uslovi, a ovi uslovi zavise od toga kako se menjaju dinamičke osobine molekula u površinskom sloju.

b) Formulisana je teorija zapreminskih i površinskih eksitona u tankim filmovima. Sve karakteristične veličine date su u reprezentaciji druge kvantizacije. Pokazono je da zapreminska stanja eksitona mogu da postoje samo za jednu fiksiranu vrednost komponente talasnog vektora koja leži u pravcu narušenja simetrije. Za sve ostale vrednosti ove komponente talasnog vektora zapreminskih eksitona se brzo „gase", tj. imaju kratko vreme ŽIVOTA. Površinska stanja takodje postoje samo pod izvesnim uslovima i za razliku od polubeskonačne strukture zapreminska i površinska stanja se uzajamno isključuju, a to znači da ako jedna vrsta stanja postoje onda druga vrsta sigurno ne može da postoji.

C) Na kraju treba napomenuti da se sve što je uradjeno u ovom diplomskom radu odnosi na tz. harmonijska stanja. Harmonijska stanja su ona stanja koja dopuštaju dijagonalizaciju hamiltonijana pa im je, bar teorijski, vreme života beskonačno dugo. Osim ovih stanja u strukturama sa narušenom simetrijom postoji i druga stanja čije vreme života konačno (obično veoma kratko). Ova stanja ovde nisu ispitana, a njihova teorijska analiza sastoji u tome što se kristal dopuni do idealne strukture, a narušenje simetrije se uzima za perturbaciju. Ova perturbacija dovodi do prigušenja ravnih talasa pa se zato ova stanja gase tako da u kristalu posle izvesnog vremena ostaju samo harmonijska stanja.

LITERATURA

1. В.М. Агранович „Теория экситонов" Москва 1968
2. А.С. Довыдов „Квантовая механика" Москва 1973.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц „Квантовая механика", превод, Београд 1960.
4. С.И. Пекар. ЖЭТФ, 33, 1022 (1957)
5. В.И. Сугаков, ФТТ, 5, 2207 (1963)
6. В.М. Агранович, ЖЭТФ, 37, 430 (1959)
7. А.С. Давыдов, „Теория молекулярных экситонов" »Наука« Москва (1968)

SADRŽAJ