D-97

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
GRUPA FIZIKA

DIPLOMSKI RAD

TEMA: VEZANA STANJA EKSITONA I FONONA

KOMAR Ž. DRAGOLJUB

Zahvaljujem se i ovom prilikom dr. Brati - slavu Tošiću za stalnu pomoć i nadzor pri izradi ovog diplomskog rada.

Sadržaj:

Uvod

Ovaj diplomski rad obrađuje problem vezanih stanja Frenkelovih eksitona i longitudinalnih fonona u molekularnim kristalima. Poznato je da postoje vezana stanja ekscitacija istog tipa. Takvi su, naprimer, bieksitoni i bimagnoni, pri čemu prvi predstavljaju vezano stanje dva slobodna eksitona a drugi vezano stanje dva spinska talasa.

Sama pojava vezanih stanja objašnjava se na sledeći način: Ako u kristalu ekscitiramo dva centra onda mogu te dve ekscitacije da se ponašaju na dva načina. Jedan od mogućih slučajeva je da se svaka od njih prostire kao nezavisan talas. Drugi slučaj je da se ta talasanja rezonantno vežu u jedan novi talas koje se zove vezano stanje. Pošto je za vezivanje ova dva talasa potrebno utrošiti neku energiju očigledno je da je energija vezanog stanja mora da bude nešto manja od sume energija dva nezavisna talasa. Po tome se vezano stanje i raspoznaje i pri teorijskom računu i eksperimentu.

U ovom slučaju razmatraće se mogućnost vezivanja dva različita tipa talasa, od kojih je jedan optičko pobuđenje (eksiton) a drugi kolektivna mehanička oscilacija kristala (fonon). Sa matema -

tičke tačke gledišta ovaj problem je teži nego izračunavanje procesa vezivanja dve ekscitacije istog tipa, i ne može se egzaktno rešiti. Rešenje ćemo ovde naći u aproksimaciji u kojoj se odbacuju dvofononski procesi koji su statistički malo verovatni.

Glava I

Eksiton-fonon interakcija

I.1. Fononi

Potencijalna energija kristala, ako su u njemu dominantne dvočestične interakcije, može se napisati u obliku:

$$U=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) \qquad \text{(I.1.1)}$$

$\vec{n}$ i $\vec{m}$ su vektori čvorova rešetke na apsolutnoj nuli. Ako se pak povisi temperatura atomi počinju da osciluju i svaki čvor rešetke će dobiti neki priraštaj $\vec{U}_{\vec{n}}$ tj.

$$\vec{n}\to\vec{n}+\vec{U}_{\vec{n}} \quad i \quad \vec{m}\to\vec{m}+\vec{U}_{\vec{m}} \qquad \text{(I.1.2)}$$

Dobijeni pomaci, ako su mali, $\vec{U}_{\vec{n},\vec{m}}$ i s obzirom na (I.1.2) potencijalnu energiju možemo napisati, posle razvijanja funkcije u red, kao:

$$U=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} V[(\vec{n}-\vec{m})+(\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}})]\cong$$

$$\cong\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m})+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}}(\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}}V(\vec{n}-\vec{m})+$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{\vec{n},\vec{m}}\left[(\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}}\right]^2 V(\vec{n}-\vec{m})=$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m})+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha}(U^{\alpha}_{\vec{n}}-U^{\alpha}_{\vec{m}})\frac{\partial}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\alpha}}V(\vec{n}-\vec{m})+$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha,\beta}(U^{\alpha}_{\vec{n}}-U^{\alpha}_{\vec{m}})(U^{\beta}_{\vec{n}}-U^{\beta}_{\vec{m}})\frac{\partial^2}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\alpha}\cdot\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\beta}}V(\vec{n}-\vec{m}) \qquad \text{(I.1.3)}$$

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

gde je $U_{\vec{n}}^{\alpha}$ - projekcija $\vec{U}_{\vec{n}}$ na α osu. Funkcija $V(\vec{n}-\vec{m})$ je takva da mora imati ekstremume između čvorova, pa je shodno tome :

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

za sve $\vec{n}, \vec{m}$ i α.

U formuli (I.1.3) druge izvode obeležićemo sa :

$$\Lambda_{\alpha,\beta}(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_\alpha \partial(\vec{n}-\vec{m})_\beta} \quad \ldots\ldots\ldots (I.1.4)$$

Ove funkcije $\Lambda_{\alpha\beta}$ imaju ovo svojstvo simetrije

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{n}-\vec{m}) = \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{m}-\vec{n}) = \Lambda_{\beta\alpha}(\vec{m}-\vec{n}). \quad (I.1.5)$$

Prvi član u (I.1.3) predstavlja potencijalnu energiju zamrznutog kristala. Ako njega odbacimo, onda nam ostaje potencijalna energija, zbog povišenja temperature:

$$U_{f\vec{m}} = \frac{1}{4} \sum_{\vec{n},\vec{m},\alpha,\beta} \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})(U_{\vec{n}}^{\alpha} - U_{\vec{m}}^{\alpha})(U_{\vec{n}}^{\beta} - U_{\vec{m}}^{\beta}) \quad \ldots (I.1.6)$$

Ako sa $F_{\vec{n}}^{\alpha}$ obeležimo α- komponentu sile na n-ti čvor, koja je data kao negativni izvod potencijalne energije po projekciji :

$$F_{\vec{n}}^{\alpha} = \frac{\partial U_{f\vec{m}}}{\partial U_{\vec{n}}^{\alpha}} = -\sum_{\vec{n},\vec{m},\beta} \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})(U_{\vec{n}}^{\beta} - U_{\vec{m}}^{\beta}) \quad \ldots\ldots (I.1.7)$$

$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m}) \to \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{\nu}) \equiv \Lambda_{\alpha\beta}$ važi za najbliže susede

$\vec{\nu}$-spaja ove najbliže susede za fiksirani atom.

Pošto se radi o istom rastojanju $\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{\nu})$ ne zavisi od $\vec{\nu}$.

Prema tome, za najbliže susede:

$$F_{\vec{n}}^{\alpha}=-\sum_{\beta}\Lambda_{\alpha\beta}\sum_{\vec{\nu}}(U_{\vec{n}}^{\beta}-U_{\vec{n}+\vec{\nu}}^{\beta}) \quad \ldots\ldots\ldots (I.1.8)$$

Na osnovu drugog Njutnovog zakona, ako sa M označimo masu atoma, biće:

$$M\ddot{U}_{\vec{n}}^{\alpha}=F_{\vec{n}}^{\alpha}=\sum_{\beta}\Lambda_{\alpha\beta}\sum_{\vec{\nu}}(U_{\vec{n}}^{\beta}-U_{\vec{n}+\vec{\nu}}^{\beta}) \quad \ldots\ldots (I.1.9).$$

Uzmimo i predpostavku da su komponente pomaka $U_{\vec{n}}^{\alpha}$ periodične funkcije prostora i vremena tj.:

$$U_{\vec{n}}^{\alpha}=A^{\alpha}\cdot e^{i(\vec{K}\vec{n}-\omega_{\vec{K}}t)} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (I.1.10)$$

Ako vratimo (I.1.10) u (I.1.9) dobija se sistem jednačina za određivanje komponenti atomskih pomeraja:

$$\left.\begin{aligned}
&[\Lambda_{xx}-\frac{M}{f_{\vec{K}}}\omega_{\vec{K}}^{2}]U_{\vec{n}}^{x}+\Lambda_{xy}U_{\vec{n}}^{y}+\Lambda_{xz}\cdot U_{\vec{n}}^{z}=0\\
&\Lambda_{yx}U_{\vec{n}}^{x}+[\Lambda_{yy}-\frac{M}{f_{\vec{K}}}\omega_{\vec{K}}^{2}]U_{\vec{n}}^{y}+\Lambda_{yz}U_{\vec{n}}^{z}=0\\
&\Lambda_{zx}U_{\vec{n}}^{x}+\Lambda_{zy}U_{\vec{n}}^{y}+[\Lambda_{zz}-\frac{M}{f_{\vec{K}}}\omega_{\vec{K}}^{2}]U_{\vec{n}}^{z}=0
\end{aligned}\right\} \quad \ldots (I.1.11)$$

gde je $\quad f_{\vec{K}}=\sum_{\nu}(1-e^{i\vec{K}\vec{\nu}}) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (I.1.12)$

Determinanta ovog sistema mora biti jednaka nuli da bi sistem imao netrivijalna rešenja.

Ta determinanta je:

$$\begin{vmatrix} \Lambda_{xx}-\frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega_{\vec{k}}^2 & \Lambda_{xy} & \Lambda_{xz} \\ \Lambda_{yz} & \Lambda_{yy}-\frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega_{\vec{k}}^2 & \Lambda_{yz} \\ \Lambda_{xz} & \Lambda_{zy} & \Lambda_{zz}-\frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega_{\vec{k}}^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \ldots \quad (I.1.13)$$

Iz ove jednačine dobijaju se tri dozvoljene frekvence fonona. Za prostu jednodimenzionu rešetku je:

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

Prema tome, funkcija se svodi na:

$$\Lambda_{xx} - \frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega_{\vec{k}}^2 = 0$$

i dobijamo

$$\omega_{\vec{k}} = 2\sqrt{\frac{\Lambda}{M}}\left|\sin\frac{\vec{k}a}{2}\right| \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.1.14)$$

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

U slučaju malih talasnih vektora formula (I.1.14) biće:

$$\omega_{\vec{k}} = c\vec{k} \qquad c = a\sqrt{\frac{\Lambda}{M}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.1.15)$$

c- brzina zvuka

Kinetička energija za jednodimenzionu rešetku je:

$$T = \frac{M}{2}\sum_{\vec{n}}\dot{U}_{\vec{n}}^2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.1.16)$$

Potencijalna energija za najbliže susede na osnovu formule (I.1.6) je:

$$U_{fon} = \frac{\Lambda}{2}\sum_{\vec{n}}\left(U_{\vec{n}+1} - U_{\vec{n}}\right)^2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.1.17)$$

