

Пор. бр. :		23. IV. 1985	
Орг. јед.	Број	Прилог	Вредност
03	295/1		

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

Mr JOVAN P. SETRAJČIĆ

O PROBLEMU SUPERFLUIDNOG TRANSFERA
U KONDENZOVANOJ MATERIJI

doktorska disertacija

NOVI SAD, 1985.

Ova teza je uradjena u Laboratoriji za teorijsku fiziku na Institutu za fiziku, Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu, pod rukovodstvom dr Bratislava S. Tošića, redovnog profesora PMF-a u Novom Sadu.

Koristim ovu priliku da se zahvalim svima onima koji su mi pomogli da ovu tezu uradim. Najveću zahvalnost dugujem dr Bratislavu S. Tošiću, dr Mariju J. Škrinjaru, dr Darku V. Kaporu, mr Zlatku V. Bundalu, te svojoj majci, supruzi i ocu.

S A D R Ž A J

U V O D	1
GLAVA 1: SUPERFLUIDNOST I SUPERPROVODLJIVOST	5
1. FENOMEN SUPERFLUIDNOSTI	6
1.1. Kriterijum superfluidnosti čestica	9
1.2. Boze-Ajnštajnova kondenzacija He^4	12
2. HIDRODINAMIKA SUPERFLUIDNOG KRETANJA	17
3. MOGUĆNOST SUPERFLUIDNOSTI U SISTEMU KVAZIČESTICA	23
4. SUPERFLUIDNI TRANSFER NAELEKTRISANIH ČESTICA - SUPERPROVODLJIVOST	26
GLAVA 2: SUPERFLUIDNOST U MOLEKULARNIM KRISTALIMA	34
5. VREME RELAKSACIJE OPTIČKIH POBUDJENJA	36
6. NELINEARNI EFEKTI KAO UZROK SUPERFLUIDNOSTI	38
6.1. Koherentna eksitonska stanja	38
6.2. Visoke eksitonske koncentracije	38
7. VIRTUELNA RAZMENA FONONA KAO UZROK EKSTITONSKE SUPERFLUIDNOSTI	43
7.1. Bi eksitoni	49
7.2. Eksitonske kaplje	54
7.3. Solitonski aspekt superfluidnosti optičkih eksitacija	68

GLAVA 3: MOGUĆNOST SUPERFLUIDNOSTI U FEROMAGNETICIMA	74
8. VREME RELAKSACIJE MAGNONA	75
9. KOHERENTNA STANJA SPINSKIH TALASA	78
10. MAGNON-FONON INTERAKCIJA I SUPERFLUIDNOST	79
10.1. Vezana stanja spinskih talasa	80
10.2. Obrazovanje magnonskih kaplji i posledice	85
10.3. Magnetni solitoni i superfluidnost	90
GLAVA 4: SUPERPROVODLJIVOST METALA	96
11. ELEKTRON-FONON INTERAKCIJA I FRELIOVA TRANSFORMACIJA	97
12. KUPEROVI PAROVI I BCS TEORIJA	100
13. ANALIZA JEDNODIMENZIONIH STRUKTURA	106
13.1. Formiranje gep-jednačine	106
13.2. Različiti metodi rešavanja	109
13.3. Egzaktniji tretman problema	112
13.4. Odredjivanje arbitrarnog parametra	116
13.5. Analiza i diskusija rezultata	125
ZAKLJUČAK	129
PRILOZI	132
14. ELEMENTI TEORIJE POSMATRANIH SISTEMA	133
14.1. Fononi	133
14.2. Frenkelovi eksitoni	135
14.3. Eksiton-fonon interakcija u molekularnim kristalima	140
14.4. Feromagnetni fononi	142
14.5. Magnon-fonon interakcija u metalima	145
14.6. Elektroni u metalima	148
14.7. Elektron-fonon interakcija u metalima	152
15. PROGRAMI ZA NUMERIČKO RAČUNANJE	154
15.1. "Eksiton"	155
15.2. "Magnon"	156
15.3. "Elektron"	157
LITERATURA	159
ABSTRACT	172

1

"Teorija koja daje odgovarajuće rezultate, nesumnjivo sadrži velik udeo istine"

G.A. Lorenc

U V O D

Superfluidno kretanje predstavlja jedan od najinteresantnijih fenomena u prirodi. Sa teorijske tačke gledišta u žiži interesovanja su mehanizmi koji dovode do ovakvih pojava, a sa stanovišta prakse interes za ove pojave potpuno je razumljiv i opravdan jer se pri superfluidnom kretanju transfer energije vrši sa minimumom gubitaka. Zbog svega ovoga problem superfluidnog transfera niz poslednjih decenija predstavlja jedan od najaktuelnijih istraživačkih zadataka.

Pojava superprovodljivosti kod metala eksperimentalno je otkrivena početkom ovoga veka, a pojava superfluidnog kretanja tečnog He⁴ tridesetak godina kasnije. Teorijska objašnjenja superfluidnosti kod He⁴ data su krajem pete decenije ovog veka, dok je teorijsko objašnjenje superprovodljivosti usledilo desetak godina kasnije. Iako su teorije mehanizama ovih niskotemperaturnih fenomena do danas razradjene do detalja, istraživanja se nastavljaju punim intenzitetom i to posebno s ciljem konstruisanja visokotemperaturnih superprovodnika.

U oba pomenuta fenomena radi se o superfluidnom (bezviskoznom, bezotpornom) kretanju čestica. Bilo je potpuno prirodno, u skladu sa razvojem saznanja o procesima u kondenzovanim sredinama, da se postavi pitanje o mogućnosti superfluidnog

kretanja kvazičestica. Istraživanja pojava superfluidnosti kvazičestica počela su krajem pedesetih godina i to prvo u sistemu poluprovodničkih eksitona. Kasnije su ova istraživanja proširena na optička pobudjenja u molekularnim kristalima i na spinska pobudjenja u feromagnetnicima. Treba odmah istaći da je u svim ovim istraživanjima teorija prednjačila eksperimentu i to zbog toga što je izuzetno teško eksperimentalno konstatovati superfluidnost kod kvazičestičnih sistema. Postoje uglavnom dva osnovna razloga za to. Kao prvo, kvazičestice imaju konačno i veoma kratko vreme života (reda 10^{-8} s) i samo u tom kratkom intervalu vremena merni instrumenti treba da registruju pojavu Boze-Ajnštajnovog kondenzata i njegovih osobina. Drugi razlog je problem kretanja ovog kvazičestičnog kondenzata jer njega ne čine naelektrisane čestice koje se mogu pokretati spoljašnjim električnim poljem (kao u slučaju Kuperovih parova elektrona i njihovog superprovodnog kretanja). S druge strane, kvazičestice nemaju stvarnu masu pa se ne mogu pokrenuti ni gravitacionim poljem (kao što je to učinjeno u ogledima sa He^4 - efekat fontane). Zbog svega ovoga do danas ne postoje pouzdani eksperimentalni dokazi postojanja superfluidnih osobina kvazičestičnih sistema. Što se pak teorijskih razmatranja tiče, ona su u današnje vreme u priličnoj meri razvijena - ustanovljeni su osnovni kriterijumi za egzistenciju superfluidnog transfera kvazičestica. Međutim, i pored svih, gore navedenih, praktičnih teškoća dokazivanja prisustva superfluidnosti kvazičestica, nedvosmisleno se može reći da ovakav fenomen u prirodi postoji.

Ova disertacija tretira problem superfluidnosti u sistemu Frenkelovih eksitona i u sistemu feromagnetnih spinskih talasa. Jedan deo istraživanja se odnosi i na problem superprovodljivosti u jednodimenzionim strukturama. Za pomenu te kvazičestične sisteme (Frenkelovi eksitoni i feromagnetni magnoni) ispitani su kriterijumi za nastanak superfluidnog kretanja. Osnovni kriterijum je odnos vremena života kvazičestica i vremena njihove relaksacije pri rasejanju na fononima,

a neophodan uslov je da vreme relaksacije bude kraće od vremena života tih kvazičestica. Druga dva kriterijuma važe i za kvazičestične i za čestične sisteme. Jedan od ovih kriterijuma je forma jednačina kretanja koja treba da bude analogna jednačini kretanja za superfluidne tečnosti, a drugi je pozitivnost minimuma fazne brzine pobudjenja koja nastaju prilikom kretanja kondenzata. Pokazano je da je kod Frenkelovih eksitona prvi od ovih kriterijuma uvek ispunjen, dok je za sistem spinskih talasa ispunjen samo kada se feromagnetik nalazi u jakom spoljašnjem magnetnom polju.

Ostali pomenuti kriterijumi bili su primenjivani u vezi sa različitim mehanizmima koji mogu da dovedu do pojave superfluidnosti, a to su:

- a) Rasejanje kvazičestica, do koga dolazi u slučaju visokih koncentracija. Analizom ovog mehanizma pokazano je da se, prilikom kretanja kondenzata, pojavljuju pobudjenja sa pozitivnim minimumom fazne brzine.
- b) Koherencija kvazičestičnih stanja. U vezi sa ovim dobijene su jednačine kretanja, analogne jednačinama kretanja za superfluidnu tečnost.
- c) Nastanak efektivne kvazičestične interakcije usled virtuelne razmene fonona. Pokazano je da se usled ove pojave obrazuju kvazičestične kaplje koje mogu da se kreću superfluidno na račun toga što elementarna pobudjenja nastala raspadom kaplji imaju pozitivan minimum fazne brzine. Naravno, raspadaju se samo neke od kaplji iz kondenzata, i to omogućuje ostalim da se kreću superfluidno.
- d) Solitonski mehanizam takodje može da bude jedan od uzroka superfluidnosti. Ako brzina solitona premaši brzinu zvuka oni "prelaze" u nove kvazičestice koje zadovoljavaju jednačinu kretanja analognu jednačini kretanja superfluidne tečnosti i, pored toga, imaju pozitivan minimum fazne brzine. Svi pomenuti mehanizmi mogu da dovedu do superfluidnih pojava u sistemu molekularnih eksitona, dok je za tako-što, u sistemu feromagnetnih magnona, neophodno prisustvo spoljašnjeg magnetnog polja.

Dobar deo disertacije posvećen je jednodimenzionim strukturama i to zbog toga što se u ovom slučaju jednačina koja opisuje ponašanje energetske gpe (self-konzistentna integralna jednačina) može egzaktno tretirati. Kao što je poznato, postojanje energetske gpe definiše i bitno je u teoriji superprovodljivosti, ali se ispostavilo da se slična veličina javlja i u energetskom spektru pobudjenja nastalih dezintegracijom kvazičestičnih kaplji. Striktno govoreći, energetska gpa nije funkcija talasnog vektora, kao što se ovde koristi, te se naziv "gpa" upotrebljava samo po terminološkoj tradiciji koja vuče poreklo od BCS teorije. Nezavisno od toga, ova funkcija talasnog vektora igra sličnu ulogu kao i konstantan energetska gpa - dovodi do superfluidnog transfera. Izvesne, mada prividne, digresije u ovoj tezi su delovi koji se odnose na vezana stanja i na elektronsku superprovodljivost u jednodimenzionim strukturama. Digresije su prividne zbog toga što postoji mogućnost superfluidnog kretanja vezanih stanja ukoliko se njihovim raspadom obrazuju kvazičestice sa pozitivnom efektivnom masom i gpom u energetskom spektru. Kod eksitona ovaj gpa uvek postoji, dok je kod spinskih talasa za njegovo neophodno prisustvo spoljašnjeg magnetnog polja. Što se tiče superprovodljivosti jednodimenzionih metalnih struktura, analiza je izvršena prvenstveno zbog toga da bi se egzaktnije ispitaio energetska gpa. I ova istraživanja samo formalno predstavljaju digresiju u odnosu na opšti trend rada (ispitivanje kvazičestične superfluidnosti), jer je danas uobičajeno da se interagujući elektron tretira kao kvazičestica, pošto mu se usled interakcije menja masa u odnosu na masu slobodnog elektrona. S druge strane, sama superprovodljivost nije ništa drugo do superfluidni transfer naelektrisanja (elektrona) kroz metal.

GLAVA 1:

SUPERFLUIDNOST I SUPERPROVODLJIVOST

Prva glava ove teze posvećena je uvodnim pojmovima o prirodnim niskotemperaturskim fenomenima - superfluidnošću (u daljem tekstu SF) i superprovodljivošću (SP), koji se javljaju u kondenzovanoj materiji, kao i pokušajima da se ovi fenomeni objasne.

Otkriće SF kretanja tečnog helijuma (njegovog izotopa He^4) napravilo je radikalnan zaokret u izučavanju "neobičnih" ponašanja čvrstih tela na niskim temperaturama. Odsustvo viskoznoeg trenja (par. 1) nije moglo da se objasni ni jednim do tada poznatim mehanizmom. Tek radovima Landaua, u kojima su postavljeni temelji fenomenološke teorije i izgrađeni kriterijumi SF (par. 1.1 i 2), i kasnije Bogoljubova (par. 1.2 i 2), koji su dali mikroskopsku analizu i objašnjenje kolektivne kondenzacije bozona, saznalo se kako je moguća SF čestica.

Sam efekat SP (par. 4; videti i gl. 4), iako otkriven mnogo pre SF, za svoje teorijsko objašnjenje morao je da pričekava sve do kompletiranja teorije SF. Tretiranjem SP kao SF naelektrisanih čestica, i objašnjenjem kolektivizacije fermiona na osnovu sparivanja u tzv. Kuperove parove, moglo se objasniti kako i zašto je ovaj fenomen prisutan u elektronskom sistemu.

Jasno je da bi ovi efekti imali fundamentalan prakti-

čan značaj ukoliko ne bi bili vezani isključivo za izuzetno niske temperature. Da li postoji mogućnost izgradnje visokotemperaturnih SP i da li se efekti, uopšte govoreći, SF mogu javiti i u drugim sistemima? Veliki timovi naučnih radnika nastojali su i nastoje da daju odgovor na ovo pitanje. Za sada je sigurno jedno: ovi efekti nisu isključivo vezani za helijum, odnosno, za metale, već se javljaju i u takvim sistemima kao što su izolatori i poluprovodnici. Odmah iza toga se nameće i pitanje određivanja mehanizma SF transfera u tim sistemima, jer je poznato da su elementarna pobudjenja u njima kvazičestice, a ne same čestice. Zato je potrebno ispitati da li je u kvazičestičnim sistemima uopšte moguć takav proces, i ako jeste, pod kojim se uslovima to može očekivati (videti par. 3). Definitivan odgovor, na žalost, već ovde nije dobijen. Još uvek ima toliko teškoća, pogotovo sa strane praktične provere, da je nemoguće pouzdano tvrditi ni jedno, a ni drugo. Čini se ipak, na osnovu broja radova, da je daleko verovatnije da je odgovor potvrđan. I sam cilj ove teze jeste da pokuša da doprinese teorijskom razjašnjenju ove dileme (gl. 2 i 3).

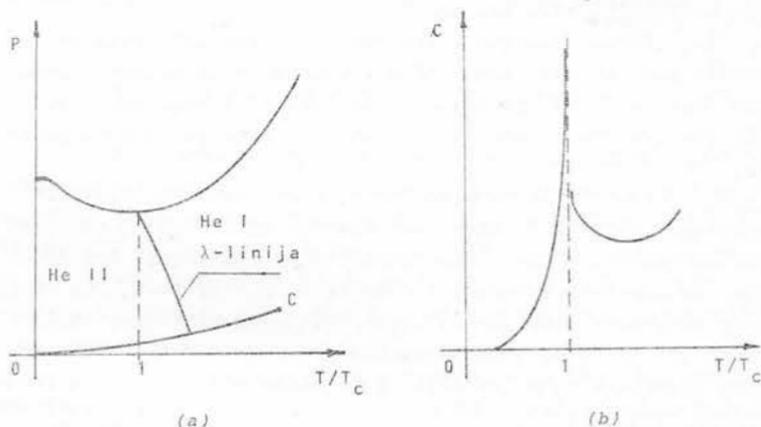
1. FENOMEN SUPERFLUIDNOSTI

Superfluidnost - bezviskozno kretanje tečnosti, prvi put je primećeno kod tečnog helijuma prilikom njegovog proticanja kroz uzane kapilare [1].

Pri snižavanju temperature atomi i molekuli tečnosti provode sve manje oscilacije oko ravnotežnih položaja i na niskim temperaturama očvršćavaju - obražuju kristalnu rešetku. Tečni helijum je jedini sistem u kojem se kvantni efekti (SF i dr.) javljaju pre očvršćavanja, on čak može i na apsolutnoj nuli da ostane u tečnom stanju. To se objašnjava relativno slabom interakcijom između atoma.

Tečni He^4 na temperaturi $T_c = 2,172 \text{ K}$ (prema [2], gl. 9), trpi fazni prelaz druge vrste ([3], par. 5.1): ako se nor-

malni tečni He^4 (He I) ohladi po krivoj isparavanja do temperature T_c , i prati promena pritiska (sl. 1.1a) ili promena toplotnog kapaciteta (sl. 1.1b), primećuje se da ključanje naglo prestaje, tečnost se primiruje - javlja se nova, niskotemperaturna modifikacija tečnog He^4 (He II).



Sl. 1.1: Fazni dijagram (a) (iz [3], str. 95) i toplotni kapacitet (b) (iz [4], str. 355) tečnog He^4 .

He II ili He^4 , ispod tzv. λ -tačkica (videti npr. u [5], str. 9 i 38) poseduje niz veoma zanimljivih osobina medju kojima je najzanimljivija, gore pomenuta, pojava bezviskoznog proticanja kroz kapilare. Naime, pokazano je da se He II kreće superfluidno, ali samo ako je njegova brzina manja od neke kritične koja raste sa smanjenjem prečnika kapilarne cevi. Eksperiment sa obrtnim cilindrom potopljenim u He II pokazao je da je on, ustvari, specifična smeša normalne (NR - koja ima viskoznost) i SF komponente (koja nema viskoznost). Na osnovu ovoga može se objasniti izuzetno visoka vrednost toplotnog kapaciteta i neki drugi fenomen (efekat fontane itd.). Detaljnije se o ovome može naći u

Kapicinin radovima [6].

De Brojjeva talasna dužina atoma He^4 na temperaturama ispod 2K je uporediva sa medjuatomske rastojanjima. Zbog toga je He^4 čisto kvantni objekat ([7], par. 1) - kvantna tečnost sa česticama (atomima He^4) koji se pokoravaju Boze-Ajnštajnovoj statistici ([8], gl. 4, par. 3; [9], par. 42; [10], str. 56, itd.).

Pored odsustva viskoznosti, SF kretanje kvantne tečnosti ima još dva veoma važna svojstva: nije praćeno prenosom toplote i uvek je potencijalno ([11], I deo, par. 127). Oba ova svojstva slede iz mikroskopske teorije (videti par. 2).