Po tome, totalni hamiltonijan sistema je:

$$H=T+U_{fon}=\frac{M}{2}\sum_{\vec{n}}\dot{U}_{\vec{n}}^{2}+\frac{\Lambda}{2}\sum_{\vec{n}}(U_{\vec{n}+1}-U_{\vec{n}})^{2} \quad . \ . \ . \ (I.1.18)$$

Umesto rešenja tipa (I.1.10) uzima se linearna kombinacija:

$$U=\sum_{\vec{K}}D_{\vec{K}}(b_{\vec{K}}\cdot e^{i\vec{K}\vec{n}a-i\omega_{\vec{K}}t}+b_{\vec{K}}e^{-i\vec{K}\vec{n}a+i\omega_{\vec{K}}t})\ . \ . \ . \ . \ (I.1.19)$$

Ova rešenja zadovoljavaju jednačinu:

$$M\ddot{U}_{\vec{n}}=\Lambda(U_{\vec{n}+1}+U_{\vec{n}-1}-2U_{\vec{n}})\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ (I.1.20)$$

Zamenom (I.1.19) u (I.1.18) svešće se hamiltonijan kuplovanih oscilatora (I.1.18), u prostoru rešetke, na Hamiltonijan sume nezavisnih oscilatora u prostoru inverzne rešetke (impulsni prostor).

$$H=\sum_{\vec{K}}(\overset{+}{b}_{\vec{K}}b_{\vec{K}}+\frac{1}{2})\hbar\omega_{\vec{K}}\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ (I.1.21)$$

Pošto ima oblik:

$$U_{\vec{n}}=\sum_{\vec{K}}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{K}}}}(b_{\vec{K}}e^{i\vec{K}\vec{n}a-i\omega_{\vec{K}}t}+\overset{+}{b}_{\vec{K}}e^{-\vec{K}\vec{n}a+i\omega_{\vec{K}}t})\ . \ . \ (I.1.22)$$

Ovde su $b_{\vec{K}}$ i $\overset{+}{b}_{\vec{K}}$ boze operatori. Oni imaju svojstvo da kreiraju i anihiliraju fonone sa talasnim vektorom $\vec{K}$.

Znači, formulom (I.1.22) svodi se sistem vezanih oscilatora, opisan hamiltonijanom (I.1.18), na sumu hamiltonijana nezavisnih oscilatora (I.1.21). Zavisnost frekvencije ω od talasnog vektora $\vec{K}$ tj. zakon disperzije za fonone dat je formulom (I.1.14).

Zakon disperzije je linearan za male talasne vektore $\omega_{\vec{K}}=c\vec{K}$, c - brzina zvuka $c=a\sqrt{\frac{\Lambda}{M}}$.

Spomenuli smo da je frekvencija (dozvoljena) za slučaj tri dimenzije određena izrazom (I.1.13). Jednačina je bikubna i daje tri pozitivna rešenja za frekvenciju ω. Ako je rešetka složena sa σ molekula-atoma u elementarnoj ćeliji, onda jednačina tipa (I.1.13) bi bila složenija i davala bi 3σ rešenja za dozvoljene frekvencije fonona.

Ako je ćelija prosta, onda tri frekvencije dobijene iz (I.1.13) teže nuli kada $\vec{k}\to 0$. Takvi fononi zovu se AKUSTIČNI fononi.

Kod složene rešetke za tri frekvencije važi isto pravilo $\omega_{\vec{k}} \to 0$ kad $\vec{k}\to 0$, a za preostale $3\sigma-3$ frekvencije, frekvencije ne postaju jednake nuli kada $\vec{k}\to 0$ i ovi fononi se zovu OPTIČKI fononi.

Svakoj od tri akustičke frekvencije, za slučaj proste prostorne rešetke, odgovara jedan polarizacioni vektor $\vec{l}_j(\vec{k})$, $j=1,2,3$. Ovi vektori zadovoljavaju uslov:

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

Ova tri vektora odgovaraju trima komponentama zvuka i to jednoj longitudinalnoj i dvema transverzalnim. Hamiltonijan sistema i operator pomaka imaju oblik:

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

i

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

I.2. Eksitoni

Eksitoni se pojavljuju u molekularnim kristalima kao rezultat dipol-dipol interakcije. Pobuđenja u kristalima, koja su indukovana svetlošću, zovu se eksitoni. Postoje dva tipa eksitona i to eksitoni Vanije-Mota i Frenkelovi eksitoni. Frenkelovi eksitoni su eksitoni u molekularnim kristalima, a Vanije-Mota su u poluprovodnicima. Energije su im 3-5 eV tj. reda veličine vidljive svetlosti koja ih indukuje.

Razlika je u veličini njihovog radijusa i to ako se shvate kao kvazičestice svernog oblika. Kod eksitona Vanije-Mota radijus je i nekoliko mikrona, dok je kod Frenklinovih eksitona i nekoliko angstrema.

Eksiton Vanije-Mota nastaje tako što svetlost iz popunjene zone u poluprovodniku izbaci jedan elektron u provodnu zonu. Iza njega će dakle ostati „šupljina" koja se ponaša kao pozitivno naelektrisanje. Između elektrona i šupljine postoji privlačna Kulonova sila. Ako je jaka da ih drži vezane, ne teče struja u poluprovodniku. Znači vezani kompleks elektron-šupljina se ponaša kao neutralna celina. Ovaj neutralni kompleks pomera se kroz kristal kao neki talas-(kvazičestica). Ovaj talas se zove eksiton Vanije-Mota.

Kod Frenkelovih eksitona svetlost takođe stvara „šupljinu" i elektron ali ovaj neutralan kompleks ostaje na samom molekulu. Zato oni imaju mali radijus. To ne znači da eksitacija jednog molekula ostaje lokalizovana na samom molekulu. Kada se molekul ekscitira, to će izazvati promenu matričnih elemenata interakcije između molekula i ekscitacija, usled ovog prelazi sledeći molekul, tako da se prenese na sve molekule. Ovakav talas pobuđenja se zove Frenkelov eksiton.

Ovi eksitoni se javljaju u molekularnim kristalima. Tu spadaju: antracen, naftalin, benzol u čvrstom stanju i plemeniti gasovi u čvrstom stanju. Molekuli ovih kristala su jako izraženi dipoli pa se javljaju sile dipol-dipol tipa. Potencijal dipol-dipol interakcije je:

$$V_{\vec{n},\vec{m}}=e^2\frac{\vec{r}_{\vec{n}}\cdot\vec{r}_{\vec{m}}}{|\vec{n}-\vec{m}|^3}-3\,e^2\frac{[\vec{r}_{\vec{n}}(\vec{n}-\vec{m})][\vec{r}_{\vec{m}}(\vec{n}-\vec{m})]}{|\vec{n}-\vec{m}|^5}\quad\quad (I.2.1)$$

gde su: $\vec{n}$ i $\vec{m}$ vektori kristalne rešetke a $\vec{r}_{\vec{n}}$ i $\vec{r}_{\vec{m}}$ vektori dipola molekula na mestu $\vec{n}$ i $\vec{m}$ u rešetci.

Interakcija opada sa trećim stepenom rastojanja između molekula. Prvi deo ove interakcije zavisi samo od inteziteta rastojanja između molekula. Taj deo se zove analitički deo. Drugi deo zavisi od intenziteta rastojanja i od uglova koje vektori-dipoli zaklapaju sa rastojanjem $\vec{n}-\vec{m}$. Ovaj deo se zove neanalitički deo. Ovaj naziv je usled toga što Furije lik ovog dela zavisi od pravca prostiranja eksitona, tako da eksiton za svaki pravac prostiranja ima drugi zakon disperzije. Često se neanalitički deo zakona disperzije odbacuje i eksitoni dobijeni u ovakoj aproksimaciji se zovu mehanički eksitoni. Svetlost koja indukuje eksiton, može da izazove dva efekta. Prvi je promena stanja elektrona u molekulu, a drugi se sastoji u promeni stanja unutrašnjih molekulskuh vibracija. Ove promene se kolektivizuju u kristalu. Ovakve kolektivne ekscitacije se često zovu vibronima. Nas će zanimati Frenkelovi eksitoni tj. eksitoni koji nastaju usled promene stanja elektrona u individualnim molekulima.

Za ovaj slučaj hamiltonijan molekularnog kristala možemo da posmatramo kao hamiltonijan sa dvočestičnim fermionskim interakcijama. U reprezentaciji druge kvantizacije ovakav hamiltonijan ima oblik :

$$H = \sum_{\vec{n},f} E_{\vec{n}f} \, A^{+}_{\vec{n}f} A_{\vec{n}f} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ f_1 f_2 f_3 f_4}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4) \, A^{+}_{\vec{n}f_1} A^{+}_{\vec{m}f_2} A_{\vec{m}f_3} A_{\vec{n}f_4} \quad \ldots \quad (I.2.2)$$

gde su : $f_1 f_2 f_3 f_4$ - skupovi kvantnih brojeva koji karakterišu stanje elektrona, $E_{\vec{n}f}$ - energija elektrona u stanju f, $V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4)$ - matrični elementi operatora dipol-dipol interakcije po svojstvenim stanjima elektrona u izolovanom molekulu. Operatori $A^{+}_{\vec{n}f}$ i $A_{\vec{n}f}$ „stvaraju" odnosno „uništavaju" elektron u čvoru n u stanju f. Ako je $H_{\vec{n}}$ hamiltonijan molekula na mestu $\vec{n}$ onda je njegov problem dat:

$$H_{\vec{n}} \varphi^{+}_{\vec{n}} = E^{+}_{\vec{n}} \varphi^{+}_{\vec{n}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.2.3)$$

$E^{+}_{\vec{n}}$ - su energije izolovanog molekula, $\varphi^{+}_{\vec{n}}$ - su svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula. Matrični elementi interakcije dva molekula sa raznim nivoima f_1, f_2, f_3, f_4 su:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1, f_2, f_3, f_4) = \int \varphi^{*f_1}_{\vec{n}} \varphi^{*f_2}_{\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}} \varphi^{f_3}_{\vec{m}} \varphi^{f_4}_{\vec{n}} \, d\tau_{\vec{n}} \, d\tau_{\vec{m}} \quad \ldots \quad (I.2.4)$$

$d\tau_{\vec{n}}$ i $d\tau_{\vec{m}}$ predstavljaju elemente zapremine prostora koju zauzimaju molekuli na mestima $\vec{n}$ i $\vec{m}$. Talasne funkcije φ brzo opadaju sa rastojanjem pa se integral (I.2.4) može smatrati kao integral po beskonačnoj zapremini.

Uzmimo da se elektron može naći u molekulu u osnovnom „0" i pobuđenom stanju f. Ova šema se zove šema sa dva nivoa. Ona je opravdana ako su fotoni kojima pobuđujemo kristal monohromatski. Ona je opravdana, i ako fotoni nisu monohromatski, ako su mogući ostali nivoi energetski dosta različiti od nivoa f.

Hamiltonijan (I.2.2) nije zgodan ni sa mate -

matičke niti fizičke strane. Fizički posmatrano, eksiton nije pobuđen elektron već kvant pobuđenja molekula kristala. Zato se umesto fermi operatora $A_{\vec{n}f}$ uvode operatori $P_{\vec{n}}$ na ovaj način:

$$P_{\vec{n}}^{+} = A_{\vec{n}f}^{+} A_{\vec{n}o} \qquad P_{\vec{n}} = A_{\vec{n}o}^{+} A_{\vec{n}f} \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.5)$$

Operatori $P_{\vec{n}}^{+}$ opisuju proces u kome je nestao jedan elektron u osnovnom stanju a kreirao se u pobuđenom stanju. f. $P_{\vec{n}}^{+}$ kreira kvant pobuđenja sa energijom $E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}o}$. Operator $P_{\vec{n}}$ opisuje proces u kome je „nestao" elektron u pobuđenom a stvorio se u osnovnom stanju „O". $P_{\vec{n}}$ uništava kvant pobuđenja sa energijom $E_{\vec{n}f} - E_{\vec{n}o}$.

$P_{\vec{n}}$ i $P_{\vec{n}}^{+}$ kao operatori nemaju fermionske komutatorske relacije. Nemaju ni bozonske pa su između Boze i Fermi operatora sa statističke tačke gledišta. Ovi operatori se zovu Pauli. Njihove komutacione relacije se izvode preko komutacionih relacija za Fermi operatore uz jedan dopunski uslov. Ako neki elektron može da zaposedne svega dva stanja „o" i f, onda zbog Paulijevog principa za svaki čvor rešetke kompletan fermionski prostor je:

$$|0_o\, 0_f> \; |1_o\, 1_f> \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.6)$$

$$|1_o\, 0_f> \; |0_o\, 1_f> \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.7)$$

Prema definiciji Paul operatora (I.2.5) oni su identički ravni nuli u prostoru (I.2.6). Znači, na fizičke karakteristike sistema ovaj podprostor ne može uticati, pa ga nećemo razmatrati. U podprostoru (I.2.7) Pauli operatori nisu jednaki nuli. Oni deluju na funkcije iz tog podprostora i daju funkcije iz tog podprostora. U podprostoru (I.2.7) važi uslov :

$$\overset{+}{A}_{\vec{n}f} A_{\vec{n}f} + \overset{+}{A}_{\vec{n}o} A_{\vec{n}o} = 1 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.2.8)$$

Za Pauli operatore dobijamo ove komutacione zakone, ako se uslov (I.2.8) kombinuje sa komutacionim relacijama za Fermi operatore :

$$[P_{\vec{n}}, \overset{+}{P}_{\vec{m}}] = |1 - 2\overset{+}{P}_{\vec{n}} P_{\vec{n}}|\, \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [\overset{+}{P}_{\vec{n}}, \overset{+}{P}_{\vec{m}}] = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.2.9)$$

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

$$\overset{+}{P}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = \overset{+}{A}_{\vec{n}f} A_{\vec{n}f} = 0 \text{ ili } 1$$

Za različite čvorove rešetki Pauli operatori se ponašaju kao Boze operatori, dok se za jedan čvor Pauli operatori ponašaju kao Fermi operatori.

Ako uzmemo u obzir da indeksi f_1, f_2, f_3, f_4 mogu uzimati samo vrednosti „0" i „f" u hamiltonijanu (I.2.2) i ako iskoristimo definiciju Pauli operatora i komutacione relacije, dobiće se hamiltonijan u paulinskoj reprezentaciji :

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} \overset{+}{P}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \alpha_{\vec{n}\vec{m}} \overset{+}{P}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} (\overset{+}{P}_{\vec{n}} \overset{+}{P}_{\vec{m}} + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}) + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \gamma_{\vec{n}\vec{m}} \overset{+}{P}_{\vec{n}} \overset{+}{P}_{\vec{m}} P_{\vec{n}} P_{\vec{m}} \quad \ldots\ldots \quad (I.2.10)$$

gde su:

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

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

$$2\alpha_{\vec{n}\vec{m}} = V_{\vec{n}\vec{m}}(f0,f0) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0f,0f)$$

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

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

$$V_0(f_1,f_2,f_3,f_4) = \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1,f_2,f_3,f_4) \quad \ldots\ldots (I.2.11)$$

$E_{\vec{n}f}$ i $E_{\vec{n}0}$ ne zavise od indeksa rešetke $\vec{n}$ ako je pri dobijanju (I.2.10) uzeta činjenica da se molekuli medusobno ne razlikuju. Predpostavlja se da kristal ima centar inverzije, koji se poklapa sa centram inverzije izolovanog molekula. Zbog toga su matrični elementi tipa:

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

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

ravni nuli.

Veliki deo fermionskih interakcija je uključen u kvadratni deo paulinskog hamiltonijana pri prelazu sa Fermi na Pauli operatore. Fizički ovo znači da se pri ovom prelasku uključili interakcije čestica u hamiltonijan gasa kvazičestica. Autor ove ideje je Bogoljubov a metod se zove metod približne druge kvantizacije. Fizička suština je zamena sistema jako intereagujućih čestica sistemom slabo intereagujućih kvazičestica.

Treba zameniti Pauli operatore u (I.2.10) Boze operatorima B^+ i B po formulama:

$$P_{\vec{n}} = B_{\vec{n}} \quad P^+_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} \quad P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.12)$$

Ova zamena unosi grešku koja je manja ako je broj ekscitiranih molekula manji. Zamena je dobra po formuli (I.2.12) za mali broj bozona tj. dok je sistem slobo ekscitovan.

Hamiltonijan metode približne druge kvantizacije za ekscitonski sistem je:

$$H = \mathcal{E}_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \widehat{\alpha}_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \beta_{\vec{n}\vec{m}} \left(B^+_{\vec{n}} B^+_{\vec{m}} + B_{\vec{m}} B_{\vec{n}} \right) \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.13)$$

Posle Furije transformacije Boze operatora:

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

$$B^+_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B^+_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} B^+_{-\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \quad \ldots\ldots \quad (I.2.14)$$

Hamiltonijan (I.2.13) je tada:

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

$$\widehat{\alpha}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} \widehat{\alpha}_{\vec{n}0} e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad \beta_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} \beta_{\vec{n}0} e^{i\vec{k}\vec{n}} \quad \ldots\ldots \quad (I.2.15)$$

Hamiltonijan se može dijagonalizovati prelaskom na nove Boze operatore $B_{\vec{k}}$ na način:

$$B_{\vec{k}} = U_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} b^+_{-\vec{k}} \qquad B^+_{\vec{k}} = U_{\vec{k}} b^+_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} b_{-\vec{k}} \quad \ldots\ldots \quad (I.2.16)$$

Transformacione funkcije $U_{\vec{K}}$ i $V_{\vec{K}}$ su po predpostavci parne i realne. Na $U_{\vec{K}}$ i $V_{\vec{K}}$ treba postaviti uslov kanoničnosti transformacije, da bi $b_{\vec{K}}$ bili Boze operatori. Komutator B^+ i B na osnovu (I.2.16) je:

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

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

da bi b^+ i b bili Boze operatori mora biti:

$$[b_{\vec{K}}, b^+_{\vec{K}}] = 1 \quad [b^+_{-\vec{K}}, b_{-\vec{K}}] = -1 \quad [b_{\vec{K}}, b_{-\vec{K}}] = [b^+_{-\vec{K}}, b^+_{\vec{K}}] = 0$$

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

$$U^2_{\vec{K}} - V^2_{\vec{K}} = 1 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.2.17)$$

Kada se oslobodimo nedijagonalnih članova proporcionalnih $b^+_{\vec{K}} b^+_{-\vec{K}} + b_{-\vec{K}} b_{\vec{K}}$ i kada smenimo (I.2.16) u (I.2.15) dobijamo dijagonalizovan eksitonski hamiltonijan u obliku:

$$H = \mathcal{E}_0 + \frac{1}{2}\sum_{\vec{K}} \left[\sqrt{(\Delta + \widehat{\alpha}_{\vec{K}})^2 - \beta^2_{\vec{K}}} - \Delta - \widehat{\alpha}_{\vec{K}}\right] +$$

$$+ \sum_{\vec{K}} \sqrt{(\Delta + \widehat{\alpha}_{\vec{K}})^2 - \beta^2_{\vec{K}}}\; b^+_{\vec{K}} b_{\vec{K}} \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.18)$$

Zakon disperzije za eksitone je:

$$E_{e(\vec{K})} = \frac{\partial H}{\partial b^+_{\vec{K}} b_{\vec{K}}} = \sqrt{(\Delta + \widehat{\alpha}_{\vec{K}})^2 - \beta^2_{\vec{K}}} \quad \ldots\ldots\ldots \quad (I.2.19)$$