Kao što je poznato, postoje dva stabilna izotopa helijuma: He^4 i He^3 . Atomima He^3 takodje čine kvantnu tečnost, ali za razliku od He^4 , obrazovanu Fermi česticama. Pri dovoljno niskim temperaturama i ovde se javlja SF faza. Ona se može objasniti samo ako se uvede pretpostavka o sparivanju atoma He^3 (sa suprotnim impulsima) tako da par čini novu česticu bozonskog tipa (detaljnije o ovome može se naći u revijalnom članku [12]).

U najnovije vreme prisustvo Boze kondenzacije (BAK) i SF pokazano je i u sistemu atomskog vodonika [13, 14]. I ovde se radi o sparivanju Fermi čestica u bozonske parove. Ideja o sparivanju Fermi čestica u parove koji imaju kolektivna svojstva, prema tome mogu da se kondenzuju u prostoru impulsa (par. 2) i pokazuju SF osobine, nije nova: još je Kuper [15] pokazao da se sparivanjem elektrona sa suprotnim impulsima može objasniti nastanak stabilnog bozonskog sistema "novih" čestica, tzv. Kuperovih parova. Na osnovu toga je konstruisan BCS model (videti par. 4 i gl. 4) koji je objasnio nestanak električnog otpora - SP kod provodnika na niskim temperaturama, kao SF transfer naelektrisanih čestica.

Dalji razvoj fizike kondenzovane materije pokazao je da pojava SF nije isključivo prisutna u čestičnim sistemima već se javlja i u sistemima kvazičestica (videti par. 3, i [16 do 22]). Činjenica koja potkrepljuje ovu ideju je ta da

se svaki sistem proizvoljno interagujućih čestica u slabo pobudjenom stanju (ovo je neophodan uslov BAK [23]) može tretirati kao skup pojedinačnih elementarnih pobudjenja - kvazičestica, koje se "kreću" (prenose, u vidu talasa, svoj impuls, energiju, ...) kroz sredinu u kojoj se nalaze. Ukoliko ovo kretanje, tačnije nazvano - transfer, zadovoljava određene uslove (par. 3), ono može biti SF.

1.1. Kriterijum superfluidnosti čestica

Na apsolutnoj nuli He^4 se ponaša kao inertan gas - totalno neinteragujući fluid. Sve njegove termalne osobine na višim temperaturama su posledice elementarnih ekscitacija (kvazičestica) koje naseljavaju ovaj inertan gas. Jasno je da se sve analize SF svode na ispitivanje energetskog spektra i, uopšte, na detekciju ovih elementarnih pobudjenja u sistemu.

U prethodnom paragrafu rečeno je da postoji neka kritična brzina SF kretanja: ako se superfluid kreće brzinama koje su male ($v < v_{cr}$) on može egzistirati proizvoljno dugo, ali ako su brzine veće ($v \gtrsim v_{cr}$) atomi će se kretati tako brzo da će, pri sudaru sa neravninama zidova kapilare, prelaziti iz osnovnog u pobudjeno stanje. U jednom trenutku pobudjenja su takva da narušavaju SF kretanje (kada brzina proticanja dostigne brzinu v_{cr} u sistemu se javlja trenje). Ukoliko se u sistemu u kojem se atomi mase M superfluidno kreću konstantnim brzinama \vec{v} , usled trenja, javi (bar) jedna ekscitacija impulsa \vec{p} i energije ϵ_p^+ , brzina atoma će se promeniti sa \vec{v} na \vec{v}_1 . Iz zakona održanja energije i impulsa:

$$(1.1) \quad \frac{1}{2} M \vec{v}^2 = \frac{1}{2} M \vec{v}_1^2 + \epsilon_p^+,$$

$$M \vec{v} = M \vec{v}_1 + \vec{p},$$

sledi uslov nastanka ekscitacije ([7], str. 53):

$$v > \frac{\epsilon_p^+}{p}$$

Jasno je da je uslov održavanja SF kretanja obrnut:

$$\frac{\epsilon_p^+}{p} > v$$

S obzirom da SF kretanje može biti realizovano sa proizvoljno malim brzinama proticanja, ovaj uslov se svodi na to da minimum veličine ϵ_p^+/p mora biti pozitivan. Veličina $\min \epsilon_p^+/p$ upravo predstavlja onu kritičnu brzinu iznad koje se javlja trenje ([12], str. 133). Sve u svemu, kriterijum SF čestica ima oblik:

$$(1.2) \quad v_{cr} \equiv \min v_{\varphi} = \min(\epsilon_p^+/p) > 0,$$

i može se formulisati na sledeći način: tečnost će se kretati bez trenja samo ako se, ili sve dotle dok se, u njoj pojavljuju elementarne ekscitacije koje imaju pozitivan minimum fazne brzine.

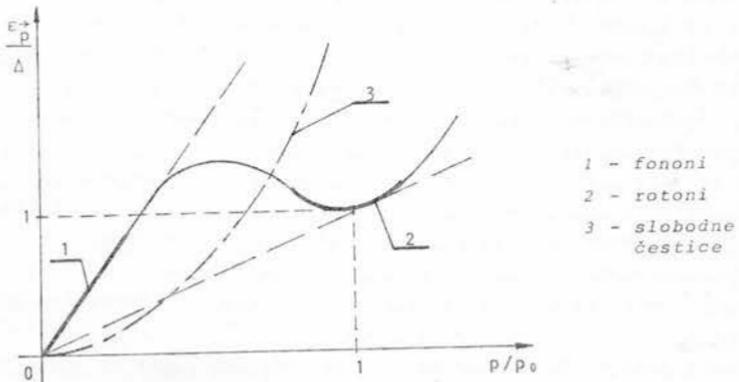
Prvu, polu-fenomenološku teoriju, koja je pokušala da objasni "zanimljivo" ponašanje kvantnih tečnosti (navedeno u par. 1) iznad λ - tačaka i da da odgovor na pitanje o kojim se ekscitacijama radi u He II, dao je Landau [28]. Znajući da se u tečnostima mogu rasprostirati samo longitudinalni zvučni talasi (fononi su dugotalasna mehanička pobudjenja), on je uzeo fononski spektar kao osnovu za spektar elementarnih ekscitacija u He II, ali ga je za veće energetske vrednosti zamenio spektrom koji ima rotonski minimum (sl. 1.2).

Naime, sam fononski mehanizam sa brzinom zvuka u i zakonom disperzije

$$(1.3) \quad \epsilon_p^f = u p,$$

nije mogao da objasni neobično ponašanje takvih termodinami-

čkih veličina kao što je toplotni kapacitet, ili fenomen SF.



S1. 1.2: Fononsko-rotonski spektar (prema [28]) u kojem isprekidane linije služe za određivanje kritične brzine SF kretanja - prema (1.2).

Zato je fonone trebalo "dopuniti" drugim elementarnim ekscitacijama - rotonima (to su lokalizovana pobudjenja) čiji je energetska spektar:

$$(1.4) \quad \epsilon_p^r = \Delta + \frac{1}{2m_r} (p - p_0)^2,$$

gde su: m_r - efektivna masa rotone, Δ - energetska gep i p_0 - impuls rotonekog minimuma (koji imaju odlučujuću ulogu u objašnjenju superfluidnosti). Ovakav kombinovani spektar pobudjenja, $\epsilon_p^f(+)\epsilon_p^r$, zadovoljava opšti kriterijum SF (1.2) za dva rešenja:

$$v_{cr} = \begin{cases} u = 239 \text{ m/s,} \\ \Delta/p_0 = 58 \text{ m/s.} \end{cases}$$

Prvo rešenje odgovara radjanju fonona i odgovara pojavi zvuka (ili prvog zvuka), dok drugo odgovara pojavi tzv. drugog zvuka (videti par. 2).

Fotonsko-rotanski spektar, čiji je oblik eksperimentalno potvrđen (npr. [29, 30]), daje ovakvo tumačenje: idealan gas pobudjenja He II sastoji se od smeše fonona i rotona; pri tom je, ispod 0,6 K, uticaj rotona zanemarljiv, ali je iznad 1 K dominirajući. Transport toplote se, u Landau - teoriji, razmatra kao tok ovih ekscitacija (vidi [31], par. 67 i 68), a za date gustine ovih ekscitacija u funkciji temperature (Maksvel-Bolcmanova raspodela) objašnjava se, pored viskoznog paradoksa, efekat fontane, daje predlog za drugi zvuk (temperaturski talas), izračunavaju gustine normalne i SF komponente (na osnovu dvokomponentnog modela i jednačina klasične hidrodinamike, datih u par. 2).

Prema najnovijim merenjima [5], na 0 K celokupna tečnost He II protiče superfluidno, a na višim temperaturama ($T \lesssim T_c$) samo jedan njen deo (prema [32]-do 14%), dok se drugi deo kreće normalno, odnosno viskozno. Iznad T_c egzistira samo NR komponenta.

Landau - teorija je svoje "kvantnomehaničko" uobličenje dobila u Fejnmanovim radovima [33, 34], koji elementarne ekscitacije u sistemu He II tretiraju kao fluktuacije gustine (detaljno npr. u [4], str. 336): pri malim impulsima ove fluktuacije su longitudinalnog (fononskog) karaktera, jer preovladava laminarno kretanje tečnosti, a pri većim impulsima, gde dolazi do izražaja vrtložno kretanje tečnosti, ove fluktuacije dobijaju turbulentan karakter (rotoni).

1.2. Boze kondenzacija He⁴

Sve do sada poznate fundamentalne čestice teorija mnoštva identičnih čestica [4, 10, 11, 12, 31, 35], prema spinskom kvantnom broju ovih čestica, deli u dve klase: čestice sa polucelim spinom (opisuju se antisimetričnim tala-

snim funkcijama) su fermioni i čestice sa celobrojnim spinom (opisuju se simetričnim talasnim funkcijama) su bozoni. Simetrija se odnosi na permutaciju čestica. Za fermione važi Paulijev princip isključenja (u jednom stanju se može nalaziti samo jedna čestica, ili da bude stanje prazno) i oni podležu Fermi-Dirakovoj statistici. Za bozone ne važi Paulijev princip (oni se mogu okupljati u proizvoljnom broju u jednom kvantnom stanju), a podležu Boze-Ajnštajnovoj statistici. Ukupan broj čestica u sistemu neinteragujućih čestica je ([10], gl. 4, par. 3):

$$N = \sum_i \langle n(\epsilon_i, T) \rangle; \quad \langle n(\epsilon_i, T) \rangle = (\lambda^{-1} e^{\epsilon_i/k_B T} \pm 1)^{-1}; \quad (1.5)$$

$$\lambda = e^{\mu/k_B T},$$

(znak "+" odgovara fermionskom, a "-" bozonskom sistemu). S obzirom na to da je He⁴ bozonski sistem i da je za fenomen SF odlučujuće okupljanje velikog broja čestica na osnovnom nivou, može se, na osnovu (1.5), odrediti koliki je to broj. Pošto svaki sistem teži da zauzme stanje sa najnižom energijom, očigledno je da će se atomi He II sakupljati u stanju sa $\epsilon = 0$, ili, što je isto, sa $p = 0$. Ovo sakupljanje Boze čestica u stanju sa nultim impulsom naziva se Boze kondenzacija (BAK), a sve čestice čiji je $p = 0$ obrazuju tzv. kondenzat. Njihov broj je:

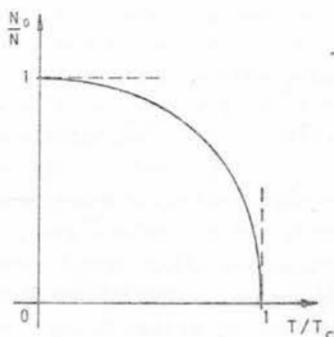
$$N_0 = (\lambda^{-1} - 1)^{-1}.$$

Pošto je N_0 pozitivan broj, λ ne može biti veće od jedinice; ako je $\lambda \ll 1$, $N_0 \ll N$, a ako $N_0 \rightarrow N$ i $\lambda \rightarrow 1$. Uslovu $\lambda = 1$ odgovara nulti hemijski potencijal ($\mu = 0$)!

Jasno je da je N_0 funkcija temperature i prema opštoj teoriji (npr. [36], str. 16) može se predstaviti kao na sl. 1.3, odnosno:

$$C_0 = \frac{N_0}{N} = \begin{cases} 1 - (T/T_c)^{3/2}, & T < T_c, \\ 0, & T \geq T_c. \end{cases} \quad (1.6)$$

Na bazi ovoga može se postaviti mikroskopska teorija SF He⁴ kao posledica BAK atoma He : gotovo svi atomi He II nalaze se u kondenzatu i samo mali broj ovih atoma ima impuls različit od nule i to usled trenja tečnosti sa zidovima suda (ekscitirani atomi). Razume se da se, pošto je tečnost u kretanju, ovde radi o vrednostima impulsa u sistemu reference vezanom za tečnost. Ovu teoriju dao je Bogoljubov



Sl. 1.3: Koncentracija kondenzovanih bozona (iz [37], str. 271) - odgovara jednačini (1.6)

([38], može se naći u [12, 39]) i njene osnovne postavke su:

1) Boze čestice (atomi He⁴) mogu se u neograničenom broju skupljati u jednom (osnovnom!) kvantnom stanju;

2) u prirodi postoji opšta i spontana težnja da sistem zauzme stanje sa najnižom energijom, odnosno, nultim impulsom;

3) ukupan broj atoma He II može se postaviti kao zbir broja kondenzatnih N_0 (sa $p = 0$) i broja nadkondenzatnih

$$N = \sum_{\vec{p} \neq 0} N_{\vec{p}}$$

atoma, pri čemu je $N \ll N_0 \approx N$.

Pokazavši da idealan (neinteragujući) bozonski gas ne može biti superfluidan, Bogoljubov je He II posmatrao kao slaboo-interagujući gas bozona. Njegov hamiltonijan, u reprezentaciji druge kvantizacije, može da se napiše kao:

$$(1.7) \quad H = \sum_{\vec{n}} b_{\vec{n}}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{n}}}{2 m_4} \right) b_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} W(\vec{n} - \vec{m}) b_{\vec{n}}^{\dagger} b_{\vec{m}}^{\dagger} b_{\vec{m}} b_{\vec{n}},$$

gde su b^{\dagger} i b Boze operatori u direktnom (koordinatnom) prostoru, a m_4 - masa atoma He⁴. Da bi se razdvojila stanja kondenzatnih i nadkondenzatnih atoma, mora se izvršiti Furije-transformacija (tzv. transformacija "prostor - impuls") ovog hamiltonijana. Kada se zanemare članovi koji sadrže interakcije u kojima su svi talasni vektori različiti od nule (jer samo bozoni s nultom vrednošću talasnog vektora čine kondenzat), što znači da se zanemaruju interakcije nadkondenzatnih bozona (detalji se mogu videti u [12], str. 133 do 138), u prvoj aproksimaciji teorije perturbacija, hamiltonijan (1.7) dobija oblik:

$$(1.8) \quad H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} N W(0) + \sum_{\vec{k} \neq 0} X(\vec{k}) b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} Y(\vec{k}) (b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{-\vec{k}}^{\dagger} + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}),$$

$$X(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_4} + Y(\vec{k}), \quad Y(\vec{k}) = c_0 W(\vec{k}),$$

gde je $W(\vec{k})$ - Furije lik dvočestične interakcije $W(\vec{n} - \vec{m})$. Ovaj hamiltonijan je nestabilan (pod tim se podrazumeva da vakuumsko stanje, sa $\langle 0 | H_{\text{eff}} | 0 \rangle$, nije stanje sa najnižom energijom), jer, zbog prisustva članova $b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{-\vec{k}}^{\dagger}$ i $b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}$, ne komutira sa operatorom ukupnog broja nadkondenzatnih čestica

$$\sum_{\vec{k} \neq 0} b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}.$$

Eliminacija trećeg sabirka u (1.8) postiže se kanonskom transformacijom:

$$(1.9) \quad b_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} C_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} C_{-\vec{k}}^{\dagger}, \quad u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1,$$

pri čemu se sa b i b^{\dagger} prelazi na nove Boze operatore C i C^{\dagger} pomoću realnih i parnih funkcija u i v , koje se, pak, određuju tako da transformisani hamiltonijan postane dijagonalan:

$$(1.10) \quad H_d = \frac{1}{2} NW(0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} [\epsilon(\vec{k}) - X(\vec{k})] + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}}^{\dagger} C_{\vec{k}}.$$

Spektar elementarnih ekscitacija

$$\epsilon(\vec{k}) = \sqrt{X^2(\vec{k}) - Y^2(\vec{k})},$$

u aproksimaciji tvrdih sfera ([40], gl. 14), gde

$$W(\vec{k}) \rightarrow \bar{W} = \frac{4\pi\hbar^2}{m_u f}$$

(f - amplituda rasejanja), dobija oblik:

$$(1.11) \quad \epsilon_{\vec{p}}^{\dagger} = p \sqrt{\frac{p^2}{4m_u^2} + \frac{C_0}{m_u} \bar{W}}, \quad p = \hbar k.$$

Ovaj spektar zadovoljava opšti kriterijum SF čestica (1.2):

$$(1.12) \quad \min(\epsilon_{\vec{p}}^{\dagger}/p) \equiv \left[\frac{d}{dp} (\epsilon_{\vec{p}}^{\dagger}/p) \right]_{p=0} = \sqrt{\frac{C_0}{m_u}} \bar{W} > 0.$$

Analizom izraza (1.11) dolazi se do neverovatnog slaganja ove mikroskopske i fenomenološke (prethodni paragraf) teorije.

Pri malim impulsima mikroskopski zakon disperzije je linearan:

$$(1.13) \quad \epsilon_{\vec{p}}^{\dagger} \Big|_{p=0} = v p, \quad v = \sqrt{\frac{N_u \bar{W}}{N m_u}},$$

što odgovara fononskom (1.3) spektru, dok je za velike impul-

se, kao i kod teorije Landaua, on kvadratan:

$$(1.14) \quad \epsilon_p^+ \Big|_{p \gg 0} = \frac{p^2}{2m^*},$$

što, opet, odgovara rotonskom (1.4) spektru.

Osnovna zamerka ovom modelu je ta što polazi od pretpostavke da se skoro svi atomi He^4 pri niskim temperaturama nalaze u osnovnom stanju. Ova pretpostavka se oslanja na eksperiment Andronikašvilija [41] koji je pokazao da je gustina SF komponente slična funkcija temperature kao i koncentracija bozona (sl. 1.3). Eksperimenti [42] to baš ne potvrđuju; oni, umesto (1.6), predlažu empirijsku formulu:

$$(1.15) \quad \begin{aligned} C_0(\tau) &= C_0(0)(1 - \tau^\alpha), \quad \tau = T/T_c < 1, \\ C_0(0) &= 0,139 \pm 0,023, \quad \alpha = 3,6 \pm 1,4, \end{aligned}$$

što bi značilo da i na apsolutnoj nuli kondenzat čini negde oko 14% atoma He^4 .