Δ je reda 3-5 eV, α i β 0,1-0,01 eV. Zato koren u (I.2.19) razvijamo u red:

$$E_{e(\vec{K})} = \sqrt{(\Delta + \widehat{\alpha}_{\vec{K}})^2 - \beta^2_{\vec{K}}} = (\Delta + \widehat{\alpha}_{\vec{K}})\sqrt{1 - \frac{\beta^2_{\vec{K}}}{(\Delta + \widehat{\alpha}_{\vec{K}})^2}} \cong$$

$$\cong (\Delta+\widehat{\alpha}_{\vec{k}})[1-\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec{k}}^2}{(\Delta+\widehat{\alpha}_{\vec{k}})^2}] = \Delta+\widehat{\alpha}_{\vec{k}}-\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec{k}}^2}{(\Delta+\widehat{\alpha}_{\vec{k}})} \cong$$

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

$$E_{e(\vec{k})} = \Delta+\widehat{\alpha}_{\vec{k}}-\frac{\beta_{\vec{k}}^2}{2\Delta} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.2.20)$$

Da bi bliže upoznali karakteristike eksitona predpostavićemo:

a) da je u $\widehat{\alpha}_{\vec{k}}$ i $\widehat{\beta}_{\vec{k}}$ bitan samo analitički deo operatora dipol-dipol interakcije,

b) da je aproksimacija najbližih suseda dobra aproksimacija,

c) ograničićemo se na oblast malih talasnih vektora,

d) posmatraćemo kristal proste kubne strukture. Na osnovu a, b i d je:

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

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

$\widehat{\alpha}_{\vec{k}}$ i $\beta_{\vec{k}}$ su matrični elementi interakcije za najbliže susede, dok je a - konstanta režetke. Zbog c je:

$$\widehat{\alpha}_{\vec{k}} \cong 6\widehat{\alpha}-\widehat{\alpha}a^2k^2 \qquad \beta_{\vec{k}} = 6\beta-\beta a^2k^2$$

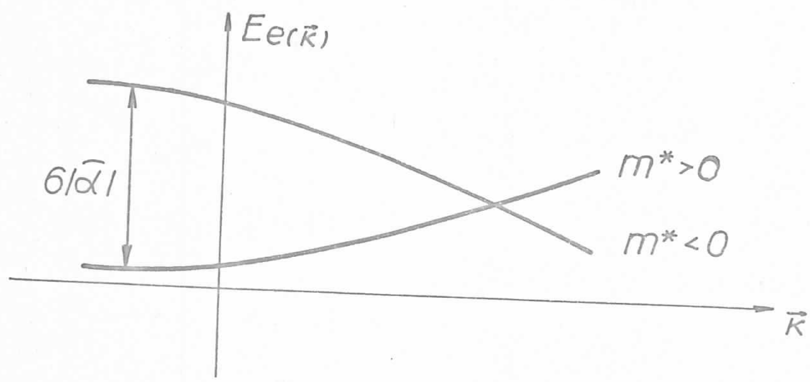
Ako ovo zamenimo u izraz za energiju biće:

$$E_{e(\vec{k})} = \widehat{\Delta}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*} \qquad \widehat{\Delta} = \Delta+6\widehat{\alpha}-\frac{18\beta^2}{\Delta}$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^3(\widehat{\alpha}-\frac{6\beta^2}{\Delta})} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (I.2.21)$$

Eksiton se u oblasti malih talasnih vektora ponaša kao čestica sa efektivnom masom m^*.

U slučaju da je $\tilde{\alpha} < 0$ eksiton ima pozitivnu efektivnu masu (pozitivnu disperziju), dok za $\tilde{\alpha} > 0$ eksiton ima negativnu efektivnu masu (negativnu disperziju). To grafički izgleda ovako:



sl. 1

Eksiton ima „gep" zakon disperzije. Fizički smisao „gepa" je: to je energija pobuđivanja izolovanog molekula.

I.3. Eksiton-fonon interakcija

a) Standardna definicija

Napišimo eksitonski hamiltonijan u harmonijskoj aproksimaciji uz zanemarivanje efekta neodržanja:

$$H=\sum_{\vec{n}} \Delta_f B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \underbrace{W_{\vec{n}\vec{m}}(f0,0f)}_{D_{\vec{n}\vec{m}}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} +$$

$$+\sum_{\vec{n}\vec{m}} \underbrace{W_{\vec{n}\vec{m}}(f0,f0)}_{M_{\vec{n}\vec{m}}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}}$$

$$H=\sum_{\vec{n}} \Delta_f B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} M_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} \quad \text{(I.3.1a)}$$

Ovaj hamiltonijan važi za slučaj kada se svi molekuli nalaze u ravnotežnim položajima. To je slučaj niskih temperatura. Pri zagrevanju kristala molekuli osciluju oko ravnotežnih položaja, što se izražava na ovaj način:

$$\vec{n}=\vec{n}+\vec{U}_{\vec{n}} \qquad \vec{m}=\vec{m}+\vec{U}_{\vec{m}}$$

$\vec{U}_{\vec{n}}$ i $\vec{U}_{\vec{m}}$ su pomoci atoma i predstavljaju vektore koji su funkcije čvora rešetke. Za male temperature intezitet im je manji od konstante rešetke.

$$\left.\begin{aligned} D_{\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}}} &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{K}_3} D_{\vec{K}_3}\cdot e^{i\vec{K}_3(\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}})} \\ M_{\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}}} &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{K}_3} D_{\vec{K}_3}\cdot e^{i\vec{K}_3(\vec{n}-\vec{m}+\vec{U}_{\vec{n}}-\vec{U}_{\vec{m}})} \end{aligned}\right\} \text{(I.3.2a)}$$

Tada je:

$$B_{\vec n}=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec K_1} B_{\vec K_1}\cdot e^{i\vec K_1\vec n} \qquad B^+_{\vec n}=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec K_1} B^+_{\vec K_1} e^{-i\vec K_1\vec n}$$

$$\Delta\sum_{\vec n} B^+_{\vec n}B_{\vec n}=\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec K\vec g} B^+_{\vec g}B_{\vec K}\sum_{\vec K} e^{i\vec n(\vec K-\vec g)}=$$

$$=\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec K\vec g} B^+_{\vec g}B_{\vec K}\,N\delta_{\vec K\vec g}=\Delta\sum_{\vec K} B^+_{\vec K}B_{\vec K}$$

U izrazu $\sum_{\vec n\vec m} D_{\vec n\vec m}B^+_{\vec n}B_{\vec n}$ posle zamene pojaviće se dva člana od kojih prvi postaje $\sum_{\vec K} D_0 B^+_{\vec K}B_{\vec K}$ a u drugom članu uzimamo:

$$\vec U_{\vec n}=\sum_{\vec g j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec g j}}}\,\vec\ell_{\vec g j}\,(b_{-\vec g j}+b^+_{\vec g j})e^{-i\vec g\vec n}$$

$$\vec U_{\vec m}=\sum_{\vec g j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec g j}}}\,\vec\ell_{\vec g j}\,(b_{-\vec g j}+b^+_{\vec g j})e^{-i\vec g\vec m}$$

pa $\sum_{\vec n\vec m} D_{\vec n\vec m}B^+_{\vec n}B_{\vec n}$ prelazi u:

$$\sum_{\vec n\vec m} D_{\vec n\vec m}B^+_{\vec n}B_{\vec n}=i\sum_{\vec K\vec g j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec g j}}}\,D_{\vec g}(\vec g_j\cdot\vec\ell_{\vec g j})\cdot$$

$$\cdot B^+_{\vec K-\vec g}B_{\vec K}(b_{-\vec g j}+B^+_{\vec g j})$$

Na analogan način $\sum_{\vec n\vec m} M_{\vec n\vec m}B^+_{\vec n}B_{\vec m}$ prelazi u

$$\sum_{\vec K} M_{\vec K}B^+_{\vec K}B_{\vec K}+i\sum_{\vec K\vec g j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec g j}}}\Big\{(\vec K\vec\ell_{\vec g j})M-$$

$$-[(\vec K-\vec g)\vec\ell_{\vec g j}]M_{\vec K-\vec g}\Big\}B_{\vec K-\vec g}B_{\vec K}(b_{-\vec g j}+b^+_{\vec g j})$$

Na osnovu ovoga imamo:

$$H=H_{eks}+H_{int} \qquad\qquad (I.3.3a)$$

$$H_{eks} = \sum_{\vec{k}} (\Delta + D_0 + M_{\vec{k}}) B^{+}_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \quad \ldots\ldots \quad (I.3.4a)$$

$$H_{int} = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}j}}} \Big\{ D_{\vec{q}} (\vec{q}\,\vec{l}_j) + M_{\vec{k}} (\vec{k}\,\vec{l}_{\vec{q}j}) -$$

$$- M_{\vec{k}-\vec{q}} \left[(\vec{k}-\vec{q})\,\vec{l}_{\vec{q}j} \right] B^{+}_{\vec{k}-\vec{q}} B_{\vec{k}} (b_{-\vec{q}j} + b^{+}_{\vec{q}j}) \quad \ldots \quad (I.3.5a)$$

Ovaj izraz predstavlja standardnu definiciju za hamiltonijan eksiton-fonon interakcije u linearnoj aproksimaciji po malim pomacima molekula.

b. Nova definicija

Ovde ćemo razvijati po malim pomacima i operatore $B^+_{\vec n}$ i $B_{\vec n}$ pošto su oni funkcije položaja u rešetci. U standardnoj definiciji razvijani su samo matrični elementi $D_{\vec n\vec m}$ i $M_{\vec n\vec m}$. Imaćemo hamiltonijan (I.3.1.a)

$$H=\sum_{\vec n}\Delta B^+_{\vec n}B_{\vec n}+\sum_{\vec n\vec m}D_{\vec n\vec m}B^+_{\vec n}B_{\vec n}+\sum_{\vec n\vec m}M_{\vec n\vec m}B^+_{\vec n}B_{\vec m}\quad\ldots(\text{I}.3.1.b)$$

Potrebno je uraditi ove transformacije (razvoje):

$$\left.\begin{aligned}
&D_{\vec n\vec m}\equiv D_{\vec n-\vec m}\rightarrow D_{\vec n-\vec m+(\vec U_{\vec n}-\vec U_{\vec m})}=\\
&=\frac{1}{N}\sum_{\vec K_3}D_{\vec K_3}e^{i\vec K_3(\vec n-\vec m)+i\vec K_3(\vec U_{\vec n}-\vec U_{\vec m})}\\
&M_{\vec n\vec m}\equiv M_{\vec n-\vec m}\rightarrow M_{\vec n-\vec m+(\vec U_{\vec n}-\vec U_{\vec m})}=\\
&=\frac{1}{N}\sum_{\vec K_3}M_{\vec K_3}e^{i\vec K_3(\vec n-\vec m)+i\vec K_3(\vec U_{\vec n}-\vec U_{\vec m})}\\
&B^+_{\vec n}\rightarrow B_{\vec n+\vec U_{\vec n}}=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec K_1}B^+_{\vec K_1}\cdot e^{-i\vec K_1\vec n-i\vec K_1\vec U_{\vec n}}\\
&B_{\vec m}\rightarrow B_{\vec m+\vec U_{\vec m}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec K}B_{\vec K}e^{-i\vec K\vec m-i\vec K\vec U_{\vec m}}
\end{aligned}\right\}(\text{I}.3.2.b)$$

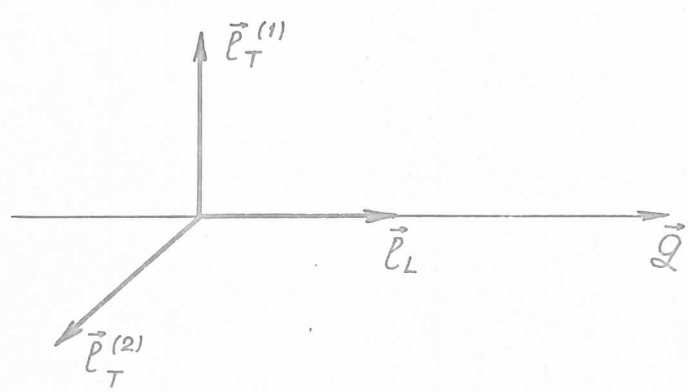
Analognim izvođenjem kao i u standardnoj definiciji, dolazi se do novog hamiltonijana interakcije:

$$H^{eff}_{int}=\frac{i}{\sqrt N}\sum_{\vec K\vec q j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec q j}}}(\vec q\,\vec \ell_{\vec q j})\cdot(\Delta+D_0+D_{\vec q}+$$

$$+M_{\vec K}+M_{\vec K-\vec q})B^+_{\vec K}B_{\vec K}(b_{-\vec q j}+b^+_{\vec q j})\quad\ldots\ldots(\text{I}.3.3.b)$$

Operatori su, kao i matrični elementi, razvijeni do linearnih članova. Iz (I.3.3.b) se vidi da nova definicija daje jaču interakciju eksiton-fonon, jer u njemu figuriše energija pobuđenja izolovanih molekula Δ koja je veća od $D_{\vec{n}\vec{m}}$ i $M_{\vec{n}\vec{m}}$

Interakcija postoji samo sa longitudinalnom granom što sledi iz faktora $(\vec{q}\,\vec{\ell}_{\vec{q}j})$.



sl. 2.

U novoj definiciji eksiton-fonon interakcije postoji i interakcija sa transverzalnim granama, ali je ona veoma slaba.

Glava II

Vezana stanja

II.1. Sve o vezanim stanjima uopšte

II.2. Osnovna jednačina za vezana stanja eksitona i fonona

II.3. Analiza rezultata

II.1. Sve o vezanim stanjima uopšte

Ako u kristal ubacimo toliko energije da se istovremeno ekscitiraju dva molekula, onda mogu da nastupe dva slučaja:

1.) Od svakog ekscitiranog molekula prostire se po jedan slobodni eksitonski talas sa energijom definisanom u (I.2.1).

2) Deo ubačene energije troši se na čvršće vezivanje para molekula tako da se talasi ekscitacije prenose kroz kristal tako da se uvek ekscitiraju po dva molekula odjednom.

Ovaj talas koji se sastoji u sinhronizovanom pobuđivanju para molekula zove se vezano stanje. Na osnovu onoga što je već rečeno očigledno je da bi vezano stanje moralo imati nešto manju energiju nego što je suma dva slobodna eksitona. Deo ubačene energije u kristalu troši se na vezivanje molekula u parove.

U slučaju koji će biti ispitivan u ovom diplomskom radu nije potrebno da se spolja ubaci energija za obrazovanje dva eksitona, već je potrebno pobuditi jedan eksiton i nešto zagrejati kristal da bi se u njemu pojavili fononi.

Prema tome, za ove procese - obrazovanje vezanog stanja eksitona i fonona - nisu nam potrebni jaki izvori svetlosti, kao laser, jer se do efekta može doći sa slabo optički pobuđenim kristalima. Jasno je da i u ovom slučaju mora da važi pravilo da je energija vezanog stanja manja od sume energija slobodnog eksitona i slobodnog fonona.

II.2. Osnovna jednačina za vezana stanja eksitona i fonona

Da bi smo izvršili teorijsku analizu vezanih stanja fonon-eksiton, poćićemo od hamiltonijana H_{TOT} takvog sistema napisanog u reprezentaciji Boze operatora. Problem vezanih stanja zgodnije je rešavati odmah u impulsnom prostoru, pa će mo zbog toga koristiti takav oblik hamiltonijana

$$H_{TOT} = H_{EKS} + H_{FON} + H_{EKS-FON} \quad \ldots\ldots\ldots (II.2.1)$$

gde je:

$$H_{EKS} = \sum_{K_1} (\Delta + \alpha_{K_1}) B^+_{K_1} B_{K_1} + \frac{1}{N} \sum_{K_1 K_2 K_3} (-\Delta - \alpha_{K_1} - \alpha_{K_3} + \beta_{K_1 - K_3}) \cdot$$

$$\cdot B^+_{K_1} B^+_{K_2} B_{K_3} B_{K_1 + K_2 - K_3}$$

$$H_{FON} = \sum_{K_1} E_\phi (K_1) b^+_{K_1} b_{K_1}$$

$$H_{EKS-FON} = \frac{-i}{\sqrt{N}} \sum_{K_1 K_2} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{K_2}}} \; \Delta (\vec{K}_2 \vec{e}_{K_2}) \cdot$$

$$\cdot (B^+_{K_1 - K_2} B_{K_1} b_{-K_2} + B^+_{K_1 - K_2} B_{K_1} b^+_{K_2})$$

koristeći:

$$(\vec{K}_2 \vec{e}_{K_2}) = K_2 \qquad \omega_{K_2} = C \cdot K_2 \quad \text{, dobijamo:}$$

$$H_{EKS-FON} = -\frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{K_1 K_2} \sqrt{\frac{\hbar \Delta^2 K_2}{2MC}} \; (B^+_{K_1 - K_2} B_{K_1} b_{-K_2} +$$

$$+ B^+_{K_1 - K_2} B_{K_1} b^+_{K_2}) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.2)$$

uzimajući da je

$$\left.\begin{aligned} &E_e(K_1) = \Delta + \alpha_{K_1} \\ &\Phi(K_1 K_3) = -\Delta - \alpha_{K_1} - \alpha_{K_3} + \beta_{K_1 - K_3} \\ &E_\phi(K_1) = \hbar \cdot C(\vec{K}_1) = \hbar C K_1 \\ &S(K_2) = -i\sqrt{\frac{\hbar \Delta^2 K_2}{2MC}} \end{aligned}\right\} \quad \ldots\ldots (II.2.3)$$

dobijamo pojednostavljen oblik totalnog hamiltonijana i on izgleda ovako:

$$H_{TOT} = \sum_{K_1} E_e(K_1)\, B^+_{K_1} B_{K_1} + \frac{1}{N}\sum_{K_1 K_2 K_3} \Phi(K_1, K_3)\, B^+_{K_1} B^+_{K_2} B_{K_3} \cdot$$

$$\cdot B^+_{K_1+K_2-K_3} + \sum_{K_1} E_\phi(K_1)\, b^+_{K_1} b_{K_1} +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_1 K_2} S(K_2)\,(B^+_{K_1-K_2} B_{K_1} b_{-K_2} + B^+_{K_1-K_2} B_{K_1} B^+_{K_2}) \ldots (II.2.4)$$

Definišimo operator fizičke veličine vezanog stanja fonon-eksiton:

$$\hat{O}_{\alpha\beta} = B^+_\alpha b^+_\beta \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.5)$$

kao i funkciju fizičke veličine vezanog stanja fonon-eksiton

$$B^+_\alpha b^+_\beta |0\rangle = \Psi_{\alpha,\beta} \ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.6)$$

Hajzenbergova jednačina kretanja u tom slučaju izgleda ovako:

$$i\dot{\hat{O}}_{\alpha\beta} = [\hat{O}_{\alpha\beta}, \hat{H}_{TOT}] \ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.7)$$

Predpostavili smo da operator vezanog stanja eksplicitno zavisi od vremena na ovaj način:

$$\hat{O}_{\alpha\beta}(t) = e^{iEt}\hat{O}_{\alpha\beta}(0) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.8)$$

pa Hajzenbergova jednačina tada dobija oblik:

$$E\hat{O}_{\alpha\beta} = -[\hat{O}_{\alpha\beta}, \hat{H}_{TOT}] \qquad |0\rangle \quad \ldots\ldots (II.2.9)$$

primenjena na vakuum daje jednačinu

$$E\Psi_{\alpha\beta} = -[\hat{O}_{\alpha\beta}, H_{TOT}]|0\rangle \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.10)$$