Strožiji proračun, uračunavanjem popravki viših redova teorije perturbacija, ne zanemarivanjem neodržavajućih članova hamiltonijana i korišćenjem realnijeg potencijala gausijanskog tipa (umesto rasejanja na δ -potencijalu), dala je grupa japanskih teoretičara [43]. Slaganje njihovih rezultata (a to je korigovana teorija Bogoljubova) sa eksperimentima je izuzetno dobro.

2. HIDRODINAMIKA SUPERFLUIDNOG KRETANJA

Na osnovu Tisininog modela [44] dvokomponentne tečnosti Landau [28] je uspeo da razradi mikroskopsku teoriju SF kretanja He^4 . U njoj se posmatra specifično kretanje smeše dveju komponenti tečnosti: normalne (ima brzinu \vec{v}_n , gustinu ρ_n , viskoznost η i prenosi toplotu, odnosno, entropiju S) i superfluidne (ima brzinu \vec{v}_s , gustinu ρ_s , nema viskoznosti, ne

prenosi toplotu i kreće se potencijalno: $\text{rot} \vec{v}_s = 0$). Kompletan sistem jednačina koji opisuje SF kretanje tečnog He⁴ (videti u [13], gl. 16), koji sledi iz jednačine kontinuiteta, zakona održanja impulsa, održanja entropije (zbog reverzibilnosti procesa termo-mehaničkog efekta, [8] - I deo), održanja potencijalnosti kretanja i zakona održanja energije, respektivno, je:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} &= 0, \quad \rho = \rho_s + \rho_n, \quad \vec{j} = \rho_s \vec{v}_s + \rho_n \vec{v}_n, \\
 \frac{\partial j_l}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{lk}}{\partial x_k} &= 0, \quad (i, l, k) \in (x, y, z), \\
 (2.1) \quad \frac{\partial(\rho S)}{\partial t} + \text{div}(\rho S \vec{v}_n) &= 0, \\
 \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial t} + \nabla \left(\frac{1}{2} \vec{v}_s^2 + \mu \right) &= 0, \quad \vec{v}_s = \nabla \varphi_s, \\
 \frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + \text{div} \vec{Q} &= 0,
 \end{aligned}$$

gde su: Π_{lk} - tenzor gustine protoka impulsa, μ - hemijski potencijal tečnosti, φ_s - potencijal brzine SF komponente i \vec{Q} - gustina protoka energije.

Uz odgovarajuće granične uslove (videti [13], str. 586/10), ovaj sistem jednačina svodi se na dve nezavisne jednačine koje opisuju kretanja, posebno NR komponente:

$$(2.2) \quad \frac{\partial \vec{v}_n}{\partial t} + (\vec{v}_n \nabla) \vec{v}_n = - \frac{1}{\rho_n} \nabla p_n + \frac{D}{\rho_n} \Delta \vec{v}_n,$$

koja se poklapa sa Navie-Stoksovom jednačinom kretanja "obične" tečnosti ([45], par. 33.4), i posebno SF komponente:

$$(2.3) \quad \frac{\partial \varphi_s}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla \varphi_s)^2 + \frac{p_s}{\rho_s} = 0, \quad \Delta \varphi_s = 0.$$

Disipativni procesi ovde nisu uzeti u obzir. Njihov obračun [46] dozvoljava objašnjenje turbulencije i nastanak vrtložnih linija u sistemu, ali je veoma komplikovan i ovde neće biti prezentiran (može se naći u [9]).

Na ovaj način Landau je prvi uspeo da dobije osnovne klasične jednačine kretanja dvokomponentnog modela. Sam Landau je pokušao da izrazi mikroskopske termodinamičke promenljive preko kvantnomehaničkih operatora i da iz jednačina kretanja tih operatora dobije jednačinu koja opisuje SF kretanje. Tako je pokazao [13] da je dobijena jednačina ekvivalentna jednačini kontinuiteta i Ojlerovoj jednačini.

Izvodjenje jednačina kretanja za He II na osnovu mikroteorije još definitivno nije rešeno. Fundamenti teorije kvazisrednjeg [47] su postavljeni na osnovu modela slaboin-teragujućih bozona u blizini apsolutne nule. Za takav sistem, pokazano je ([48], gl. 3, par. 3), može se odrediti talasna funkcija Boze kondenzata. U literaturi (npr. [7], par. 1.4 i 2.2) se postulira stav da se ponašanje kondenzata potpuno određuje jednom talasnom funkcijom ψ sa koherentnom fazom φ :

$$(2.4) \quad \psi \equiv \psi(\vec{r}, t) = \psi_0(\vec{r}, t) e^{i\varphi(\vec{r}, t)},$$

koja predstavlja rešenje Šredingerove jednačine:

$$(2.5) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi + \bar{V}(\vec{r}) \psi,$$

ovde su: M - masa i $\bar{V}(\vec{r})$ - srednja potencijalna energija (za sada, dva neodređena parametra).

Kako je pokazano u prethodnom paragrafu, sve čestice neinteragujućeg Boze gasa na apsolutnoj nuli kondenzuju se na najnižem energetskom nivou. U prisustvu interakcije između bozona kondenzat se "troši". Pretpostavlja se zato da SF deo He II nije povezan jedino s kondenzatom već i sa drugim česticama koje imaju impuls različit od nule pri $T = 0$ K, tj. da i čestice koje napuste kondenzat (zbog interakcije) slede kretanje kondenzata. Kako je ψ - makroskopska talasna funkcija (opisu-

je ponašanje celog SF dela He^n) proizvod $\psi^* \psi$ ne može se interpretirati kao gustina nalaženja čestica na mestu \vec{r} u trenutku t , već se normira tako da $|\psi|^2$ bude jednako srednjoj koncentraciji SF atoma:

$$(2.6) \quad |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi_0^2(\vec{r}, t) = \frac{\rho_S}{m_4}.$$

Termodinamičkom analizom ovog sistema (sa nepromenljivim brojem atoma; detalje videti u [7], str. 60 i 61) pokazuje se da je hemijski potencijal μ celokupne tečnosti u stanju mirovanja ekvivalentan potencijalnoj energiji SF komponente obračunatoj po jednoj čestici. To znači, da se $\vec{V}(\vec{r})$ i M u jednačini (2.5) mogu zameniti sa μ i m_4 , respektivno, tako da ona dobija oblik:

$$(2.7) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_4} \nabla^2 \psi - \mu \psi = 0.$$

Zamenom (2.4) u (2.7) dolazi se do jednačine koja sadrži realni i imaginarni deo. Imaginarni deo daje jednačinu kontinuiteta ([7], par. 2.3):

$$(2.8) \quad \frac{\partial \rho_S}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_S = 0, \quad \vec{j}_S = \rho_S \vec{v}_S,$$

pri čemu je brzina SF dela $\vec{v}_S = (\hbar/m_4) \nabla \varphi$, dakle, u poredjenju sa trećom jednačinom iz sistema (2.1), $\varphi_S = (\hbar/m_4) \varphi$.

Realni deo:

$$\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m_4} \left[\frac{\Delta \psi_0}{\psi_0} - (\nabla \varphi)^2 \right] - \mu,$$

omogućava da se odredi brzina promene faze:

$$(2.9) \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m_4} \frac{\Delta(\sqrt{\rho_S})}{\sqrt{\rho_S}} - \frac{1}{2} m_4 \vec{v}_S^2 - \mu,$$

(jednačina je istog tipa kao i (2.3)), a odatle i jednačina za promenu brzine kretanja SF komponente:

$$(2.10) \quad \frac{\partial \vec{v}_S}{\partial t} + \nabla \left(\frac{u}{m_4} + \frac{1}{2} \vec{v}_S^2 \right) = 0.$$

Ako se uzme da je $\rho_S = \text{const.}$ (daleko od T_C^-) i da je $\text{rot} \vec{v}_S = 0$ (slučaj potencijalnog kretanja, kretanja malim brzinama), kombinacijom (1.21) i (1.22) dobija se Laplasova jednačina:

$$\Delta \varphi(\vec{r}, t) = 0.$$

Za kretanje NR komponente, polazeći od jednačine kontinuiteta kretanja tečnosti kao celine i održanja entropije (toplotu prenosi NR komponenta) i jednačina (2.8) i (2.10), dobija se (detaljno u [7], par. 2.4):

$$(2.11) \quad \rho_n \left[\left(\frac{\partial \vec{v}_n}{\partial t} \right) + (\vec{v}_n \cdot \nabla) \vec{v}_n \right] = - \nabla p / \rho + \eta \Delta \vec{v}_n - \rho_S S \nabla T,$$

koja je jednačina Navie-Stoksovog tipa (2.2) kojoj je dodat član s toplotnim gradijentom.

Dakle, može se zaključiti da jednačina (2.7) ima fundamentalan značaj: to je jednačina koja opisuje kretanje SF kvantne tečnosti. Korekcija ove jednačine, na osnovu fenomenološke teorije faznih prelaza Ginzburg-Landaua ([7], gl. 6 ili [31], gl. 14, odnosno [49], gl. 4 i 5), istina primenjene na određivanje talasne funkcije SP stanja (ali SP se objašnjava kao SF naelektrisanih čestica, i tu glavnu ulogu ima sistem kondenzovanih bozona - kuperovski sparenih elektrona; o ovome će detaljnije biti izloženo u par. 4 i 12), sastoji se u određivanju hemijskog potencijala sistema na osnovu razvoja slobodne energije sistema po stepenima ($T - T_C$). Na taj način, u literaturi (npr. [19, 50]) poznata pod imenom, fenomenološka jednačina hidrodinamike SF tečnosti, ima oblik:

$$(2.12) \quad i\hbar(\partial \phi / \partial t) \pm A_1 \phi + A_2 \Delta \phi - A_3 |\phi|^2 \phi = 0, \quad \phi \equiv \phi(\vec{r}, t),$$

gde pozitivni koeficijenti A_j ($j = 1, 2, 3$), koji odražavaju

svojstva dotičnog sistema (masa čestica, dužina koherencije, odnosno međuatomsko rastojanje, konstante interakcija i sl.), mogu zavisiti od temperature (kao u [51], gde se izvodi jednačina Ginzburg-Pitajevskog za He II u slučaju kada NR komponenta miruje, ili pak [52], gde se razmatra nestacionaran slučaj; u [53] se daje fenomenološko-mikroskopski prilaz dvokomponentnom modelu tečnog He⁴ u okolini T_c i eksplicitno izražava ova temperaturna zavisnost).

Treba napomenuti da smena $\psi \rightarrow \hat{\psi}$, kad se uporede jednačine (2.7) i (2.12), nije učinjena slučajno. Naime, čisto mikroskopskom analizom slebo interagujućeg bozonskog sistema [47] (ili [54], str. 244 do 281) čiji je hamiltonijan, u reprezentaciji druge kvantizacije, oblika:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \nabla \hat{\psi}(\vec{r}, t) - \lambda \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \\
 & + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\psi}(\vec{r}, t) \hat{\psi}(\vec{r}', t) + \\
 (2.13) \quad & + \int d\vec{r} [n(\vec{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) + n^*(\vec{r}, t) \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \\
 & + U(\vec{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\psi}(\vec{r}, t)],
 \end{aligned}$$

ovde su: λ - konstanta, $V(\vec{r} - \vec{r}')$ - parna međjubozoneka interakcija $\hat{\psi}^\dagger$ i $\hat{\psi}$ - Boze operatori u Hajzenbergovoj slici; n i n^* su funkcije koje imaju ulogu "izvora" čestica u spoljašnjem polju U , i na osnovu Hajzenbergovih jednačina kretanja za operatore polja $\hat{\psi}$ (za $\hat{\psi}^\dagger$ se dobija adjungovanjem iste):

$$\begin{aligned}
 i\hbar(\partial\hat{\psi}(\vec{r}, t)/\partial t) = & - \lambda \hat{\psi}(\vec{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \\
 (2.14) \quad & + U(\vec{r}, t) \hat{\psi}(\vec{r}, t) + n(\vec{r}, t) + \\
 & + \int d\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\psi}(\vec{r}', t) \hat{\psi}(\vec{r}, t),
 \end{aligned}$$

te usrednjavanjem ove jednačine po neravnotežnom statističkom ansamblu (detalje videti u [55] ili u [54], str. 178), dobija

se jednačina koja opisuje SF ponašanje kvantne tečnosti:

$$(2.15) \quad i\hbar(\partial\vec{\phi}(\vec{r},t)/\partial t) + [\lambda - U(\vec{r},t)]\vec{\phi}(\vec{r},t) + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\vec{\phi}(\vec{r},t) - \\ - \int d\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') |\vec{\phi}(\vec{r}',t)|^2 \vec{\phi}(\vec{r},t) = \eta(\vec{r},t).$$

i koja je istog tipa kao i jednačina (2.12). Koherentne amplitude $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ predstavljaju srednje vrednosti operatora polja:

$$(2.16) \quad \vec{\phi}(\vec{r},t) \equiv \langle \hat{\psi}(\vec{r},t) \rangle, \quad \vec{\phi}^*(\vec{r},t) \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r},t) \rangle.$$

Sličnom procedurom traženja rešenja za $\vec{\phi}$ sa koherentnom fazom φ u obliku (2.4) ova jednačina se "raspada" na dva sistema jednačina koje opisuju hidrodinamiku NR tečnosti (on je tipa Navie-Stoksove i jednačine kontinuiteta) i hidrodinamiku SF tečnosti (slično kao i jednačine (2.8 do 2.11)).

Ova procedura detaljno je izložena u [54], str. 433 do 481, i ovde neće, zbog svoje dužine, biti izložena. Metodom Grinovih funkcija nadjen je spektar elementarnih ekscitacija u sistemu i pokazano je da je on linearan za dve brzine: jedna odgovara pojavi običnog (prvog) zvuka, a druga, specifična brzina SF tečnosti, pojavi tzv. drugog zvuka kao temperaturnog talasa.

3. MOGUĆNOST SUPERFLUIDNOSTI U SISTEMU KVAZIČESTICA

U prethodnim paragrafima je konstatovano da u sistemu Boze čestica dolazi do pojave SF kretanja i da je ovo kretanje uslovljeno stvaranjem BAK. Pošto se većina elementarnih pobudjenja u kondenzovanoj materiji tretira kao sistem Boze kvazičestica [56], postavlja se pitanje da li i kvazičestični sistemi mogu da budu superfluidni. Prvi radovi u vezi sa ovim [57 do 59] pojavili su se pre nešto više od dve decenije i prema početnim ocenama izgledalo je da fenomen SF treba očeki-

vati i u kvazičestičnim sistemima. Najviše radova bilo je posvećeno problemu kondenzacije eksitona Vanije-Mota [60 do 62], ali se, takodje, ispitivala mogućnost kondenzacije Frenkelovih eksitona [63] i magnona u jakom magnetnom polju [64 do 66]. Paralelno sa pomenutim radovima javila su se i mišljenja [67 do 70] da u sistemu kvazičestica ne može doći do stvaranja BAK, niti može da postoji SF kretanje.

U ovom paragrafu analiziraće se razlozi "za" i "protiv" Boze kondenzacije u sistemu kvazičestica.

Osnovni argumenti protiv kvazičestične kondenzacije su sledeći:

- broj kvazičestica se ne održava, ne može se uvesti pojam hemijskog potencijala, pa prema tome nije sigurna ni egzistencija kondenzata;
- pod superfluidnošću se podrazumeva samo SF transfer mase [70] i pošto kvazičestice nemaju stvarnu masu - iluzorno je govoriti o njihovoj SF;
- operatori kreacije i anihilacije elementarnih ekscitacija nisu, strogo govoreći, Boze operatori već imaju i neke karakteristike Fermi operatora, pa se stavlja pod sumnju da se ovakvi sistemi mogu tretirati kao bozonski sistemi.

Argumenti u *prilog* kvazičestične kondenzacije zasnivaju se na mnogobrojnim teorijskim ocenama o tome pod kojim uslovima se može očekivati kvazičestična kondenzacija. Jedan od osnovnih kriterijuma za nastanak BAK je zahtev [61] da vreme života kvazičestica (τ_L) bude veće od vrémena uspostavljanja termodinamičke ravnoteže sa fononima (τ_F). Ako je to tako onda je broj kvazičestica u intervalu $\tau_L - \tau_F$ konstantan, kvazičestice mogu da se kondenzuju a samim tim može da dodje do njihovog SF transfera.

Pored ovoga, pokazano je da odstupanje kvazičestične kinematike od bozonske dovodi do neophodnih interakcija koje omogućuju SF transfer kvazičestica [63]. U radu [19] pokazano je da za kretanje eksitona Vanije-Mota važe iste hidrodinamičke jednačine koje važe i za SF tečnost.

Osim toga, potrebno je podvući da pod superfluidnošću ne treba

podrazumevati samo SF transfer mase, već bilo koje relevantne fizičke veličine, kao što su energija, impuls, informacija itd.

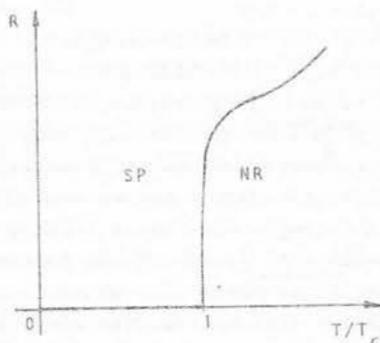
Što se hemijskog potencijala tiče, može se zaključiti da on nije bitan element za stvaranje BAK, jer ga u teoriji Bogoljubova [54] i monografiji Halatnjikova [9] uopšte nema, a u monografiji Tilijevih [7] kaže se da su uslovi za stvaranje kondenzata utoliko bolje ispunjeni ukoliko je hemijski potencijal manji, tj. $\mu/k_B T$ treba da bude dovoljno malo; kasnije se zamenjuje: $\mu = 0$.

U sledećim paragrafima (gl. 2, 3, 4) detaljnije će se analizirati kriterijumi za kvazičestičnu BAK, a ovaj paragraf se može završiti konstatacijom da do danas, na žalost, ne postoje pouzdani eksperimentalni dokazi da postoji SF kvazičestica. Izvesni radovi, kao npr. [25, 71 do 76], gde je eksperimentalno konstatovana SF kvazičestica, još uvek nisu prihvaćeni kao siguran dokaz.