U ovoj jednačini potrebno je naći komutator

$$[\hat{O}_{\alpha\beta}, H_{TOT}] = [B^+_\alpha b^+_\beta, H_{TOT}]$$

$$[B^+_\alpha b^+_\beta, H_{TOT}] = [B^+_\alpha b^+_\beta, \sum_{K_1} E_e(K_1) B^+_{K_1} B_{K_1} +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \Phi(K_1,K_3) B^+_{K_1} B^+_{K_2} B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3} +$$

$$+ \sum_{K_1} E_\phi(K_1) b^+_{K_1} b_{K_1} +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2} S(K_2)(B^+_{K_1-K_2} B_{K_1} b_{-K_2} + B^+_{K_1-K_2} B_{K_1} b^+_{K_2})]$$

$$[B^+_\alpha b^+_\beta, H_{TOT}] = [B^+_\alpha b^+_\beta, \sum_{K_1} E_e(K_1) B^+_{K_1} B_{K_1}] +$$

$$+ [B^+_\alpha b^+_\beta, \frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \Phi(K_1,K_3) B^+_{K_1} B^+_{K_2} B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3}] +$$

$$+ [B^+_\alpha b^+_\beta, \sum_{K_1} E_\phi(K_1) b^+_{K_1} b_{K_1}] +$$

$$+ [B^+_\alpha b^+_\beta, \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2} S(K_2)(B^+_{K_1-K_2} B_{K_1} b_{-K_2} + B^+_{K_1-K_2} B_{K_1} b^+_{K_2})]$$

$$[B^+_\alpha b^+_\beta, H_{TOT}] = \sum_{K_1} E_e(K_1) [B^+_\alpha b^+_\beta, B^+_{K_1} B_{K_1}] +$$

$$+ \frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \Phi(K_1,K_3) [B^+_\alpha b^+_\beta, B^+_{K_1} B^+_{K_2} B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3}] +$$

$$+\sum_{K_1} E_\phi(K_1)\,[B_\alpha^+ b_\beta^+, b_{K_1}^+ b_{K_1}]+$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2} S(K_2)[B_\alpha^+ b_\beta^+, (B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{-K_2} + B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{K_2}^+)]$$

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, H_{TOT}] = \sum_{K_1} Ee(K_1)\,[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1}^+ B_{K_1}]+$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \phi(K_1,K_3)\,[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1}^+ B_{K_2}^+ B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3}]+$$

$$+\sum_{K_1} E_\phi(K_1)\,[B_\alpha^+ b_\beta^+, b_{K_1}^+ b_{K_1}]+$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2} S(K_2)\Big\{[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{-K_2}]+$$

$$+[B_\alpha^+ b_\beta, B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{K_2}^+]\Big\} \quad \ldots\ldots\ldots \quad (\text{II}.2.11)$$

Na osnovu komutacionih relacija :

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1}^+ B_{K_1}] = -b_\beta^+ B_{K_1}^+ \delta_{K_1,\alpha}$$

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1}^+ B_{K_2}^+ B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3}] = 0 \text{ prim. na vakuum } |0\rangle$$

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, b_{K_1}^+ b_{K_1}] = -B_\alpha^+ b_{K_1}^+ \delta_{K_1,\beta} \qquad (\text{II}.2.12)$$

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{-K_2}] = -B_{K_1-K_2}^+ \delta_{K_2,-\beta}\, \delta_{\alpha,K_1}$$

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{K_2}^+] = 0 \quad \text{prim. na vakuum } |0\rangle$$

jednačina (II.2.11) dobija sledeći oblik :

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, H_{TOT}] = -\sum_{K_1} Ee(K_1)\, b_\beta^+ B_{K_1}^+ \delta_{K_1,\alpha} -$$

$$-\sum_{K_1} E_\phi(K_1)\, B_\alpha^+ b_{K_1}^+ \delta_{K_1,\beta} -$$

$$-\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2} S(K_2)\, B_{K_1-K_2}^+ \delta_{K_2,-\beta}\, \delta_{\alpha,K_1}$$

$$[B_\alpha^+ b_\beta^+, H_{TOT}] = -E_e(\alpha)\, B_\alpha^+ b_\beta^+ - E_\phi(\beta)\, B_\alpha^+ b_\beta^+ -$$

$$-\frac{1}{\sqrt{N}} S(\beta)\, B_{\alpha+\beta}^+ \quad . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \quad (\text{II}.2.13)$$

Ovako dobijen komutator vratili smo u (II.2.10) i koristeći da je $\Psi_{\alpha,\beta} = B_\alpha^+ b_\beta^+ |0\rangle$ i $\Phi_{\alpha+\beta} = B_{\alpha+\beta}^+ |0\rangle$ dobijamo sledeću relaciju:

$$E\Psi_{\alpha,\beta} = -[-E_e(\alpha)\Psi_{\alpha\beta} - E_\phi(\beta)\Psi_{\alpha\beta} - \frac{1}{\sqrt{N}} S(\beta)\Phi_{\alpha+\beta}]$$

$$E\Psi_{\alpha\beta} = E_e(\alpha)\Psi_{\alpha\beta} + E_\phi(\beta)\Psi_{\alpha\beta} + \frac{1}{\sqrt{N}} S(\beta)\Phi_{\alpha+\beta}$$

ili:

$$[E - E_e(\alpha) - E_\phi(\beta)]\Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} S(\beta)\Phi_{\alpha+\beta} \quad . \; . \; . \quad (\text{II}.2.14)$$

Da bi zatvorili sistem, tj. da bi eliminisali $\Phi_{\alpha+\beta}$ treba da nađemo šta nam daje komutator operatora fizičke veličine $\Phi_{\alpha+\beta}$ sa hamiltonijanom sistema. Traženi komutator je:

$$[B_{\alpha+\beta}^+, H_{TOT}] = [B_{\alpha+\beta}^+, \sum_{K_1} E_e(K_1) B_{K_1}^+ B_{K_1} +$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \Phi(K_1,K_3)\, B_{K_1}^+ B_{K_2}^+ B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3} + \sum_{K_1} E_\phi(K_1) b_{K_1}^+ b_{K_1} +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2} S(K_2)(B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{-K_2} + B_{K_1-K_2}^+ B_{K_1} b_{K_2}^+)] =$$

$$= [B_{\alpha+\beta}^+, \sum_{K_1} E_e(K_1) B_{K_1}^+ B_{K_1}] + [B_{\alpha+\beta}^+, \sum_{K_1} E_\phi(K_1)\, b_{K_1}^+ b_{K_1}] +$$

$$+[B_{\alpha+\beta}^+, \frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3} \Phi(K_1,K_3)\, B_{K_1}^+ B_{K_2}^+ B_{K_3} B_{K_1+K_2-K_3}] +$$

$$+\left[B^{+}_{\alpha+\beta},\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2}S(K_2)\left(B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b_{-K_2}+B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b^{+}_{K_2}\right)\right]=$$

$$=\sum_{K_1}Ee(K_1)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1}B_{K_1}\right]+\sum_{K_1}E\phi(K_1)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},b^{+}_{K_1}b_{K_1}\right]+$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3}\phi(K_1,K_3)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1}B^{+}_{K_2}B_{K_3}B_{K_1+K_2-K_3}\right]+$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2}S(K_2)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},\left(B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b_{-K_2}+B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b^{+}_{K_2}\right)\right]=$$

$$=\sum_{K_1}Ee(K_1)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1}B_{K_1}\right]+\sum_{K_1}E\phi(K_1)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},b^{+}_{K_1}b_{K_1}\right]+$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{K_1K_2K_3}\phi(K_1,K_3)\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1}B^{+}_{K_2}B_{K_3}B_{K_1+K_2-K_3}\right]+$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{K_1K_2}S(K_2)\left\{\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b_{-K_2}\right]+\right.$$

$$\left.+\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b^{+}_{K_2}\right]\right\}\quad\ldots\ldots\ldots\quad(\text{II}.2.15)$$

Na osnovu komutacionih relacija :

$$\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1}B_{K_1}\right]=-B^{+}_{K_1}\delta_{K_1,\alpha+\beta}$$

$$\left.\begin{array}{l}\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1}B^{+}_{K_2}B_{K_3}B_{K_1+K_2-K_3}\right]=0\\ \left[B^{+}_{\alpha+\beta},b^{+}_{K_1}b_{K_1}\right]=0\\ \left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b_{-K_2}\right]=0\end{array}\right\}\ \text{primenjeno na vakuum } |0\rangle$$

$$\left[B^{+}_{\alpha+\beta},B^{+}_{K_1-K_2}B_{K_1}b^{+}_{K_2}\right]=-B^{+}_{K_1-K_2}b^{+}_{K_2}\delta_{K_1,\alpha+\beta}$$

jednačina (II.2.15) dobija novi oblik :

$$[B^{+}_{\alpha+\beta}, H_{TOT}] = -\sum_{K_1} Ee(K_1)\, B^{+}_{K_1}\, \delta_{K_1,\alpha+\beta} -$$

$$-\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_1 K_2} S(K_2)\, B^{+}_{K_1-K_2}\, b^{+}_{K_2}\, \delta_{K_1,\alpha+\beta} =$$

$$= -Ee(\alpha+\beta)\, B^{+}_{\alpha+\beta} - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_2} S(K_2)\, B^{+}_{\alpha+\beta-K_2}\, b^{+}_{K_2}$$

Ovako dobijen komutator vratićemo u (II.2.15) uz korišćenje $\Phi_{\alpha+\beta} = B^{+}_{\alpha+\beta}|0\rangle$ i $B^{+}_{\alpha+\beta-K_2} b^{+}_{K_2}|0\rangle = \Psi_{\alpha+\beta-K_2,K_2}$ dobijamo:

$$E\Phi_{\alpha+\beta} = -[-Ee(\alpha+\beta)\Phi_{\alpha+\beta} - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_2} S(K_2)\Psi_{\alpha+\beta-K_2,K_2}] =$$

$$= Ee(\alpha+\beta)\Phi_{\alpha+\beta} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_2} S(K_2)\Psi_{\alpha+\beta-K_2,K_2} \quad \ldots \ldots (\text{II}.2.16)$$

ili:

$$\Phi_{\alpha+\beta}[E - Ee(\alpha+\beta)] = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_2} S(K_2)\Psi_{\alpha+\beta-K_2,K_2} \quad \ldots (\text{II}.2.17)$$

odavde je:

$$\Phi_{\alpha+\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{K_2} \frac{S(K_2)}{E - Ee(\alpha+\beta)} \Psi_{\alpha+\beta-K_2,K_2} \quad \ldots \ldots (\text{II}.2.18)$$

Smenjujući (II.2.18) u (II.2.14) dobijamo:

$$[E - Ee(\alpha) - E_\phi(\beta)]\Psi_{\alpha,\beta} = \frac{1}{N} \sum_{K_2} \frac{S(K_2)S(\beta)}{E - Ee(\alpha+\beta)} \Psi_{\alpha+\beta-K_2,K_2} \quad \ldots (\text{II}.2.19)$$

Da bi se ova jednačina zatvorila za funkciju jednog tipa uvešćemo sledeće smene za talasne vektore :

$$\left.\begin{array}{ll}\alpha=\frac{Q}{2}-q & \\ & K_2=\frac{Q}{2}+q' \\ \beta=\frac{Q}{2}+q & \end{array}\right\} \quad \ldots\ldots\ldots (\text{II}.2.20)$$

Ovakve smene za talasne vektore odgovaraju prelasku na sistem centra masa u konfiguracionom prostoru. S obzirom na ove smene Hajzenbergova jednačina primenjena na vakuum postaje :

$$\left[E-E_e\left(\tfrac{Q}{2}-q\right)-E_\phi\left(\tfrac{Q}{2}+q\right)\right] B_{\frac{Q}{2}-q}\, b_{\frac{Q}{2}+q} |0\rangle =$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{q'}\frac{S\left(\frac{Q}{2}+q'\right)S\left(\frac{Q}{2}+q\right)}{E-E_e(Q)}\, B^+_{\frac{Q}{2}+q'}\, b^+_{\frac{Q}{2}+q'} |0\rangle \quad \ldots (\text{II}.2.21)$$

označimo :

$$\left.\begin{array}{l} B^+_{\frac{Q}{2}-q}\, b^+_{\frac{Q}{2}+q} |0\rangle = X_Q(q) \\ \\ B^+_{\frac{Q}{2}+q'}\, b^+_{\frac{Q}{2}+q'} |0\rangle = X_Q(q') \end{array}\right\} \quad \ldots\ldots\ldots (\text{II}.2.22)$$

Na osnovu ovog jednačina (II.2.21) postaje tada :

$$X_Q(q)=\frac{1}{N}\sum_{q'}\frac{S\left(\frac{Q}{2}+q'\right)S\left(\frac{Q}{2}+q\right)}{\left[E-E_e(Q)\right]\left[E-E_e\left(\frac{Q}{2}-q\right)-E_\phi\left(\frac{Q}{2}+q\right)\right]}\, X_Q(q') \quad \ldots (\text{II}.2.23)$$

Za uprošćavanje jednačine (II.2.23) potrebno je bilo naći koliki je intezitet talasnog vektora oblika $|\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}|$. Razvijajući u red i zadržavajući se na prva dva člana i koristeći uslov:

$$Q=|\vec{Q}| \qquad q=|\vec{q}| \qquad |\vec{Q}| \gg |\vec{q}| \qquad \text{(II.2.24)}$$

dobili smo:

$$|\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}|=|\frac{\vec{Q}}{2}|+\vec{q}\,\nabla|\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}|_{\vec{q}=0} \qquad \text{(II.2.25)}$$

odnosno:

$$|\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}|=\frac{Q}{2}+\frac{1}{2}\frac{\vec{Q}\vec{q}}{Q} \qquad \text{(II.2.26)}$$

Znajući da je $\quad \vec{Q} \approx \parallel \vec{q}$ $\qquad$ (II.2.27)

konačno se dobija:

$$|\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}| \cong \frac{Q}{2}+\frac{q}{2} \cong \frac{1}{2}(Q+q) \qquad \text{(II.2.28)}$$

Sada je potrebno naći $S(\frac{Q}{2}+q')S(\frac{Q}{2}+q)$

$$S(\frac{Q}{2}+q')S(\frac{Q}{2}+q) \cong \frac{\hbar\Delta^2}{2MC}\sqrt{(\frac{Q}{2}+q')(\frac{Q}{2}+q)} \cong$$

$$\cong \frac{\hbar\Delta^2}{2MC}\sqrt{\frac{Q^2}{4}+\frac{Qq'}{2}+\frac{Qq}{2}+qq'} \qquad \text{(II.2.29)}$$

Zanemarujući qq' dobijamo:

$$S(\frac{Q}{2}+q')S(\frac{Q}{2}+q) \cong \frac{\hbar\Delta^2 Q}{2MC}\sqrt{\frac{1}{4}\left[1+\frac{2(q+q')}{Q}\right]} \cong$$

$$\cong \frac{Q\hbar\Delta^2}{4MC}\sqrt{1+\frac{2(q+q')}{Q}} \qquad \text{(II.2.30)}$$

Razvijajući $\left[1+\frac{2(q+q')}{Q}\right]^{1/2}$ prema binomnom obrascu i zadržavajući se na prva dva člana, biće:

$$S\left(\frac{Q}{2}+q'\right)S\left(\frac{Q}{2}+q\right)\cong\left[\frac{\hbar\Delta^2 Q}{4MC}+\frac{\hbar\Delta^2 q}{4MC}\right]+\frac{\hbar\Delta^2 q'}{4MC} \quad . \; . \; (\text{II}.2.31)$$

Koristeći već navedene uslove možemo napisati i da je:

$$\left.\begin{aligned} &Ee(Q)\cong\Delta \\ &Ee\left(\frac{Q}{2}-q\right)\cong\Delta \\ &E_\phi=\hbar c\left(\frac{\vec{Q}}{2}+\vec{q}\right)=\frac{\hbar c}{2}(Q+q) \end{aligned}\right\} \quad . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; (\text{II}.2.32)$$

Iz ovog (II.2.23) dobija ovakav oblik:

$$X_Q(q)=\frac{1}{N}\sum_{q'}\frac{\frac{\hbar\Delta^2 Q}{4MC}+\frac{\hbar\Delta^2 q}{4MC}+\frac{\hbar\Delta^2 q'}{4MC}}{[E-\Delta][E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)]}\cdot X_Q(q') \quad . \; . \; (\text{II}.2.33)$$

Ako sada predemo sa sume na integral po formuli:

$$\frac{1}{N}\sum_{q}=\frac{Na^3}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta\int_0^{q_{max}}q^2 dq \quad . \; . \; . \; . \; . \; (\text{II}.2.34)$$

gde je $\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta=4\pi$

Dobiće se sledeća integralna jednačina:

$$X_Q(q)=\frac{4a^3\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{q_{max}}\frac{\frac{\hbar\Delta^2 Q}{4MC}+\frac{\hbar\Delta^2 q}{4MC}+\frac{\hbar\Delta^2 q'}{4MC}}{(E-\Delta)[E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)]}\cdot q'dq' X_Q(q')$$

$$. \; . \; . \; (\text{II}.2.35)$$

Odnosno:

$$X_Q(q)=\frac{a^3}{2\pi^2}\left(\frac{\hbar\Delta^2 Q}{4MC}+\frac{\hbar\Delta^2 q}{4MC}\right)\cdot$$

$$\cdot\frac{1}{(E-\Delta)[E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)]}\int_0^{q_{max}}q'^2 dq' X_Q(q')+$$

$$+\frac{a^3}{2\pi^2}\frac{\hbar\Delta^2}{4MC}\frac{1}{(E-\Delta)[E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)]}\int_0^{q_{max}} q'^3 dq' X_Q(q') \qquad \text{(II.2.36)}$$

Označavajući:

$$\left.\begin{aligned} &\int_0^{q_{max}} q'^2 dq' X_Q(q') = C_1 \\ &\int_0^{q_{max}} q'^3 dq' X_Q(q') = C_2 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(II.2.37)}$$

Integralna jednačina (II.2.36) dobija oblik:

$$X_Q(q) = \frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2 MC}\frac{Q+q}{(E-\Delta)[E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)]}C_1 +$$

$$+\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2 MC}\frac{1}{(E-\Delta)[E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)]}C_2 \qquad \text{(II.2.38)}$$

Ovakav oblik integralne jednačine pomnožimo prvo sa q^2dq a zatim sa q^3dq i integralimo od 0 do q_{max} dobićemo sistem od dve jednačine oblika:

I)
$$C_1\left\{1-\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2 MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{(Q+q)q^2dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}\right\} -$$

$$-\left\{\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2 MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{q^2dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}\right\}C_2 = 0$$

II)
$$-\left\{\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2 MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{q^3dq(Q+q)}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}\right\}C_1 +$$

$$+\left\{1-\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2 MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{q^3dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}\right\}C_2 = 0$$

Uvedimo smene:

$$
\left.
\begin{aligned}
&1-\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{(Q+q)\,q^2dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}=A\\
&-\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{q^2dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}=B\\
&-\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{(Q+q)\,q^3dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}=C\\
&1-\frac{a^3\hbar\Delta^2}{8\pi^2MC(E-\Delta)}\int_0^{q_{max}}\frac{q^3dq}{E-\Delta-\frac{\hbar c}{2}(Q+q)}=D
\end{aligned}
\right\}\quad\ldots\ (\text{II}.2.39)
$$