Kako se može naći odgovor na pitanje da li u jednom sistemu postoji SF? Koji bi to bili dokazi? Kao prvo, treba ispitati da li je vreme života kvazičestica veće od vremena njihove relaksacije sa atomima kristalne rešetke. Zatim, ako je odgovor potvrđen, treba naći zakon disperzije i ispitati da li on ima oblik fononsko-rotonske slike, odnosno, da li je linearan za male i kvadratan za velike impulse. Ako je, dakle, zadovoljen i kriterijum SF (1.2) može se konstatovati da postoje neophodni uslovi za BAK i SF kvazičestica [79 do 81]. SF transfer relevantne fizičke veličine može se pokazati formiranjem i analizom jednačine kretanja iste [81]. Ukoliko SF transfer postoji ona mora imati oblik fenomenološke jednačine (2.12).

4. SUPERFLUIDNI TRANSFER NAELEKTRISANIH ČESTICA - SUPERPROVODLJIVOST

Pri hladjenju nekih metala i legura do niskih temperatura (oblast tečnog helijuma) njihov električni otpor skoro pada na nulu (sl. 4.1). Ovu pojavu je 1911. godine otkrio Kamerling-Ones [82] pri ispitivanjima sa čistom živom. Važno je napomenuti da je temperaturski interval u kojem otpor naglo pada izuzetno mali (detaljnije u [2, 7 i 83 do 89]) i da pojava SP nastaje samo ako je gustina električne struje dovoljno niska.



Sl. 4.1: Električni otpor superprovodnika (SPR) u blizini apsolutne nule (iz [83], str. 645).

Temperatura, pri kojoj se dešava fazni prelaz iz NR stanja - stanja sa "normalnim" električnim otporom, u SP stanje - stanje bez električnog otpora, je kritična temperatura T_c . Vreme koje SP materijal može da provede u SP-stanju je, praktično,

beskonačno dugo (kod materijala koji se koriste za SP magnete primećuje se konačno vreme SP stanja usled nereverzibilne preraspodele magnetnog fluksa u SPR).

Magnetna svojstva SPR su isto tako netrivialna kao i električna. Nulti električni otpor dobro definiše SP stanje ali ne može da objasni njegova magnetna svojstva. Eksperimentalno je otkriveno da se SPR u slabom magnetnom polju ponaša kao idealan dijamagnetik (videti par. 14.4) za $T > T_c$, ali, ako se ohladi ispod T_c , on "izbacuje" linije magnetnog polja iz sebe (Majnsnerov efekat).

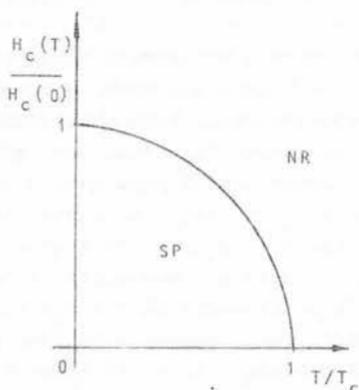
Priroda ovog stanja dugo vremena posle otkrića same pojave bila je tajanstvena. Tek posle 1950. godine radovima Freliha (par. 11) i objašnjenjem SF tečnog helijuma od strane Bogoljubova (par. 1.2) na osnovu BAK atoma He^4 , došlo se na ideju da se objašnjenje mehanizma SP može naći u kolektivnom ponašanju elektrona (detaljnije videti u [4, 10, 12, 31, 35, 48, 49 i 90, 91, 92]). Poznato je da je SP stanje uređeno stanje provodnih elektrona metala. Uredjenost se ogleda u tome da se elektroni (koji su slobodni na $T > T_c$) vezuju u tzv. Kuperove parove (par. 12). Takav par čini česticu bozonskog tipa koja može da se kondenzuje i da se SF kreće kroz metal (videti par. 1 i 2). Mikroskopska analiza SPR van spoljašnjeg magnetnog polja je čuvana BCS teorija.

Danas je poznato da SP pokazuju mnogi metali, metalne legure, intermetalna jedinjenja i poluprovodnici (u [93] je dat detaljan pregled periodnog sistema elemenata i njihovih provodnih osobina). Zanimljivo je da SP nije pronađena kod alkalnih i plemenitih metala iako su oni dobri provodnici pri normalnim uslovima. Feromagnetici, takodje, ne pokazuju SP osobine. Nemetali, pri odredjenim uslovima (visok pritisak i veoma niske temperature, ~ 1 K), prelaze u SP stanje ali je problem mehanizma i prirode tog prelaza - pitanje koje još uvek traži odgovor [20, 22, 24, 50 i 94 do 99].

SP je unikatno niskotemperatursko ($T_{c \text{ max}} \sim 20$ K) kvantnomehaničko svojstvo čvrstih tela. Mogućnost "izgradnje" visoko-

temperaturskih SPR analizira se u [100 i 101].

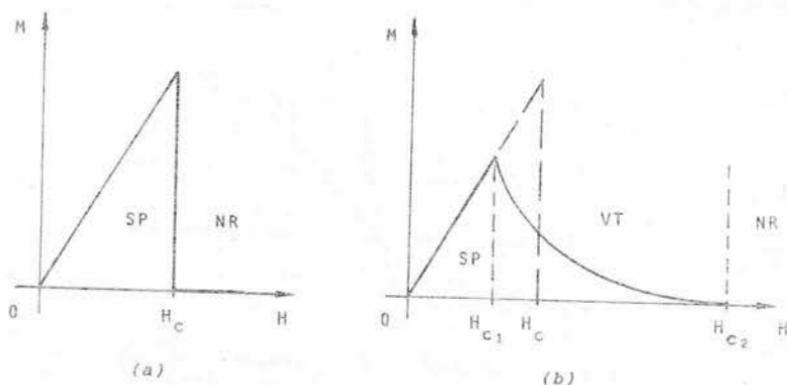
"Razaranje" SP, osim povećanjem gustine električne struje, može biti postignuto i jakim magnetnim poljem. Veličina kritičnog magnetnog polja H_c koja uzrokuje prelaz u NR stanje zavisi od temperature (sl. 4.2): najveća je na apsolutnoj nuli, a najmanja (nulta) na T_c . Jasno je da se $H_c(0)$, kao i T_c , razlikuje od materijala do materijala (detaljno u [84], str. 425).



Sl. 4.2: Zavisnost kritične jačine magnetnog polja od temperature (iz [83], str. 646).

Na osnovu Maksvelovih jednačina ([102], par. 12) sledi da je $(d\vec{B}/dt) \sim \text{rot}\vec{E}$ i $\vec{E} = \rho\vec{j}$. Pri nultom električnom otporu: $\rho = 0 \Rightarrow E = 0$, a odatle je i $(d\vec{B}/dt) = 0$, tj. magnetni fluks se ne menja pri prelazu iz NR u SP stanje. Majnsnerov efekat [103], protivureći ovom rezultatu, te se može zaključiti da su idealni dijamagnetizam i odsustvo električnog otpora dva suštinski nezavisna svojstva SPR. Kriva magnetizacije M (parametar uredjenosti sistema, videti par. 14.4) u funkciji jačine spoljašnjeg magnetnog polja H data je na sl. 4.3a. Ovakav slučaj se sreće kod tzv. SPR prve vrste, za raz-

liku od SPR druge vrste (sl. 4.3b) koji mogu da se nalaze i u tzv. vrtložnom stanju (VT).

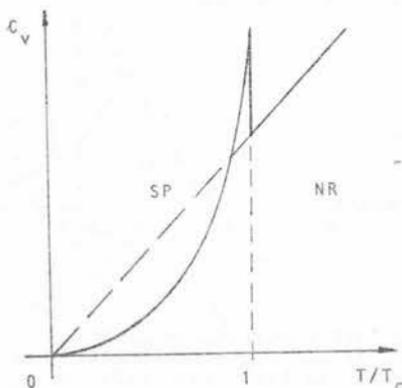


Sl. 4.3: Kriva magnetizacije SPR u funkciji jačine spoljašnjeg magnetnog polja (iz [84], str. 427), u slučaju SPR prve (a) i druge (b) vrste.

Potrebno je naglasiti da SPR druge vrste poseduju nulti električni otpor sve do H_{C_2} , a da je Majnsnerov efekat između H_{C_1} i H_{C_2} (vrtložno stanje) nepotpun, tj. magnetno polje delimično prodire u uzorak. Dubinu prodiranja magnetnog polja u SPR izučavali su braća Londoni [104] (može se naći i u [88], gl. 1, par. 2).

U SP stanju menjaju se i termička svojstva elektonskog gasa: za razliku od NR metala toplotni kapacitet SPR nije linearna funkcija temperature i manji je od toplotnog kapaciteta NR stanja (detaljno npr. u [84], str. 429). Smanjenje entropije pri prelazu iz NR u SP stanje (sl. 4.4) ukazuje na to da je SP stanje uredjenije (jer je entropija mera "neuredjenosti" sistema [105 do 107]); velika većina termički pobudjenih elektrona u NR stanju, uredjuje se pri prelazu u SP stanje.

Ovakva forma krive daje osnova pretpostavci prema kojoj je karakter pobudjenja elektrona vezan s preskokom preko energetskog gema ili prolaskom kroz energetski gep (sl. 4.5).



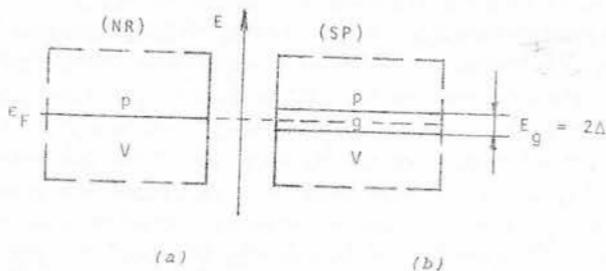
Sl. 4.4: Zavisnost toplotnog kapaciteta od temperature (iz [83], str. 649).

Širina ovog gema (procepa) zavisi od temperature; on je karakteristika (ali ne i univerzalna) SP stanja i njegovu prirodu objašnjava BCS teorija (par. 12).

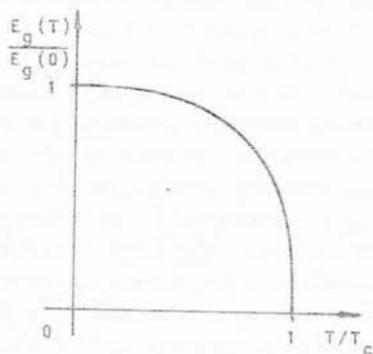
Prelaz iz SP stanja u NR stanje pri nultom magnetnom polju je fazni prelaz druge vrste [3], na čega ukazuje skok toplotnog kapaciteta (sl. 4.4) oko T_c , činjenica da se latentna toplota ne pojavljuje i da širina energetskog procepa kontinualno pada u nulu (sl. 4.6).

Postojanje energetskog gema sugerije na to da se elektroni u SPR mogu shvatiti kao smeša dva fluida (to je dvofluidni model - videti teoriju Ginzburg-Landaua u [49] ili u [71]): elektronski gas kao da je sastavljen od "kondenzovanih" i "normalnih" elektrona. Pri tome je kretanje kon-

denzovanih ili SP elektrona SF, odnosno, ne doprinosi električnom otporu metala ali zato samo oni učestvuju u prenosu elektriciteta.



Sl. 4.5: Zonska elektronska šema metala (iz [84], str. 430) u kojoj je uočljiva pojava energetskegepe (g) pri prelazu iz NR u SP stanje: v - valentna (popunjena) zona, p - provodna (nepopunjena) zona.



Sl. 4.6: Promena širine energetskegepe sa temperaturom (iz [84], str. 432).

SP elektroni su smešteni u osnovnom stanju koje je energet-

skim gepom odvojeno od stanja NR elektrona (sl. 4.5). Prelaz elektrona iz NR u SP stanje počinje onog trenutka kada temperatura metala padne na kritičnu; na $T = 0$ K svi elektroni su kondenzovani. Ova teorijska postavka potiče od Bogoljubovljeve teorije SF (par. 1.2). Iako je fenomen SF otkriven mnogo posle otkrića SP (Kapica 1938.g. i Ones 1911., respektivno), na objašnjenje prirode SP moralo je da se dosta dugo čeka: tek posle mikroskopske analize SF preko BAK atoma He^4 došlo se do ideje da se i elektroni kondenzuju. Ali kako? S obzirom da su elektroni Fermi čestice za koje važi Paulijev princip isključenja, oni se ne mogu okupljati na jednom energetsom nivou, dakle, ne mogu se ni kondenzovati. Ovaj problem rešen je u okviru BCS teorije: ne kondenzuju se elektroni već parovi elektrona sa suprotnim impulsima - Kuperovi parovi (videti par. 11 i 12). Ovi parovi obrazuju vezana stanja sa nultim ukupnim impulsom ("kaplja"). Stoga se Fermi gas elektrona ponaša kao Boze gas molekula, tj. parova koji, na dovoljno niskim temperaturama ($T \leq T_c$), obrazuju BAK.

Na postojanje energetskog procepa ukazuju i merenja apsorpcije elektromagnetnih talasa. U poljima dovoljno niskih frekvencija (infracrvena oblast) za koje je fotonska energija manja od energetske širine gepa, SP elektroni ne mogu da "preuzmu" energiju fotona. Ako se frekvencija elektromagnetnog polja povećava tako da energija fotona $\hbar\omega_c$ dostigne vrednost Δ , kondenzovani elektroni (iz osnovnog stanja) apsorbovaće fotone i prelaziti u pobudjeno stanje. To se registruje naglim povećanjem koeficijenta apsorpcije i smanjenjem koeficijenta refleksije i transparentije. Iznad ove frekvencije optičke osobine SPR biće iste kao i kod normalnog metala.

Medjutim, ostaje još jedno nerazjašnjeno pitanje: šta "tera" elektrone da se sparuju, kako dolazi do njihovog privlačenja i obrazovanja Kuperovih parova, kad se zna da između njih deluju kulonovske odbojne sile. Otkriće izotopskog efekta (kritična temperatura se smanjuje povećanjem mase metalnog izotopa; detaljnije videti npr. u [83], str. 651 ili u

[84], str. 434) ukazalo je na to da bi uzroke SP trebalo tražiti u interakciji elektrona sa fononima - oscilacijama kristalne rešetke. Pod određenim uslovima (videti u par. 11 i 12) ova interakcija dovodi, posredstvom virtuelne izmene fonona, do efektivne elektron-elektron interakcije, koja može biti privlačna te prouzrokovati sparivanje elektrona. Teorijski aspekt ovog fenomena detaljno je izložen u gl. 4.

GLAVA 2:

SUPERFLUIDNOST U MOLEKULARNIM KRISTALIMA

Osnovna optička pobudjenja u molekularnim kristalima tipa antracena, benzola i sl. su Frenkelovi eksitoni (videti par. 14.1), dakle - kvazičestice. S obzirom da se u ovim sistemima može očekivati kolektivizacija (BAK) i efekti SF transfera (energije, impulsa,...) samo pod uslovom kada je broj ovih pobudjenja približno konstantan, a on je takav ukoliko je vreme relaksacije tih kvazičestica manje od vremena njihovog života (tada imaju vremena da interaguju), potrebno je posmatrati sistem "testirati" na postavljene uslove. U par. 5 se pokazuje da je ovaj uslov ispunjen te se mogu ispitivati posledice interakcije ovog sistema.

Kao prvo, eksitoni interaguju između sebe i takva interakcija je dominantna nad ostalim interakcijama u slučaju visoke koncentracije eksitona (jako optičko pobudjivanje). U tom slučaju, pokazuje se, da može doći do BAK (par. 6.2) koja ima za posledicu SF oblik zakona disperzije, i da se transport pobudjenja kroz kristal opisuje istim dinamičkim jednačinama (par. 6.1) koje važe za hidrodinamiku SF tečnosti.

Kao drugo, eksitoni interaguju sa poljem mehaničkih vibracija rešetke; u slučaju kada je koncentracija eksitona mala ova interakcija je dominantna. Posledice virtuelne fononske izmene između eksitona (par. 7), koje odgova-

raju relativno niskim temperaturama sistema, su formiranje vezanih stanja eksitonskog sistema - bieksitona (par. 7.1) i eksitonskih kaplji (par. 7.2). Ove druge, u procesu svoje dezintegracije formiraju nova pobudjenja koja imaju SF karakter.

U slučaju kada se, usled interakcije eksitona sa fononima, kreiraju kvazičestice koje imaju brzinu manju od brzine zvuka u kristalu - one će biti solitoni sa svojim osobinama propagacije, ali ako one budu imale brzinu veću od brzine longitudinalnog zvuka, tada će one imati sve SF dinamičke osobine (par. 7.3) koje ima i klasična SF tečnost pri svom kretanju.

Treba naglasiti da sve analize sa efektivnom interakcijom između eksitona (par. 7), dakle u prisustvu eksiton-fonon interakcije, važe samo pri malim koncentracijama eksitona u kristalu. Iako je čista eksiton-eksiton interakcija, u opštem slučaju, za red veličine veća od efektivne eksiton-eksiton interakcije, pri niskim koncentracijama eksitona ona je zanemarljiva u odnosu na virtualne fononske procese. Kod visokih koncentracija (par. 6) jaka repulzija između eksitona maskira efekte izazvane interakcijom između eksitona i fonona, te, u tom slučaju, nema smisla ispitivati uticaj fonona na eksitonsko ponašanje. To znači da se u eksitonskom sistemu u zavisnosti od koncentracije eksitona pojavljuju dva suštinski različita mehanizma koja mogu objasniti BAK i SF i koja isključuju jedan drugog: pri visokim koncentracijama ($c = \langle N_0/N \rangle \sim 10^{-5}$ do 10^{-4} , N_0 - broj eksitona, N - broj molekula) to je čista eksiton-eksiton interakcija, a pri niskim ($c \ll 10^{-4}$) to je efektivna eksiton-eksiton interakcija. Kada se, za razliku od ovih analiza, ispituju vezana stanja sistema i termodinamičke osobine, moraju se u obzir uzeti obe interakcije ravnopravno.

Jednodimenzione (1d) strukture, molekularni lanci, koji se ovde tretiraju, sa praktične strane značajni su za razumevanje niza biofizičkih pojava jer bi oni mogli da budu dobar model za opisivanje specifičnog ponašanja realnijih bi-

oloških sistema, polimera i slično. Poznato je da se prenos nekih informacija (npr. nervnih impulsa) u biološkim sistemima vrši veoma brzo i sa minimumom deformacija polazne informacije. Možda superfluidno (?), jer ako bi se to odvijalo sa приметnim gubicima, dakle, usled neke interakcije sa okolnim sistemom, tada ta informacija, kada bi stigla do prijemnog centra, ne bi bila ona ista informacija koja je bila na početku. Ovo navodi na ideju da su mnogi biofizički fenomeni, pored ostalog, zasnovani i na SF efektu. Zbog toga su ovde i ispitivane osobine molekularnih lanaca sa aspekta egzistencije SF transfera energije, impulsa itd.