Da bi sistem, sastavljen od jednačina I i II, imao netrivijalna rešenja determinanta sistema mora biti jednaka nuli tj:

$$
\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = 0
$$

Rešavajući gore navedenu determinantu sistema i rešavajući integrale u smenama za A, B, C i D dobijamo jednačinu za energiju vezanog stanja eksitona i fonona :

$$
\left\{1+\frac{a^3\Delta^2}{4\pi^2MC^2(E-\Delta)}\,\frac{q_{max}^3}{3}\right\}\left\{1+\frac{a^3\Delta^2}{4\pi^2MC^2(E-\Delta)}\cdot\right.
$$

$$
\left.\cdot\left(\frac{q_{max}^3}{3}-\frac{Q\,q_{max}^2}{2}+Q^2q_{max}\right)\right\}-\left\{\frac{a^3\Delta^2}{4\pi^2MC^2(E-\Delta)}\cdot\right.
$$

$$
\left.\cdot\left(\frac{q_{max}^2}{2}-Q\,q_{max}\right)\right\}\left\{\frac{a^3\Delta^2}{4\pi^2MC^2(E-\Delta)}\,\frac{q_{max}^4}{4}\right\}=0\ \ldots\ (\text{II}.2.40)
$$

Radi uprošćavanja rešavanja jednačine (II.2.40) uzmimo:

$$\frac{a^3\Delta^2}{4\pi^2MC^2(E-\Delta)}=K \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (II.2.41)$$

Sada (II.2.40) postaje:

$$\left[1+K\frac{q^3_{max}}{3}\right]\left[1+K\left(\frac{q^3_{max}}{3}-\frac{Qq^2_{max}}{2}+Q^2q_{max}\right)\right]-$$

$$-\left[K\left(\frac{q^2_{max}}{2}-Qq_{max}\right)\right]\left[K\frac{q^4_{max}}{4}\right]=0 \quad \ldots\ldots (II.2.42)$$

Dobili smo kvadratnu jednačinu po K čijim rešavanjem dobijamo:

$$K_{1,2}=\frac{\left(\frac{Qq_{max}}{2}-\frac{2}{3}q^2_{max}-Q^2\right)\pm\sqrt{\frac{1}{2}q^4_{max}-Qq^3_{max}+\frac{1}{4}Q^2q^2_{max}-Q^3q_{max}+Q^4}}{\frac{Qq^4_{max}}{6}-\frac{1}{36}q^5_{max}+\frac{2}{3}Q^2q^3_{max}} \quad \ldots\ldots (II.2.43)$$

Ako ovo smenimo u (II.2.41) dobićemo dve vrednosti za energiju vezanog stanja eksitona i fonona:

$$E_1=\frac{a^3\Delta^2\left(\frac{1}{6}Qq^4_{max}-\frac{1}{36}q^5_{max}+\frac{2}{3}Q^2q^3_{max}\right)}{4\pi^2MC^2\left(\frac{Qq_{max}}{2}-\frac{2}{3}q^2_{max}-Q^2+\sqrt{\frac{1}{4}q^4_{max}-Qq^3_{max}+\frac{1}{4}Q^2q^2_{max}-Q^3q_{max}+Q^4}\right)}+$$

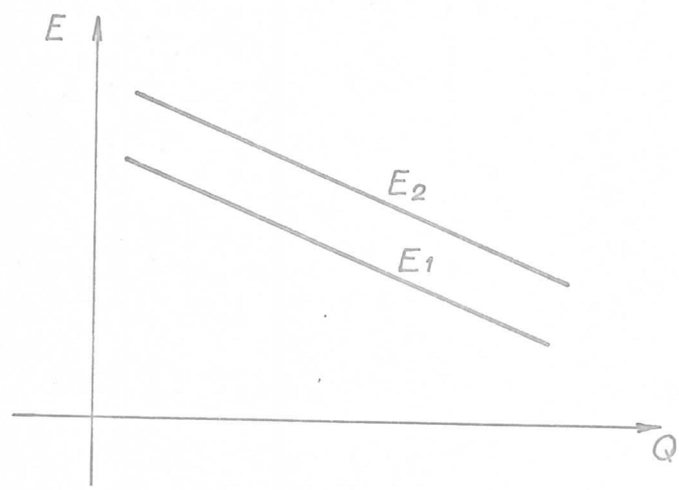
$$+\frac{4\pi^2MC^2\Delta\left(\frac{Qq_{max}}{2}-\frac{2}{3}q^2_{max}-Q^2+\sqrt{\frac{1}{4}q^4_{max}-Qq^3_{max}+\frac{1}{4}Q^2q^2_{max}-Q^3q_{max}+Q^4}\right)}{4\pi^2MC^2\left(\frac{Qq_{max}}{2}-\frac{2}{3}q^2_{max}-Q^2+\sqrt{\frac{1}{4}q^4_{max}-Qq^3_{max}+\frac{1}{4}Q^2q^2_{max}-Q^3q_{max}+Q^4}\right)}$$

$$E_2=\frac{a^3\Delta^2\left(\frac{1}{6}Q q_{max}^4-\frac{1}{36}q_{max}^5+\frac{2}{3}Q^2 q_{max}^3\right)}{4\pi^2 MC^2\left(\frac{Q q_{max}}{2}-\frac{2}{3}q_{max}^2-Q^2-\sqrt{\frac{1}{4}q_{max}^4-Q q_{max}^3+\frac{1}{4}Q^2 q_{max}^2-Q^3 q_{max}+Q^4}\right)}+$$

$$+\frac{4\pi^2 MC^2\Delta\left(\frac{Q q_{max}}{2}-\frac{2}{3}q_{max}^2-Q^2-\sqrt{\frac{1}{4}q_{max}^4-Q q_{max}^3+\frac{1}{4}Q^2 q_{max}^2-Q^3 q_{max}+Q^4}\right)}{4\pi^2 MC^2\left(\frac{Q q_{max}}{2}-\frac{2}{3}q_{max}^2-Q^2-\sqrt{\frac{1}{4}q_{max}^4-Q q_{max}^3+\frac{1}{4}Q^2 q_{max}^2-Q^3 q_{max}+Q^4}\right)}$$

II.3. Analiza rezultata

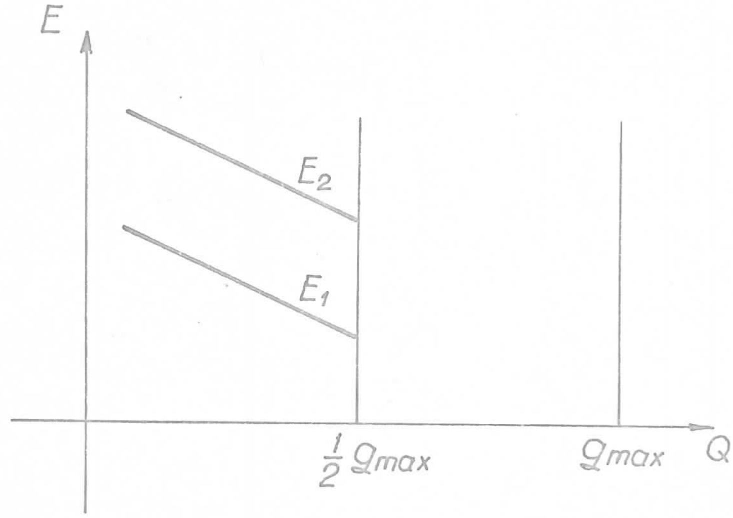
1) Dobijaju se dva nivoa energije za vezana stanja i obadve su proporcionalne konstanti eksiton-fonon interakcije $\frac{\Delta^2}{MC^2}$. Oba zakona disperzije imaju procep koji je proporcionalan konstanti interakcije. Imaju linearnu negativnu disperziju.



2) Vezana stanja ne postoje za sve moguće vrednosti talasnog vektora Q. Ako je $Q \leq \frac{1}{2} g_{max}$, gde je g_{max} talasni vektor na granici Briluenove zone, onda se vezana stanja ne prigušuju. Za $Q > \frac{1}{2} g_{max}$ zakon disperzije za vezana stanja je kompleksna funkcija talasnog vektora Q i takva stanja imaju veliko prigušenje, tako da se posle kraćeg vremena amortizuju.

$$\frac{1}{2} g_{max}^{4} \geq Q\, g_{max}^{3}$$

$$Q \leq \frac{1}{2} g_{max}$$



Zaključak

U radu su pronađeni spektri vezanih ekscitacija eksitona i fonona. Ispostavilo se da za obrazovanje vezanih stanja u trodimenzionoj strukturi dolazi samo u slučajevima kada je sumarni impuls eksitona i fonona manji od polovine graničnog vektora Briluenove zone. Ako je ovaj sumarni impuls veći od pomenute vrednosti vezana stanja se obrazuju ali imaju jako prigušenje pa se posle kraćeg vremena pretvaraju u neke druge tipove ekscitacija.

Pod napred navedenim uslovima pronađeno je da postoje dve grane vezanih stanja. Obe ove grane imaju linearnu i negativnu disperziju a energija njihovog pobuđivanja proporcionalna je konstanti eksiton-fonon interakcije $\frac{\Delta^2}{MC^2}$.

Na kraju treba napomenuti da ovaj problem nije mogao da se tretira egzaktno kao u slučaju kad se vezuju dve ekscitacije istog tipa, jer se u ovom slučaju dobija sistem beskonačno mnogo jednačina za talasnu funkciju. Ovaj beskonačan lanac jednačina presečen je na taj način što je predpostavljeno da dvofononski procesi malo utiču na karakter vezanih stanja.

Literatura

1) И. Френкель : Phys Rev. 37 17 (1931)

2) G.H. Wannier: Phus Rev. 52 191 (1937)

3) В.М. Аграновuч: „Теориа экситонов" Наука, Москва (1968)

4) А. С. Давидов: „Теориа молекуларних экситонов" Наука, Москва (1968)

5) С.В. Тавшков: „Методи квантовй теории магнетизма" Наука, Москва (1965)

6) M. Wortis : Phus, Rev. 132 85 (1963)

7) Đ.J. Lalović, B.S. Tošić, J.B. Vujaklija, R.B. Žakula, Nuovo Cimento 68B 75 (1970)