5. VREME RELAKSACIJE OPTIČKIH EKSCITACIJA

Jedan od osnovnih kriterijuma mogućnosti BAK kvazičestica je uslov da vreme života tih kvazičestica bude veće od njihovog vremena relaksacije (videti par. 3). Potrebno je, dakle, proveriti da li Frenkelovi eksitoni (par. 14.2) zadovoljavaju ovaj kriterijum.

Poznato je ([108], str. 364, zatim [109 i 110]) da je vreme života singletnih eksitona kod antracena $\tau_l^e = 10^{-9}$ do 10^{-8} s, a tripletnih $\approx 10^{-3}$ s.

Vreme relaksacije će biti procenjeno na osnovu na postizanje termodinamičke ravnoteže sa fononima. Ostali tipovi relaksacija se mnogo ređe javljaju (objašnjenje u [108], str. 358) te neće biti razmatrani.

Relaksaciono vreme se može izračunati na osnovu izraza ([40], str. 459):

$$(5.1) \quad \frac{1}{\tau_l} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} |M_{if}(\vec{k}, \vec{q})|^2 \delta(E_i - E_f),$$

gde su

$$(5.2a) \quad E_i - E_f = |X|a^2[q^2 - 2kq \cos(\vec{k}, \vec{q})] + \hbar v_s q,$$

$$(5.2b) \quad M_{if}(\vec{k}, \vec{q}) = \langle f | \frac{i\Delta}{\sqrt{N}} \left(\frac{\hbar}{2Mv_s q} \right)^{1/2} B_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger B_{\vec{k}}^\dagger (b_{-\vec{q}} + b_{\vec{q}}^\dagger) | i \rangle.$$

Izrazi (5.2) računati su sa eksitonskim hamiltonijanom (14.11) iz par. 14.2, u harmonijskoj aproksimaciji ($P = B$) i hamiltonijanom eksiton-fonon interakcije (14.17) iz par. 14.3, gde je obračunata samo (najveća) interakcija sa longitudinalnim fononskim talasima.

Kako se posmatra proces rasejanja jednog eksitona s impulsom \vec{k} na fononski vakuum ($1_{\vec{k}}^{(e)} + 1_{\vec{q}}^{(p)} + 1_{\vec{k}-\vec{q}}^{(e)}$), početno i krajnje stanje su definisani kao [50]:

$$(5.3a) \quad |i\rangle \equiv |0_{\vec{k}-\vec{q}}^{(e)}\rangle |1_{\vec{k}}^{(e)}\rangle |0_{\vec{q}}^{(p)}\rangle; \quad |f\rangle \equiv |1_{\vec{k}-\vec{q}}^{(e)}\rangle |0_{\vec{k}}^{(e)}\rangle |1_{\vec{q}}^{(p)}\rangle.$$

Ali, kako je potrebno uzeti u obzir i procese apsorpcije fonona od strane eksitona ($1_{\vec{k}}^{(e)} + 1_{\vec{q}}^{(p)} + 1_{\vec{k}+\vec{q}}^{(e)}$) ova stanja mogu biti i:

$$(5.3b) \quad |i\rangle \equiv |0_{\vec{k}+\vec{q}}^{(e)}\rangle |1_{\vec{k}}^{(e)}\rangle |1_{\vec{q}}^{(p)}\rangle; \quad |f\rangle \equiv |1_{\vec{k}+\vec{q}}^{(e)}\rangle |0_{\vec{k}}^{(e)}\rangle |0_{\vec{q}}^{(p)}\rangle.$$

Pomoću (5.1 do 5.3) dobija se ($M_{if} = M_{if}^{(a)} + M_{if}^{(b)}$):

$$(5.4) \quad \tau_r^e = \frac{3\pi^4 M v_s |X|}{2\hbar k_B^3 a V \Delta^2}.$$

Zamenom karakterističnih vrednosti relevantnih veličina eksitonskog i fononskog sistema (videti par. 14.1 do 14.3) i stavljanjem $V = 1 \text{ cm}^3$, dobija se da je vreme relaksacije optičkih ekscitacija:

$$(5.5) \quad \tau_r^e \approx 10^{-13} \text{ s}.$$

Znači, mnogo je kraće od vremena njihovog života.

S obzirom na ovo i već pomenuti kriterijum ($\tau_k^e \gg \tau_r^e$) može se konstatovati da je BAK, i sve njene posledice, u sistemu Frenkelovih eksitona moguća, i to u intervalu 10^{-13} do 10^{-8} posle osvetljavanja kristala.

6. NELINEARNI EFEKTI KAO UZROK SUPERFLUIDNOSTI

U prethodnom paragrafu pokazano je da eksitonski sistem u molekularnim kristalima zadovoljava osnovni kvazi-čestični kriterijum za BAK (ili tzv. kondenzaciju u prostoru impulsa). Na osnovu toga je zaključeno da se u ovom sistemu mogu očekivati i sve posledice ove kondenzacije, a među tim posledicama i svakako najinteresantnija - superfluidnost.

Treba, znači, da se ispita da li sistem Frenkelovih eksitona može da se "kreće" SF (u smislu SF transfera energije, impulsa, informacije i sl.). U ovom paragrafu će se razmatrati "čist" eksitonski sistem, znači obračunavaće se samo eksiton-eksiton interakcija u "zamrznutom" kristalu. Ovakav model je dobar u slučaju visokih eksitonskih koncentracija [80, 110]. Uticaj vibracija rešetke na zakon disperzije i koherentna eksitonska stanja biće obradjeni u sledećem paragrafu.

6.1. Koherentna eksitonska stanja

U paragrafu 3 rečeno je, a u radu [63] je i pokazano, da paulijeovski karakter eksitonskih operatora u bozonskoj slici daje takve kinematičke interakcije koje pogoduju realizaciji SF eksitonskog kretanja.

Ovde će biti pokazano kako kinematička interakcija Frenkelovih eksitona dovodi do karakteristične jednačine za hidrodinamiku superfluida, koju su, za slučaj tečnog He⁴ i eksitona Vanije-Mota dobili Bogoljubov [55] i Keldiš [19], respektivno (detaljnije o tome videti u par. 2).

U ovoj jednačini figurišu koherentne eksitonske amplitude:

$$\psi \equiv \psi(\vec{r}, t) = \langle \hat{\psi}(\vec{r}, t) \rangle + \langle B_n^+(t) \rangle,$$

$$\psi^* \equiv \psi^*(\vec{r}, t) = \langle \hat{\psi}^+(\vec{r}, t) \rangle + \langle B_n^+(t) \rangle,$$

kao srednje vrednosti (po koherentnim stanjima [111]) operatora polja.

Kao što je već naglašeno, posmatra se "čist" eksitonski sistem (u slučaju veće gustine eksitona interakcija sa fononima može da se zanemari [20, 98]), čiji hamiltonijan ima oblik (14.9) dat u par. 14.2. Na osnovu (14.13) prelazi se sa P na B operatore aproksimativno:

$$P^+P \approx B^+B - B^{+2}B^2,$$

i ako se zanemare svi ostali kinematički doprinosi kao i efekti neodržanja, hamiltonijan (14.9), u aproksimaciji najbližih suseda, ima oblik [50]:

$$(6.1) \quad H = \Delta \sum_{\vec{n}} B_n^+ B_n^+ + X \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} B_n^+ B_{n+\vec{\lambda}}^+ - \Delta \sum_{\vec{n}} B_n^+ B_n^2,$$

gde je $\vec{\lambda}$ - vektor koji spaja najbliže susede u prostoj kubnoj rešetki molekularnog kristala. Poslednji izraz u (6.1) može se napisati kao:

$$(6.2) \quad H_{\Delta}^{(2)} = - \Delta \sum_{\vec{n}} B_n^+ B_n^2 = - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} 2\Delta \delta_{\vec{n}\vec{m}} B_n^+ B_m^+ B_m^+ B_n^+,$$

pri čemu on predstavlja rasejanje na δ -potencijalu. Njegovi doprinosi se ne mogu računati direktno u Bornovoj aproksimaciji, već se on standardnim putem [112 do 114] prevede u formu koja sadrži amplitudu rasejanja na zadatom potencijalu:

$$(6.3) \quad H_{\Delta}^{(2)} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_e a^2} \sum_{\vec{n}} B_n^+ B_n^2.$$

Ovde je:

$$m_e = - \frac{\hbar^2}{2Xa^2},$$

i $m_e > 0$ jer je $X < 0$, ili

$$m_e = \frac{\hbar^2}{2|X|a^2}.$$

Kao što se vidi, ovo je odbojni potencijal jer na bliskim rastojanjima između eksitona dominiraju odbojne sile. Ako se za operator $B_{\vec{n}}(t)$ napiše Hajzenbergova jednačina kretanja, koristeći hamiltonijan (6.1) sa (6.3), u dobijenom rezultatu predje na kontinuum (kao u [54], str. 259), jednačina usrednji po koherentnim eksitonskim stanjima i iskoristi dekuplovanje:

$$\langle B^+ B B \rangle = \langle B^+ \rangle \langle B \rangle \langle B \rangle,$$

dobija se jednačina [50]:

$$(6.4) \quad i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} - (\Delta - 2|X|)\phi + 2a^2|X|\nabla^2\phi - \frac{4\pi\hbar^2}{m_e a^2}|\phi|^2\phi = 0.$$

Ova jednačina je istog tipa kao i fenomenološka (2.12), odnosno, fundamentalna (2.15) jednačina hidrodinamike SF tečnosti, jer je koeficijent uz poslednji član u (6.4) pozitivan, a to, prema [19] (videti u par. 2), uslovljava SF transfer u sistemu Frenkelovih eksitona.

6.2. Visoke eksitonske koncentracije

Da li visoke koncentracije eksitona, koje su danas u uslovima moćnog laserskog "pumpanja" moguće, mogu da budu uzrok BAK Frenkelovih eksitona i da li njihov spektar zadovoljava SF kriterijum (iz par. 1.1)? Odgovor na ovo pitanje mo-

že se potražiti sledeći ideje Bogoljubova (iznete u par. 1.2) koje su uspešno objasnile SF tečnog He⁴.

Imajući u vidu činjenicu da je energija elementarnih optičkih pobudjenja ($\Delta \approx 5$ eV) daleko veća od matricnih elemenata dipol-dipolne interakcije, kinematička interakcija u eksitonskom hamiltonijanu:

$$- \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{n}}^2$$

može se tretirati metodama teorije rasejanja na dubokim potencijalnim jamama ili veoma visokim potencijalnim barijerama (kao što je to učinjeno u prethodnom paragrafu). U oba slučaja, kako je već ranije konstatovano, efektivni rezultat je odbijanje medju česticama. Analitički se to izražava prelazom sa jednačine (6.2) na (6.3), tako da efektivni hamiltonijan u impulsnom prostoru (detaljnije videti npr. u [108], gl. 2) ima oblik:

$$(6.5) \quad H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}} + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_e V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} B_{\vec{k}_1}^{\dagger} B_{\vec{k}_2}^{\dagger} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3}^{\dagger},$$

gde je V - zapremina kristala. Prvi član ovog hamiltonijana dobijen je, posle izvršene Furije transformacije u (6.1), prelaskom na "u-reprezentaciju": $E_{\vec{k}}^{\dagger} \rightarrow E_{\vec{k}}^{\dagger} - u$, gde je $u = \Delta - 6|X|$ (za eksitone u aproksimaciji najbližih suseda). Uvođenje hemijskog potencijala je, u ovom slučaju, neophodno kako bi se izrazila činjenica da se, u posmatranom vremenskom intervalu (10^{-13} do 10^{-8} s, posle osvetljavanja kristala; par. 5), broj eksitona održava. Samo na taj način se može objasniti nastanak BAK (videti par. 3).

Pre nego što se predje na dalje analize treba naglasiti da posmatrani kinematički deo hamiltonijana (6.2), pored rasejanja, može da dovede i do "slepljivanja" eksitona (vezivanja eksitona na dubokom lokalnom nivou; [108], str. 357). Ako do ove pojave dodje, jasno je da neće biti BAK, pa ni SF. Prema tome, deo hamiltonijana (6.2) može da dovede do dva

medjusobno konkurentna procesa: rasejanja i stvaranja lokalnih vezanih stanja. U [108], str. 358, pokazuje se da u kristalima kod kojih je kvantni prinos luminescencije blizak jedinici praktično ne postoji mogućnost ni za pretvaranje eksitona u fonone, a još manje za vezivanja u lokalna stanja. Tipičan primer ovakvih kristala je antracen.

Prema tome, u ovakvim kristalima hamiltonijan (6.2) dovodi do rasejanja, medju česticama vlada odbojni potencijal tipa tvrdih sfera i ceo se sistem ponaša kao slaboneidealni Boze-gas sa odbojnim silama.

Spektar elementarnih pobudjenja se u ovakvoj situaciji može tražiti na isti način kao i kod tečnog He^4 (par. 1.2). Razdvajajući eksitone na kondenzatne $B_0 = B_0^+ = \sqrt{N_0}$, gde je N_0 - broj kondenzatnih eksitona (blizak ukupnom broju eksitona N) i nadkondenzatne, B_k^+ i B_k^- ($k \neq 0$), iz (6.5) se dobija sledeći hamiltonijan:

$$H = E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} (T_k^+ + U_0) B_k^+ B_k^- + \sum_{\vec{k} \neq 0} U_0 (B_k^+ B_{-\vec{k}}^+ + B_k^- B_{-\vec{k}}^-); \quad (6.6)$$

$$E_0 = \frac{N^2}{2N_0} U_0; \quad U_0 = \frac{2\pi\hbar^2 N_0 a}{m_e V}; \quad T_k^+ = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}; \quad V = Na^3.$$

Ako se izvrše kanoničke transformacije Bogoljubova [38], kao u (1.9), (6.6) se svodi na:

$$(6.7) \quad H_{\text{eff}} = \sum_{\vec{k} > 0} \epsilon(\vec{k}) (C_k^+ C_k^- + C_{-\vec{k}}^+ C_{-\vec{k}}^-); \quad \epsilon(\vec{k}) = [T_k^+ (T_k^+ + U_0)]^{1/2}.$$

Na osnovu ovoga lako je konstatovati da je:

$$(6.8) \quad \min \frac{\epsilon(p)}{p} = \sqrt{U_0} > 0; \quad p = \hbar k,$$

tj. spektar pobudjenja (6.7) je superfluidan!

Za male vrednosti impulsa može se napisati:

$$(6.9) \quad \epsilon(p) \Big|_{p=0} = pv_s, \quad v_s = \frac{\hbar}{m_e a} \sqrt{2\pi c},$$

gde je $c = N_0/N$ - koncentracija kondenzatnih eksitona u kristalu. Po analogiji sa terminologijom iz teorije tečnog He^4 veličina v_s je brzina eksitonskog zvuka. Za karakteristične vrednosti parametara eksitonskog sistema (par. 14.1) i $c = 10^{-4}$ ona je: $v_s = 9 \cdot 10^3$ m/s i, kao što se vidi, brzina eksitonskog zvuka je reda veličine brzine običnog zvuka u kristalu i proporcionalna je kvadratnom korenu iz koncentracije eksitona.

Na osnovu svega iznetog u par. 6.1 i 6.2 može se zaključiti da visoke koncentracije eksitona ($c = 10^{-5}$ do 10^{-4}) u tipičnim molekularnim kristalima mogu da budu uzrok BAK eksitona i njihove SF.

7. VIRTUELNA RAZMENA FONONA KAO UZROK EKSITONSKE SUPERFLUIDNOSTI

Prethodni paragraf je pokazao da u molekularnim kristalima može da egzistira eksitonski mehanizam SF. Ovaj slučaj je posmatran u uslovima visoke koncentracije eksitona kada se vibracije kristalne rešetke mogu zanemariti. Međutim, u slučaju kada koncentracija eksitona nije velika, kristal se ne može smatrati "zamrznutim", pa se i fononi moraju uzeti u obzir. Treba odmah naglasiti da oscilacije kristalne rešetke ne moraju da "kvare" SF sistema. Naprotiv, njihovo prisustvo može da dovede do neophodnih privlačnih interakcija između eksitona (u prisustvu virtuelnih fononskih procesa između eksitona), koje bi, sa svoje strane, dovele do stvaranja eksitonskih kaplji - BAK eksitona. Vrlo slično se dešava kod metala gde fononi uzrokuju privlačenje između elektrona i njihovo spajanje u Kuperove parove (videti par. 4., 11. i 12.).

Ovde će biti analiziran sistem koji se sastoji iz eksitona i fonona u slučaju jake eksiton-fonon interakcije, odnosno, eksiton-eksiton interakcije posredstvom virtuelne razmene fonona (kao što je to u teoriji SF kod elektron-fonon

interakcije - par. 4. i gl. 4.), tako da se hamiltonijan sistema može napisati u obliku:

$$(7.1) \quad H = H_e + H_p + H_{ep} .$$

Ovde su H_p i H_e standardni hamiltonijani fononskog i eksitonskog podsistema (dati u par. 14.1 i 14.2, respektivno), a H_{ep} je hamiltonijan interakcije ovih dvaju podsistema u aproksimaciji njihove jake veze (par. 14.3).

Ako se izvrši (standardni) prelaz u impulsni prostor, uzme aproksimacija efektivne eksitonske mase i malih talasnih vektora, njihovi izrazi će biti [66, 81]:

$$(7.2) \quad H_e = \sum_{\vec{k}} \epsilon_e(\vec{k}) B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}}, \quad \epsilon_e(\vec{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

$$(7.3) \quad H_p = \sum_{\vec{k}} \epsilon_p(\vec{k}) b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}, \quad \epsilon_p(\vec{k}) = \hbar v_s k,$$

$$(7.4) \quad H_{ep} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} F(\vec{q}) B_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} B_{\vec{k}} (b_{-\vec{q}}^{\dagger} + b_{\vec{q}}^{\dagger}),$$

$$F(\vec{q}) = \frac{i\Delta}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{\hbar}{2MNv_s q} \right)^{1/2} (\vec{q} \vec{\lambda}_{\vec{q}}^{\dagger}).$$

Postavlja se pitanje do koje vrednosti talasnog vektora još uvek važi aproksimacija efektivne mase. Egzaktna eksitonska energija $\epsilon_{\vec{k}} = \Delta - 2|X| \cos ak$ (gde je $|X|$ - matrični element dipol-dipolne interakcije u aproksimaciji najbližih suseda) može da se zameni izrazom

$$\epsilon_e(\vec{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e},$$

za tipične vrednosti karakterističnih veličina molekularnih kristala (videti par. 14.1 do 14.3), sve do $k_{\max} = 10^9 \text{ m}^{-1}$, što je negde oko 1/6 do 1/5 vrednosti graničnog talasnog vek-

toru prve Brilluena zona.

Hamiltonijan (7.1 do 7.4) po svojoj strukturi sličan je hamiltonijanu sistema elektrona i polja mehaničkih vibracija koji se koristi, kao što je već napred rečeno, u teoriji SP (videti par. 11 ili 12, str. 140). Kako će se, primenjujući Frelihove ideje [115], izvršiti unitarna transformacija hamiltonijana (7.1) i iskoristiti (aproksimativni) Vejllov identitet:

$$(7.5) \quad H_{eq} = e^{-S} H e^S = H - [S, H] + \frac{1}{2}[S, [S, H]],$$

sa antihermitskim operatorom:

$$(7.6) \quad S = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} W(\vec{k}, \vec{q}) B_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} B_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{-\vec{q}} - h.c.$$

Funkcija $W(\vec{k}, \vec{q})$ se određuje tako da u izrazu (7.5) nestanu svi članovi linearni po eksiton-fonon interakciji:

$$(7.7) \quad W(\vec{k}, \vec{q}) = F(\vec{q}) [\epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_e(\vec{k}-\vec{q}) + \epsilon_p(\vec{q})]^{-1}.$$

Pre nego što se krene sa daljnjim analizama potrebno je ispitati da li je učinjena aproksimacija u (7.5) korektna i dovoljna. Činjenica je da je ovakva procedura primenljiva u elektronskom sistemu kod ispitivanja superprovodnih osobina metala na niskim temperaturama (videti par. 11, 12 i 14.7). Naime, u radu [116] se pokazuje da se Vejllov identitet može primeniti ukoliko su koeficijenti razvoja konačni i da se, stoga, mora "izbeći" neki energetski sloj. Sam Frelih je pokazao [117], a do istog zaključka su došli i autori rada [118], da se teorija perturbacija, odnosno, Frelihova transformacija (koja joj je analogna), može primeniti u slučaju interakcije elektrona sa svim fononima čiji je intenzitet različit od $2k_F$ (k_F - granični talasni vektor Fermi sfere). Ovakva rasudjivanja mogu se "preslikati" na eksitonski sistem, ona neće promeniti gornje zaključke jer su, po redu ve-

ličina energija, eksitoni i elektroni veoma bliski. To znači da je primena (7.5) korektna.

Sama procena veličine konstante W (7.7) pokazuje da je ona veoma mala veličina ($\approx 10^{-11}$, za fonone sa debajevskom energijom i eksitone približno istih energija), a kako je operator S (7.6) proporcionalan toj veličini, može se s punim pravom zaključiti da je korišćena aproksimacija Vejllovog identiteta (7.5) i dovoljna.

Ako se u (7.5) zameni (7.6 i 7.7) i onda usrednji po fononskom vakuumu $|0\rangle_p$ (posmatra se samo spontana emisija fonona; pogledati diskusiju ispod (7.12), dolazi se do sledećeg - efektivnog hamiltonijana:

$$(7.8) \quad H_{\text{eff}} = \langle 0 | H_{\text{eq}} | 0 \rangle_p = H_{\text{har}}^C + H_{\text{anh}}^{\text{int}}$$

gde su:

$$(7.9) \quad H_{\text{har}}^C = \sum_{\vec{k}} [\epsilon_e(\vec{k}) + \Omega(\vec{k})] B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}},$$

$$(7.10) \quad H_{\text{anh}}^{\text{int}} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} V(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3) B_{\vec{k}_1}^{\dagger} B_{\vec{k}_2}^{\dagger} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3}^{\dagger},$$

Veličina

$$(7.11) \quad \Omega(\vec{k}) \equiv \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) |^2 [\epsilon_e(\vec{k}) - \epsilon_e(\vec{k} - \vec{q}) + \epsilon_p(\vec{q})]^{-1},$$

predstavlja korekciju na harmonijski spektar eksitona usled virtuelnih fononskih procesa i koji se, s obzirom na komentar ispod (7.7), može zameniti u odnosu na ϵ_e . Jednačina (7.10) sa:

$$(7.12) \quad \begin{aligned} V(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3) \equiv & -\frac{1}{2} |F(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)|^2 \{ [\epsilon_e(\vec{k}_1) - \epsilon_e(\vec{k}_3) + \\ & + \epsilon_p(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)]^{-1} + [\epsilon_e(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3) - \epsilon_e(\vec{k}_2) + \\ & + \epsilon_p(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)]^{-1} \}, \end{aligned}$$

označava efektivnu eksiton-eksiton interakciju prouzrokovanu virtuelnom izmenom fononâ izmedju eksitona.

Treba napomenuti da je posmatrana samo spontana emisija fonona koja je rezultat rasejanja eksitona na molekulima kristalne rešetke (kao i u par. 5):

$$1_{\vec{k}}^{(e)} + 1_{\vec{q}}^{(p)} + 1_{\vec{k}-\vec{q}}^{(e)}$$

(eksiton impulsa \vec{k} "predaje" fononu impuls \vec{q} i rasejava se sa impulsom $\vec{k}-\vec{q}$). Ovakav proces je moguć samo ukoliko je brzina eksitona $v_e = \frac{\hbar k}{m_e}$ veća od brzine zvuka v_s u kristalu, tj. kad je:

$$\frac{\hbar k}{m_e} > v_s.$$

Hamiltonijan (7.8) je sličan hamiltonijanu tečnog He^4 (1.8), pa se za njegovu analizu može primeniti postupak kojeg je dao Bogoljubov u svojoj mikroteoriji (par. 1.2) i koji neće ovde biti ponavljan, već dat samo u njegovoj konačnoj formi: spektar eksitona, u slučaju jake eksiton-fonon interakcije, u uslovima BAK, može se napisati u obliku:

$$(7.13) \quad E(\vec{k}) = [S^2(\vec{k}) - T^2(\vec{k})]^{1/2},$$

gde su:

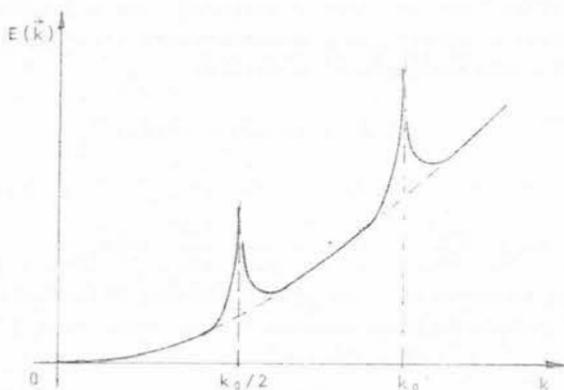
$$(7.14) \quad \begin{aligned} S(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + T(\vec{k}) - \frac{1}{24\pi^2} \frac{m_e \Delta^2}{M\hbar v_s} J(\vec{k}), \\ T(\vec{k}) &= \frac{N_0 m_e^2 \Delta^2}{M\hbar^2} \frac{4}{k^2 - k_0^2}, \\ J(\vec{k}) &= 8k^2 (\ln 4 \frac{k_g^2 - k_0^2}{|k^2 - 4k^2|} - \frac{4}{3}) - 12k_0 k \ln \frac{k_0 + 2k}{|k_0 - 2k|} \\ &- \frac{8}{3}(k_g^2 + \frac{9}{4}k_0^2) \ln \frac{|k_0^2 - 4k^2|}{4} + \frac{k_g^3}{k} \ln \frac{k_g + k}{k_g - 2k} \\ &- \frac{k_0^3}{k} \ln \frac{k_0 + 2k}{|k_0 - 2k|}, \end{aligned}$$

$$k_E = \frac{1}{a}(6\pi^2)^{1/3}$$

je granični talasni vektor prve Brillouinove zone, određjen iz uslova

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}} = N_0$$

N_0 je broj eksitona u kondenzatu (sa nulnim impulsom). Treba napomenuti da su veličine definisane jednačinama (7.13 i 7.14) računane u kontinualnoj aproksimaciji (standardnim prelaskom sa suma na integrale). Analizirajući izraze (7.13. i 7.14), veoma je jednostavno uočiti da se u spektru elementarnih eksitacija, predstavljenom na slici 7.1, javljaju singulariteti u okolini impulsa:



Sl. 7.1: Spektar elementarnih eksitacija ukazuje na formiranje vezanih stanja eksitonskog sistema u prisustvu fonona.

$$\frac{1}{2}k_0 \quad \text{a} \quad k_0 = 2m_e \frac{v}{h},$$

koji ukazuju na to da efektivna eksiton-eksiton interakcija (7.12), pored rasejanja, može da dovede i do formiranja bieksitona [119] ili do sparivanja dva eksitona ([108], str. 357) u tzv. eksitonsku kaplju [22]. Ovaj proces se može očekivati s obzirom na činjenicu da efektivna eksiton-eksiton interakcija može da bude privlačna [63, 120].

7.1. Bieksitoni

Rezultat analize spektra elementarnih ekscitacija u eksitonskom sistemu u prisustvu virtuelne fononske izmene izmedju eksitona, provedene u prethodnom odeljku, pokazuju da se ovde mogu očekivati procesi formiranja vezanih stanja eksitona u obliku bieksitona (dva sparena eksitona, u opštem slučaju, sa različitim impulsima \vec{k}_1 i \vec{k}_2) i posebno, vezanih stanja u obliku BAK eksitona - eksitonske kaplje (dva sparena eksitona sa suprotnim impulsima $\vec{k}_1 = \vec{k}$ i $\vec{k}_2 = -\vec{k}$). Ovde će biti ispitana mogućnost formiranja bieksitona u molekularnim lancima metodom Grinovih funkcija. Slična analiza, za 3d slučaj, i metodom talasnih funkcija [22, 81], je pokazala da do formiranja bieksitonskih stanja ne može da dodje.

Hamiltonijan sistema Frenkelovih eksitona i polja mehaničkih vibracija u prisustvu čiste eksiton-eksiton (bez fonona; videti par. 14.2) i efektivne eksiton-eksiton interakcije (posredstvom virtuelne izmene fonona (videti par. 14.3) biće zapisan u bozonskoj interpretaciji, korišćenjem formule Dajsona-Maljejeva [121, 122], tj. prelaskom sa Pauli na Boze operatore (u 14.9 do 14.11) pomoću:

$$P^+ = B^+, \quad P = B - B^+BB \quad \text{a} \quad P^+P = B^+B.$$

Posle izvršene Furije (prelaz u k -prostor) i Frelihove (unitarne) transformacije, u posmatranom, 1d slučaju, on će imati sledeći oblik:

$$(7.15) \quad H = \sum_k \epsilon_k B_k^\dagger B_k - \frac{1}{N} \sum_{k_1, k_2, k_3} (X_{k_3} - Y_{k_1} - k_3) \times \\ \times B_{k_1}^\dagger B_{k_2}^\dagger B_{k_3} B_{k_1+k_2-k_3} + \sum_{k_1 k_2 k_3} W_{k_1, k_3} B_{k_1}^\dagger B_{k_2}^\dagger B_{k_3} B_{k_1+k_2-k_3},$$

gde drugi član potiče od nelinearnih efekata u sistemu eksitona, a treći je posledica virtuelne razmene fonona između eksitona. Oznake u formuli (7.15) su:

$$(7.16) \quad \epsilon_k = \Delta + X_k, \quad X_k = -2|X|\cos ka, \quad Y_k = -2|Y|\cos ka, \\ W_{k,q} = \frac{|F_{k-q}|^2 M_{k-q}}{(\epsilon_k - \epsilon_q)^2 - M_{k-q}^2}, \quad M_k = \hbar v_s k,$$

$$F_k = \frac{i\Delta}{\sqrt{\hbar}} \left(\frac{\hbar}{2Mv_s k} \right)^{1/2} (\vec{k} \vec{\lambda}_k).$$

(za karakteristične veličine pogledati par. 14.1 do 14.3). Prva dva sabirka u (7.15) potiču od čistog eksitonskog pod-sistema i daju, kao što je to u radu [119] pokazano, energije dva slobodna eksitona i energije bieksitona. Uloga efektivne eksiton-eksiton interakcije nije ispitivana i ovde će biti interesantno da se vidi kako ona utiče na formiranje vezanih eksitonskih stanja. Procenom koeficijenata u drugom i trećem sabirku hamiltonijana (7.15) može se zaključiti da treći član može da bude istog reda veličine kao i drugi (dakle uporediv sa X i Y), ali i za red, u slučaju jake veze (videti par. 14.5), veći od njih. Ova procena, razume se, važi ako se u trećem članu isključi oblast impulsa bliska onoj vrednosti za koju $W_{k,q}$ ima singularitet (videti disku-

siju u par. 7 - ispod formule (7.7) i na kraju tog paragrafa). Neophodno je ovde podvući još jednu činjenicu, koja se odnosi na formu hamiltonijana (7.15). Kao što je u uvodnom delu gl. 2 bilo već rečeno, poznato je (npr. [80, 110, 123]) da je pri visokim koncentracijama eksitona ($c \approx 10^{-5}$ do 10^{-4}) dominantna eksiton-eksiton, a zanemariva eksiton-fonon interakcija, a da je pri niskim koncentracijama ($c \ll 10^{-4}$) situacija potpuno obrnuta. Međutim, hamiltonijan (7.15) sadrži obe ove interakcije jer se zna [119] da eksiton-eksiton interakcija (bez obzira na koncentraciju eksitona) dovodi do stvaranja bieksitona, a uticaj eksiton-fonon interakcije na ova vezana stanja još nije bio ispitivan.

Energije sistema opisanog hamiltonijanom (7.15) mogu se odrediti pomoću Grinove funkcije:

$$(7.17) \quad G_{\mu\nu}(\omega) = \sum_{\lambda} \langle \langle B_{\mu+\nu-\lambda} B_{\lambda} | B_{\mu}^{\dagger} B_{\nu}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega},$$

gde se usrednjavanje vrši po eksitonskom osnovnom stanju. Koristeći standardni metod Grinovih funkcija (videti, npr. [12], str. 72 ili [124], str. 205) i prelazeći u sistem centra masa:

$$\mu + \frac{Q}{2} + k, \quad \nu + \frac{Q}{2} - k,$$

(talasni vektor Q opisuje položaj centra masa dva eksitona, a k njihov relativan položaj u k -prostoru), dobija se sledeća jednačina za Grinovu funkciju:

$$(7.18) \quad G_Q(k, E) = G_Q^{(0)}(k, E) + \frac{1}{N} \frac{\sum_q \Phi_Q(k, q) G_Q(q, E)}{E - 2\Delta + 4|X| \cos \frac{Qa}{2} \cos ka},$$

gde je

$$\Phi_Q(k, q) = W_{\frac{Q}{2}+q, \frac{Q}{2}+k} + W_{\frac{Q}{2}+q, \frac{Q}{2}-k}, \quad E = \hbar \omega,$$

$$\begin{aligned}
 G_Q^{(0)}(k, E) &= \frac{i\hbar}{\pi} \frac{1}{E - 2\Delta + 4|X|\cos\frac{Qa}{2} \cos ka} + \\
 (7.19) \quad &+ \frac{4}{N} \sum_q \frac{(|X|\cos\frac{Qa}{2} - |Y|\cos ka) \cos qa}{E - 2\Delta + 4|X|\cos\frac{Qa}{2} \cos ka} G_Q^{(0)}(q, E).
 \end{aligned}$$

Jednačina (7.19) rešava se prelaskom u kontinuum:

$$\frac{1}{N} \sum_q (\dots) + \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq (\dots),$$

tako da postaje:

$$\begin{aligned}
 G_Q^{(0)}(\xi, E) &= -\frac{i\hbar}{\pi} \frac{1}{4|X|\alpha_Q} \frac{1}{\gamma_Q - \cos \xi} \left\{ 1 - \right. \\
 (7.20) \quad &\left. \frac{(\gamma_Q I_Q - 1)(1 - \frac{|Y|}{|X|\alpha_Q} \cos \xi)}{\gamma_Q \left[\frac{|Y|}{|X|\alpha_Q} + I_Q \left(1 - \frac{|Y|\gamma_Q}{|X|\alpha_Q} \right) \right]} \right\}, \\
 \alpha_Q &= \cos \frac{Qa}{2}, \quad \gamma_Q = \frac{2\Delta - E}{4|X|\alpha_Q}, \quad I_Q = (\gamma_Q^2 - 1)^{-1/2}, \quad \xi = ka.
 \end{aligned}$$

Ako se i u jednačini (7.18) izvrši isti prelaz sa sume na integral dobija se integralna jednačina po $G_Q(k, E)$. Ona se rešava iterativno, tako da je njeno rešenje (u prvoj aproksimaciji) sledećeg oblika:

$$\begin{aligned}
 G_Q^{(1)}(\xi, E) &= G_Q^{(0)}(\xi, E) [1 + \\
 (7.21) \quad &+ \frac{1}{4|X|\alpha_Q} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\eta \frac{\Phi_Q(\xi, \eta)}{\gamma_Q - \cos \xi} \frac{G_Q^{(0)}(\eta, E)}{G_Q^{(0)}(\xi, E)}]^{-1}.
 \end{aligned}$$

Ova funkcija ima tri pola:

$$(7.22) \quad E_{2e} = 2\Delta - 4|X| \cos \frac{Qa}{2} \cos ka,$$

$$(7.23) \quad E_{be} = 2\Delta - 2|Y| - 2 \frac{X^2}{|Y|} \cos^2 \frac{Qa}{2},$$

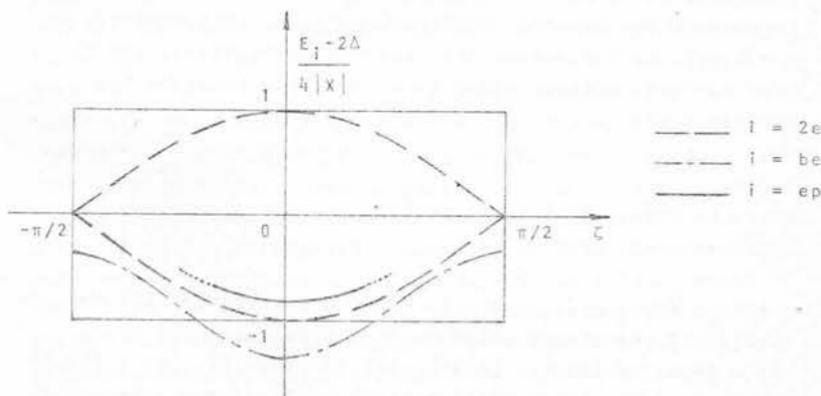
$$E_{ep} = 2\Delta - 4|X|f(Q),$$

$$(7.24) \quad f(Q) = 1 - \frac{A_1^2 Y^2}{32X^4} \left[\left(1 - \frac{Q^2 a^2}{4} \right) \varphi(Q) \right]^{-2}, \quad A_1 = \frac{\hbar^2 \Delta^2}{8MX^2 a^2},$$

$$\varphi(Q) = 1 + \frac{A_1}{|X|} \left[A_2 \left(1 - \frac{Q^2 a^2}{4} \right) - 2 \right]^{-1}, \quad A_2 = 4 + \frac{\hbar^2 v_s^2}{4X^2 a^2}.$$

Izrazi (7.22 i 7.23) predstavljaju poznate izraze [119] za energije dva slobodna eksitona i bieksitona u odsustvu eksiton-fonon interakcije, dok bi izraz (7.24) trebalo da bude energija vezanih stanja eksitona uslovljena eksiton-fonon interakcijom.

Analiza izraza (7.24), koji je grafički predstavljen na slici 7.2, kao da to i potvrđuje. Međutim, iz izraza



Sli. 7.2: Energije E_i vezanih stanja eksiton-skog sistema u zavisnosti od talasnog vektora $\zeta \equiv Qa/2$ koji karakteriše položaj centra masa dva eksitona.

(7.21) se jasno vidi da bi E_{ep} morale, pored od Q , da zavisi i od talasnog vektora k koji karakteriše relativno kretanje dva eksitona. Izraz (7.24) nije nadjen egzaktno, već je, iz uslova postojanja pola u (7.21):

$$(7.25) \quad 1 + \frac{1}{4|X|\alpha_Q} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\eta \frac{\Phi_Q(\xi, \eta)}{Y_Q - \cos \xi} \frac{G_Q^{(0)}(\eta, E)}{G_Q^{(0)}(\xi, E)} = 0,$$

procenjen za slučaj malih talasnih vektora, pa se zbog navedene aproksimacije, ova zavisnost izgubila. Osim toga, dopunski pol E_{ep} pada unutar "oka" - oblasti slobodnog kretanja dva eksitona (sl. 7.2).

Zbog svega toga, energije E_{ep} ne mogu se smatrati energijama bieksitonskih stanja, već samo energijama dvaju slobodnih kvazičestica sa slabim relativnim kretanjem.

Znači, virtuelna izmena fonona u molekularnim lancima dovodi do pojave novih kvazičestica sa relativno slabim kretanjem. Kvalitetnija slika ovog, nema sumnje interesantnog rezultata, dobila bi se upotrebom strožijeg numeričkog proračuna jednačine (7.25). I bez tog proračuna može se zaključiti da je verovatnoća nastanka eksitonskih kaplji (BAK eksitona sa $k = 0$, tj. $k_1 = k$ i $k_2 = -k$) daleko veća no što je verovatnoća nastanka ostalih bieksitonskih stanja eksitona (sa $k_1 \neq k_2 \neq 0$).

7.2. Eksitonske kaplje

Kao što je u par. 7. rečeno, formiranje eksitonskih kaplji, tj. vezivanje eksitona na dubokom lokalnom nivou (koje je analizirano u [108], str. 357 i u [81, 119 i 125 do 127]), je jedan od mogućih efekata eksiton-fonon interakcije. Postoje i čvrsti eksperimentalni dokazi postojanja ovakvih kondenzovanih stanja eksitona [70, 72 i 128]. Kao što se u radu [22] pokazuje, u eksitonskom sistemu sa virtuelnom

fononskom interakcijom, dva eksitona sa suprotnim impulsima vezuju se u "molekul" (s ukupnim $\vec{k} = 0$) i nalaze se u zadatom molekularnom potencijalu dubine približno 2δ . Molekulska stanja postaje metastabilno - molekul se "cepa" emitujući dva nova kvanta. Spektar ekscitacija ovih, novonastalih kvazičestica zadovoljava kriterijum SF. Međutim, u ovom radu fundamentalna jednačina koja definiše gep pomenutih ekscitacija (gep jednačina) u 3d slučaju rešena je aproksimativno. Razmatranje 1d problema, pored svoje interesantnosti, dozvoljava još i egzaktno rešavanje pomenute jednačine, što će kasnije biti i pokazano. Interesantnost 1d struktura (molekularnih lanaca - polimera) se ogleda u sledećem: kao prvo, oni predstavljaju biofizičke objekte (detaljno o tome npr. u [108], str. 127) i, kao drugo, egzaktno rešenje gep-jednačine je od opštijeg interesa jer se slične jednačine pojavljuju i u drugim problemima, kao što su problemi SF transfera magnetnih pobudjenja u feromagnetima (par. 10.2) ili SP kod metala (par. 13).

U par. 7 je pokazano da virtuelna izmena fonona između eksitona dovodi do efektivne eksiton-eksiton interakcije. Hamiltonijan sistema eksitona i fonona sa njihovom jakom interakcijom (videti par. 14.1 do 14.3) je istog oblika kao i izraz (7.1), odnosno, posle izvršene Furije i Frelihove transformacije, te korišćenja Vejlvog identiteta (kao u [22 i 81]) i usrednjavanja po fononskom vakuumu (spontana emisija fonona; detaljnije u [81], par. 2.2 do 2.4) je oblika (7.15). Ako se "ispušte" članovi koji potiču od čiste eksiton-eksiton interakcije (posmatra se mala koncentracija eksitona gde preovladava, prema [20, 80, 98 i 110], kao i prema [129 i 130], jako eksiton-fonon kuplovanje, a efekti eksiton-eksiton repulzije mogu da se zanemare [131] u slučaju eksitonskih kaplji) i izdvoje samo oni članovi koji opisuju formiranje eksitonskih kaplji (samo članovi kojima odgovaraju efektivne interakcije eksitona sa suprotnim impulsima), efektivni hamiltonijan posmatranog molekularnog lanca će imati sledeći oblik:

$$H_{\text{eff}} = \sum_k \epsilon(k) B_k^+ B_k + \frac{1}{N} \sum_{k,q} T(k,q) B_k^+ B_{-k}^+ B_{-q} B_q,$$

$$(7.26) \quad \epsilon(k) = \Delta - 2|X|\cos ak, \quad T(k,q) = -4\lambda \frac{k_0}{a} [k_0^2 - (k-q)^2]^{-1},$$

$$\lambda = \frac{m^2 \Delta^2 a}{2Mh^2 k_0}, \quad k_0 = 2m_e \frac{v_S}{h}.$$

Funkcija $T(k,q)$ izračunata je u aproksimaciji efektivne mase eksitona i analiza ove funkcije (kao u [12], str. 143) pokazuje da je interakcija između eksitona privlačna za male talasne vektore, odnosno, kada je $|\vec{k}-\vec{q}| < k_0$. Postavlja se pitanje globalnog efekta koji daje drugi član u hamiltonijanu (7.26). Za procenu ovog - globalnog efekta, operator-ska forma $B^+ B^+ B B$ zamenjuje se njenom srednjom statističkom vrednošću. Usrednjeno sve to još po k i q daje jednu pozitivnu veličinu: $\langle B^+ B^+ B B \rangle$, koja nema uticaja na procenu uloge interakcionog člana iz (7.26). Zbog toga se može pisati:

$$\frac{1}{N} \sum_{k,q} T(k,q) \sim J = \iint_{-\pi}^{+\pi} \frac{dx dy}{(y-x)^2 - \alpha^2} = -2(1 + \ln \frac{2\pi}{\alpha}),$$

$$\alpha = \frac{\pi}{100}.$$

S obzirom da je $J < 0$ može se zaključiti da je globalni efekat - privlačenje između eksitona koje dovodi do obrazovanja eksitonskih kaplji.

Treba naglasiti da je sistem eksitona u kome su obrazovane kaplje stabilniji od istog sistema bez kaplji, jer obrazovanje kaplji (par eksitona u jami dubine 2Δ na jednom molekulu) smanjuje broj polaznih kvazičestica pa, samim tim, i efekte njihove interakcije koji mogu da destabilizuju sistem. Meta-stabilno je, međutim, stanje molekula koji je zahvatio dva eksitona (pobudjen je!) i on želi da ih se oslobodi. Prema

tome, do raspada kaplji dolazi zbog nestabilnosti stanja molekula koji ih je zahvatio, a ne zbog nestabilnosti eksitonskog podsistema. Ovaj proces je detaljno analiziran u [81], par. 2.4 i u [132 i 133]. Tako dolazi do raspada kaplje u dva nova, fotonima slična kvanta. Njihov energetski spektar, koji može ukazati na postojanje SF u sistemu, može se naći pomoću jednačina kretanja operatora B_k odnosno, B_k^+ :

$$(7.27) \quad i\hbar \dot{B}_k = [B_k, H_{\text{eff}}] = \epsilon(k)B_k + \frac{1}{N} \sum_q [T(k,q) + T(-k,q)] B_{-k}^+ B_{-q} B_q,$$

te pomoću kanoničke transformacije istih ([124], str. 111):

$$(7.28) \quad B_k = u_k C_k + v_{-k}^* C_{-k}^+, \quad |u_k|^2 - |v_k|^2 = 1,$$

pri čemu se sa B i B^+ prelazi na nove Boze operatore C i C^+ . Kombinacijom (7.26) do (7.28), uz zanemarivanje člana $T(k,q)/N$ u odnosu na član

$$\sum_q T(k,q)/N,$$

dobijaju se, u linearnoj aproksimaciji po C , sledeće jednačine za operatore C :

$$(7.29) \quad \begin{aligned} E[u_k C_k(t) - v_{-k}^* C_{-k}^+(t)] &= (\epsilon_k u_k - \phi_k v_k) C_k(t) + \\ &+ (\epsilon_k v_{-k}^* - \phi_k u_{-k}^*) C_{-k}^+(t), \\ E[u_k^* C_k^+(t) - v_{-k} C_{-k}(t)] &= (\epsilon_k u_k^* - \phi_k^* v_k^*) C_k^+(t) + \\ &+ (\epsilon_k v_{-k} - \phi_k^* u_{-k}) C_{-k}(t), \end{aligned}$$

gde je:

$$(7.30) \quad \phi_k = -\frac{1}{N} \sum_q u_{-q} v_{-q}^* [T(k,q) + T(-k,q)],$$

a

$$C_k(t) = C_k(0) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t).$$

Sistem jednačina (7.29) ima rešenja samo ako su ispunjeni sledeći uslovi:

$$(7.31) \quad (\epsilon_k - E)u_k - \phi_k v_k = 0,$$

$$\phi_k^* u_k - (\epsilon_k + E)v_k = 0.$$

Sa svoje strane, ovi uslovi čine homogen sistem algebarskih jednačina koji ima netrivialna rešenja (i osobine simetrije):

$$(7.32) \quad \begin{aligned} |u_k|^2 &= \frac{1}{2}(\epsilon_k/E_k + 1), & |u_{-k}| &= |u_k|, \\ u_k v_k^* &= \phi_k/2E_k, \\ |v_k|^2 &= \frac{1}{2}(\epsilon_k/E_k - 1), & |v_{-k}| &= |v_k|, \\ \phi_k &= |\phi_k| e^{i\varphi(k)}, \end{aligned}$$

($\varphi(k)$ je, za sada, proizvoljna faza) ako je:

$$(7.33) \quad E \equiv E(k) = (\epsilon_k^2 - |\phi_k|^2)^{1/2}.$$

Izraz (7.33) predstavlja traženi zakon disperzije elementarnih ekscitacija dobijenih u procesu dezintegracije eksiton-skih kaplji. Zamenom rešenja (7.32) u jednačinu (7.30) koja definiše funkciju ϕ_k , ona postaje:

$$(7.34) \quad \phi_k + \frac{1}{N} \sum_q \frac{T(k,q)}{E(q)} \phi_q = 0.$$

Procedura nalaženja $E(k)$ (7.33) zajedno sa jednačinom (7.34) koja definiše funkciju ϕ_k izgleda jednostavna, mada ona ima svoju posebnu težinu i značaj. Naime, običan pristup u takvim slučajevima (videti npr. u [12, 54, 86, 87, 90] ili u radu [134]) kada hamiltonijan sadrži samo realne funkcije, upotrebljava manje opštu transformaciju od transformacije (7.28): tamo se uzima da su funkcije u_k i v_k realne, a to ograničava i samu funkciju ϕ_k - i ona mora biti realna. Kao što je ovde pokazano, isti problem se može tretirati i opštije: i kompleksna funkcija ϕ_k (ako su u_k i v_k kompleksne funkcije) vodi do realnih energija elementarnih ekscitacija u sistemu. Ovaj zaključak je veoma bitan za rešavanje jednačine (7.34).

U saglasnosti sa uobičajenom terminologijom za funkciju ϕ_k koristiće se naziv gep (procep, prag) elementarnih ekscitacija mada nije neophodno da bude $\phi_0 \neq 0$. Iz tih razloga se i jednačina (7.34) naziva gep-jednačinom.

Ova se jednačina može rešiti jedino u kontinualnim varijablama te se, standardnim prilazom, sa sume mora preći na integral:

$$\frac{1}{N} \sum_q (\dots) + \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq (\dots) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq (\dots).$$

Pošto je jezgro $T(k,q)$ singularno, glavni doprinosi se mogu očekivati u uskom intervalu oko singulariteta, što čini ovu aproksimaciju opravdanom. U skladu sa ovim, jednačina (7.34) prelazi u integralnu jednačinu:

$$(7.35) \quad \phi(k) + \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq T(k,q)\psi(q) = 0,$$

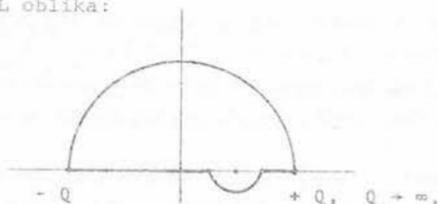
gde su uvedene oznake:

$$\psi(k) = \Phi(k) E^{-1}(k) \quad \text{i} \quad \Phi(k) \equiv \phi_k.$$

Dalja procedura rešavanja jednačine (7.35) zahteva prelaz od realne promenljive q na kompleksnu promenljivu z , pri čemu je $\text{Re } z = q$. Pretpostavljajući analitičnost funkcije $\psi(z)$ u gornjoj poluravni, jednačina (7.35) može da se napiše kao:

$$(7.36) \quad \Phi(k) + \frac{\lambda}{2\pi} \oint_L \psi(z) T(k, z) dz = 0,$$

gde je kontura L oblika:



Da bi se ispitala egzistencija rešenja jednačine (7.36) i njene simetrijske osobine, posmatraće se uprošćen - graničan slučaj: $k_0 = 0$. Za ovaj slučaj, jednačina (7.36) se lako rešava (ubačen je indeks 0, da bi se označilo da se radi sa $k_0 = 0$) i:

$$\begin{aligned} \Phi_0(k) &= - \frac{2\lambda}{\pi} \oint_L \frac{\psi_0(z)}{(z-k)^2} dz = - 2i\lambda \text{Re}z \int_{z=k} \frac{\psi_0(z)}{(z-k)^2} dz \\ &= - 2i\lambda \frac{d}{dk} \{ \Phi_0(k) [\varepsilon^2(k) - |\Phi_0(k)|^2]^{-1/2} \}. \end{aligned}$$

Uzimajući da je:

$$\Phi_0(k) = A(k) e^{ix(k)},$$

gde su A i x realne funkcije, poslednja diferencijalna jed-

načina ima rešenja:

$$A(k) = C\varepsilon(k), \quad \chi(k) = \frac{(1-C^2)^{1/2}}{2\lambda} \int \varepsilon(k) dk,$$

ovde je C realan broj, čija je vrednost između -1 i 1 . Na osnovu ovih rešenja može se zaključiti da je $\phi_0(k)$ zbilja analitička u gornjoj poluravni, da je amplituda $A(k)$ - parna a faza $\chi(k)$ - neparna funkcija. Ovo je veoma bitno jer bi se iz jednačine (7.30) moglo zaključiti da je $\phi(k) = \phi(-k)$, mada ova simetrija, kao što je bilo demonstrirano, važi samo za realne amplitude ove funkcije.

U vezi sa ovim treba naglasiti da simetrijske osobine rešenja ne moraju nužno da slede iz simetrijskih osobina operatora koji figuriše u posmatranoj jednačini. Ovo se jasno može ilustrovati na sledećim prostim primerima. Npr. jednačinu:

$$D_2(x)y(x) = 0, \quad D_2(x) = D_2(-x) = \frac{d^2}{dx^2} + k^2,$$

zadovoljavaju parno (y_1), neparno (y_2) i, konačno, ni parno ni neparno rešenje (y_3):

$$y_1(x) = c_1 \cos kx, \quad y_2(x) = c_2 \sin kx,$$

$$y_3(x) = y_1(x) + y_2(x).$$

Ili, još interesantniji su primeri sa nesimetričnim operatorima:

$$D_1^I(x)y(x) = 0, \quad D_1^I(x) = -D_1^I(-x) = \frac{d}{dx} - x,$$

$$D_1^{II}(x)y(x) = 0, \quad D_1^{II}(x) = -D_1^{II}(-x) = \frac{d}{dx} - \frac{1}{x}.$$

Prva jednačina ima parno rešenje:

$$y_1(x) = c_1 \exp(x^2/2),$$

a druga - neparno:

$$y_{II}(x) = c_{II} x.$$

Sada se može pristupiti rešavanju jednačine (7.36). U tom cilju potrebno je izvršiti razlaganje jezgra $T(k, z)$ na sledeći način:

$$T(k, z) = 2 \frac{\lambda}{a} ([z - (k + k_0)]^{-1} - [z - (k - k_0)]^{-1}).$$

Ovo, uz pretpostavljenu analitičnost funkcije $\phi(z)$ u gornjoj poluravni, vodi do transformacije jednačine (7.36) u diferencnu jednačinu:

$$(7.37) \quad \phi(k) = -i\lambda [\psi(k + k_0) - \psi(k - k_0)].$$

Uvodeći translacioni operator $\hat{\tau}_g$ pomoću relacija:

$$(7.38) \quad \hat{\tau}_g f(k) = f(k+g); \quad \hat{\tau}_g^n = \hat{\tau}_{ng} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

jednačina (7.37) se može napisati u obliku:

$$(7.39) \quad \psi(k) = \frac{i}{\lambda} (\hat{\tau}_{k_0} - \hat{\tau}_{-k_0})^{-1} \phi(k).$$

Operator $(\hat{\tau}_{k_0} - \hat{\tau}_{-k_0})^{-1}$ može da se napiše u dve ekvivalentne forme:

$$(7.40a) \quad (\hat{\tau}_{k_0} - \hat{\tau}_{-k_0})^{-1} = \begin{cases} - \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\tau}_{(2n+1)k_0} \\ \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\tau}_{-(2n+1)k_0} \end{cases}$$

(7.40b)

Označavajući se $S(k) = \phi(k)e^{-1}(k)$ i koristeći (7.38) jednačina (7.39) prelazi u ekvivalentnu joj diferencnu jednačinu:

$$(7.41) \quad -i\lambda \frac{S(k)}{(1-|S(k)|^2)^{1/2}} = (\hat{\tau}_{k_0} - \hat{\tau}_{-k_0})^{-1} e(k) S(k),$$

čije se rešenje može naći u sledećoj formi:

(7.42a)

$$S(k) = S_0(k) e^{ikb_x} \begin{cases} e^{-ak}, & \text{za } k > 0, \\ e^{ak}, & \text{za } k < 0, \end{cases}$$

(7.42b)

gde je b - za sada neodređena pozitivna konstanta, a $S_0(k)$ - realna, periodična (sa periodom k_0) i parna funkcija, tj.

$$S_0(k) = S^*(k) = S_0(-k) = S_0(k + k_0).$$

Jednačina (7.41) rešavana je nezavisno za slučaj $k > 0$ (upotrebom (7.40a) i (7.42a)) i za $k < 0$ (upotrebom (7.40b) i (7.42b)) i, uzimajući u obzir i (7.32), njeno rešenje može da se napiše u zajedničkoj formi:

$$S_0(k) = \left[1 - (\lambda/\Delta)^2 \frac{4}{1-c^2} F^{-2}(k) \right]^{1/2} e^{a|k|},$$

$$c = \tanh ak_0,$$

$$(7.43) \quad F(k) = 1 - \frac{|X|}{\Delta} \frac{(1+c)\cos a(|k| + k_0) - (1-c)\cos a(|k| - k_0)}{1 - (1-c^2)\sin ak_0}$$

$$\varphi(k) \equiv bk = (4v + 3)\frac{\pi}{2} \frac{k}{k_0}, \quad v = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

S obzirom na pomenutu periodičnost, funkcija $S_0(k)$ se može razviti u Furije red (analogan kosinusnom razvoju):

$$(7.44) \quad S_0(k) = \sum_{v=-\infty}^{\infty} A_v e^{i2\pi v(k/k_0)},$$

$$A_v = \frac{2}{k_0} \int_0^{k_0/2} dk |S(k)| e^{(ak_0 - i2\pi v) \frac{k}{k_0}},$$

Konačni izraz za traženu funkciju $S(k)$ dobija se pošto se

izračunaju koeficijenti razvoja A_ν (zamenom (7.34) u drugu jednačinu iz (7.44)). Mora se reći da se A_ν ne računaju sasvim egzaktno jer se kvadratni koren, iz (7.43), uprošćuje (zamenjuje razvojem do drugog člana u binomnoj formuli) na osnovu činjenice da su $\lambda/\Delta (= 5 \cdot 10^{-3})$ i $ak (= 5 \cdot 10^{-3})$ male veličine. Na taj način se dobija:

$$(7.45) \quad |S(k)| = \frac{1}{2} \left[\alpha_0 + 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \alpha_\nu \cos(2\pi \nu \frac{k}{k_0}) \right] e^{-a|k|},$$

$$\alpha_\nu = \frac{4}{ak_0} e^{-ak_0/2} (1 - \lambda^2/\Delta^2)^{\nu} \frac{(-1)^\nu - e^{-ak_0/2}}{1 + (2\pi/ak_0)^2 \nu^2},$$

$$\nu = 0, 1, 2, \dots$$

Ovaj izraz predstavlja konačno i jedinstveno (u celoj oblasti promene k) rešenje gep-jednačine, $|\Phi| = \epsilon|S|$, koje zadovoljava sve pomenute simetrijske uslove.

Sada se mogu odrediti energije elementarnih ekscitacija, jer je, na osnovu (7.33) i smene $\Phi = \epsilon S$:

$$(7.46) \quad E(k) = \epsilon(k) (1 - |S(k)|^2)^{1/2}.$$

Ovaj izraz, uz i zbog (7.45), je veoma komplikovan te se u ovoj formi ne može analizirati. Korišćenjem prosečnih vrednosti karakterističnih veličina sistema (Δ , $|X|$, a , m_e , ...), koje su date u par. 14.1 do 14.3, dolazi se do jednostavnije forme i aproksimativnog izraza za energetski spektar u sledećem vidu:

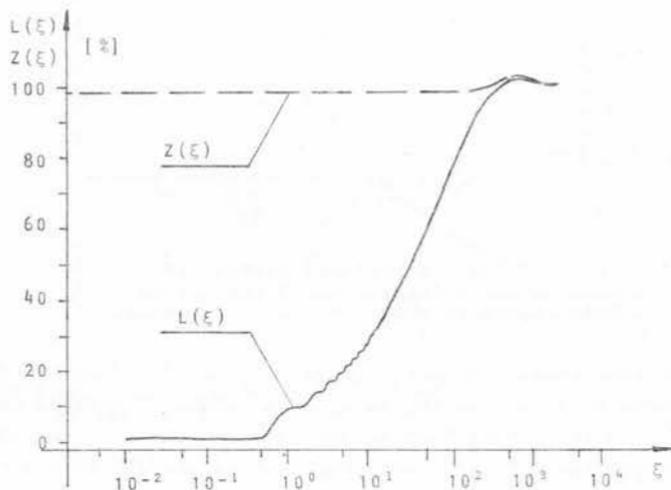
$$(7.47) \quad L(\xi) = Z(\xi) (1 - P^2(\xi))^{1/2},$$

gde su uvedene oznake za bezdimenzione veličine:

$$\xi = \frac{|k|}{k_0}, \quad L(\xi) = E(\xi)/\Delta, \quad Z(\xi) = 1 - 2 \cdot 10^{-2} \cos(5 \cdot 10^{-3} \xi),$$

$$P(\xi) = 1.00119 \left[1 + 801.02362 \sum_{v=1}^{\infty} \frac{(-1)^v - 0.9975}{1 + 1.59914 \cdot 10^6 v^2} \cdot \cos(2\pi v \xi) \right] e^{-5 \cdot 10^{-3} \xi}$$

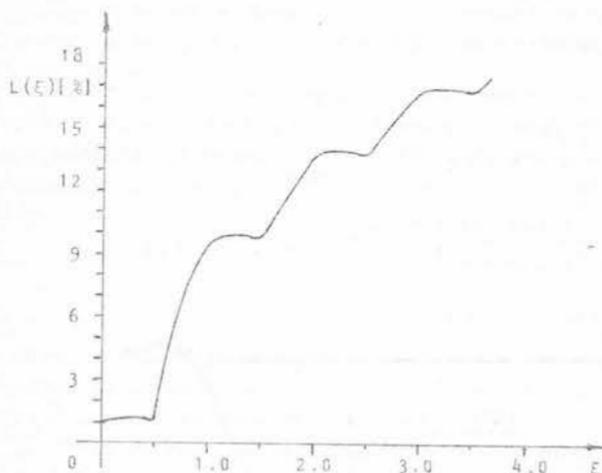
Funkcija $L(\xi)$ numerički je računata na računaru VAX-11/780 (*Digital Equipment Corporation*). U razvoju izraza za $P(\xi)$ suma je računata za prvih dvesto članova što obezbeđuje tačnost 10^{-5} do 10^{-4} . Rezultati ovih proračuna grafički su predstavljeni na sl. 7.3 i 7.4.



Sl. 7.3: Zakon disperzije elementarnih ekscitacija u oblasti impulsa koji pripadaju prvoj Brillouenovoj zoni (u logaritamskoj razmeri).

Kao što se sa ovih slika vidi, spektar elementarnih ekscitacija poseduje mali gep $L(0) = 10^{-2}$ i čitav niz

"prelom". Opšti trend je povećanje energije sa porastom impulsa. Maksimalna vrednost energije teži ka $\Delta(L + 1)$ kada

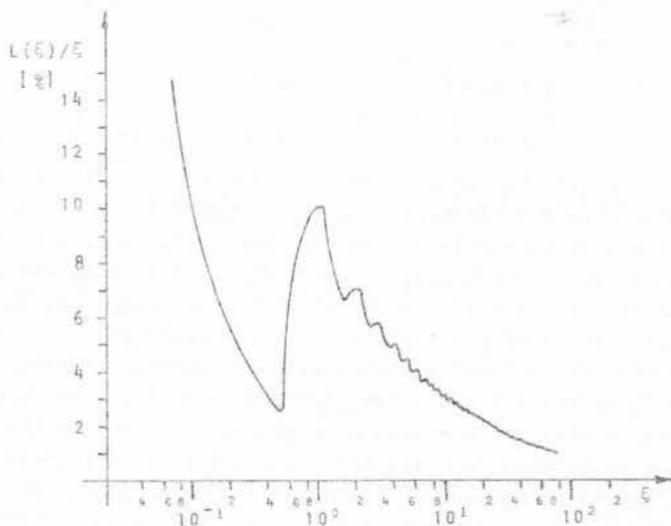


Sl. 7.4: Zakon disperzije elementarnih ekscitacija u oblasti malih impulsa za koje se najpre mogu očekivati SF efekti.

impuls teži granici Brillueneve zone ($\xi \rightarrow 10^3$). Jasnno je da ova pobudjenja nisu ni eksitoni, a ni fononi. U oblasti malih k ona liče na fonone, dok su za velike k najbliži eksitonima. Prisustvo prelomnih tačaka ukazuje na mogućnost postojanja SF osobina sistema. Računanjem funkcije $E(k)/k$, odnosno $L(\xi)/\xi$ (videti kriterijum SF u par. 1.1 i sl. 7.5), konstatuje se da ona ima čitav niz pozitivnih minimuma u okolini tačaka $k_n = (n+1/2)k_0$ (odnosno, $\xi = n + \frac{1}{2}$), gde je prirodan broj $n \in [0, 10^3]$.

Dakle, može se zaključiti (i na osnovu npr. [31], str. 234) da elementarne ekscitacije nastale dezintegracijom eksitonskih kaplji poseduju SF osobine te se u ovom, id

molekularnom sistemu može očekivati SF transfer relevantne fizičke veličine (u smislu diskusije iz par. 3). Ovi rezultati su kompatibilni sa odgovarajućim rezultatima iz radova [22, 50, 66, 127 i 133] gde su SF osobine nadjene u 3d molekularnim strukturama.



Sl. 7.5: Funkcija $L(\xi)/\xi$ zadovoljava kriterijum SF u čitavom intervalu impulsa koji pripadaju prvoj Brilluеноvoj zoni.

Na kraju treba napomenuti da izložena teorija sadrži faktor prigušenja $e^{-a|k|}$ (videti formule (7.42)). Umesto određene - konstante rešetke a može se uvesti proizvoljan parametar λ (kao u par. 13). Iz fizičkih razloga, a sledeći ideju da u optičkom intervalu ($k = 10^7$ do 10^8 m^{-1}) fononi mogu da proizvedu promenu eksitonske energije reda veličine $\Delta \langle u \rangle / a$, gde je $\langle u \rangle$ - srednji fononski pomeraj, možda bi bilo najpogodnije da se ovakav uslov uzme kao kriterijum za

određivanje novog, do tada proizvoljnog, faktora $e^{-\lambda|k|}$.
 Ovakav prilaz, koji bi redukovao širinu energetske zone
 eksitona, (ovde je ona Δ'), zahtevao bi drugačije proračune,
 ograničenja na talasne vektore i nova numerička izračunava-
 nja, te će to biti jedan od predmeta budućih istraživanja
 na ovom polju.

7.3 Solitonski aspekt superfluidnosti optičkih pobudjenja

U par. 6.1 pokazano je da nelinearni efekti (čista
 eksiton-eksiton interakcija) mogu biti uzrok SF transferu
 eksitona u molekularnim kristalima. Postavlja se pitanje da
 li prisustvo fonona narušava ovakvu sliku. Još je Keldiš
 [19] pokazao da za kretanje (u smislu prenosa energije, impul-
 sa i sl.) eksitona Vanije-Mota u poluprovodnicima važe iste
 hidrodinamičke jednačine koje važe i za kretanje klasične SF
 tečnosti ([13], gl. 16; videti, takodje, par. 2).
 Kakav je slučaj kod Frenkelovih eksitona?
 Znajući da odstupanje kvazičestične kinematike od bozonske
 [63], dovodi do neophodnih interakcija koje omogućuju SF
 transfer kvazičestica [64], u radu [50] je pokazano, sledeći
 ideje iz [55] (odnosno, [54], str. 259), kako kinematička
 interakcija eksitona (paulijeovski karakter eksitonskih ope-
 ratora u bozonskoj slici) dovodi do karakteristične jednači-
 ne koja je istog tipa kao i fenomenološka jednačina kretanja
 SF tečnosti (par. 2). Ovde će biti ispitana uloga eksiton-
 fonon interakcije u procesu realizacije SF transfera optič-
 kih pobudjenja u molekularnim lancima.

Kao i u prethodnom paragrafu i ovde će biti posmat-
 ran id slučaj. Hamiltonijan takvog sistema, u aproksimaciji
 najbližih suseda [135 i 136], ima oblik (7.1) sa (u direkt-
 nom prostoru):

$$\begin{aligned}
 H_e &= \Delta \sum_n B_n^+ B_n - |X| \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}), \\
 (7.48) \quad H_p &= \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{M} + Q(u_n - u_{n-1})^2 \right\}, \\
 H_{ep} &= J_\Delta \sum_n (u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n - \\
 &\quad - J_x \sum_n (u_{n+1} - u_n) (B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n),
 \end{aligned}$$

gde su: P - impuls molekula, Q - konstanta sile,

$$J_\Delta = \frac{A}{N} \sum_k k s_{in} k, \quad J_x = \frac{1}{N} \sum_k k X_k s_{in} k,$$

$$X_k = \sum_n X_{on} e^{-ikn}.$$

Sve ostale veličine definisane su u par. 14.1 do 14.3. Jednočestična talasna funkcija posmatranog sistema može da se napiše u obliku:

$$(7.49) \quad |\psi\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^+ |0\rangle, \quad \sum_n |A_n(t)|^2 = 1,$$

pri čemu su $A_n(t)$ - eksitonske amplitude verovatnoće a $|0\rangle$ predstavlja fononski vakuum ("smrznuto" stanje) i koherentna eksitonska stanja [111].

Ako se (7.48) i (7.49) zamene u Šredingerovu jednačinu ([40], gl. 1), dobija se da diskretne amplitude verovatnoće zadovoljavaju sledeću jednačinu:

$$\begin{aligned}
 (7.50) \quad i\hbar \frac{\partial A_n}{\partial t} &= (\Delta - 2|X| + H_p) A_n + |X| (2A_n - A_{n+1} - A_{n-1}) + \\
 &\quad + J_\Delta (u_{n+1} - u_{n-1}) - J_x [(u_{n+1} - u_n) A_{n+1} + \\
 &\quad + (u_{n-1} - u_n) A_{n-1}].
 \end{aligned}$$

Ako se napišu Hajzenbergove jednačine kretanja ([40], gl. 2) za u_n i P_n , pa zatim "usendviče" po fononskim stanjima:

$$(7.51) \quad |\varphi\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t)P_n - \pi_n(t)u_n]\right\} |0\rangle_p,$$

gde su uvedene oznake: $|0\rangle_p$ - za fononski vakuum, $\beta_n(t) \equiv \langle\varphi|u_n|\varphi\rangle$ i $\pi_n(t) \equiv \langle\varphi|P_n|\varphi\rangle$, dobija se jednačina:

$$(7.52) \quad M \ddot{\beta}_n = Q(\beta_{n+1} + \beta_{n-1} + 2\beta_n) + J_\Delta (|A_{n+1}|^2 - |A_{n-1}|^2) - \\ - J_x [A_n(A_{n+1}^* - A_{n-1}^*) + A_n^*(A_{n+1} - A_{n-1})].$$

Rešenja jednačina (7.50) i (7.52) traže se "solitonskom" procedurom (o solitonima detaljnije u npr. [137 do 139]) prelaskom na kontinuum (prethodno se i jednačina (7.50) "usendviči" po fononskim stanjima (7.51)):

$$A_n(t) + A(x,t) \equiv A, \quad \beta_n(t) + \beta(x,t) \equiv \beta,$$

prema "receptu":

$$f_{n\pm 1}(t) + f \pm af' + \frac{1}{2}a^2f'' \pm \dots,$$

nakon čega se dobija sistem od dve diferencijalne jednačine

$$(7.53) \quad i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} = (\hbar\Omega + E_p)A - a^2|X|\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + 2a(J_\Delta - J_x)A\frac{\partial \beta}{\partial x}, \\ \frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2} = v_0^2 \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \frac{2a}{M}(J_\Delta - J_x) \frac{\partial}{\partial x} |A|^2.$$

Ovde su uvedene oznake: $v_0^2 = Qa^2/M$ (kvadrat brzine zvuka), $\Delta = 2|X| = \hbar\Omega$ i $E_p = \langle\varphi|H_p|\varphi\rangle$. Uvodeći smenu funkcije:

$$(7.54) \quad \rho \equiv \beta(x - vt) = -\frac{\partial \beta}{\partial x},$$

i diferencirajući donju jednačinu iz (7.53) po x , dobija se diferencijalna jednačina po ρ :

$$(7.55) \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{2a(J_{\Delta} - J_X)}{M(v_0^2 - v^2)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} |A|^2,$$

čije je, lako je uočiti, jedno rešenje:

$$(7.56) \quad \rho = \frac{2a(J_{\Delta} - J_X)}{M(v_0^2 - v^2)} |A|^2.$$

Pri tome $v = 2a^2 |X|k/\hbar$ predstavlja brzinu ekscitacija u posmatranom sistemu.

I konačno, ako se (7.56) uvrsti u gornju jednačinu iz (7.53), dobija se:

$$(7.57) \quad i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - (\hbar\Omega + E_p)A + a^2 |X| \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \frac{4a^2 (J_{\Delta} - J_X)^2}{M(v^2 - v_0^2)} |A|^2 A = 0.$$

Ova jednačina je istog oblika kao i jednačina (2.12), koja je karakteristična jednačina za SF kretanje tečnosti, ali samo pod uslovom da je brzina ekscitacija v veća od brzine v_0 zvuka u sistemu. Treba odmah primetiti da je ovaj uslov ($v > v_0$) konzistentan uslovu iz [22] ili uslovu $\hbar k/m_e > v_0$ iz par. 7, (ispod jednačine (7.12)), gde se pokazuje da je spontana emisija fonona od strane eksitona moguća samo ako je brzina ekscitacija veća od brzine zvuka u kristalu.

Kao što je poznato (npr. [139, 140]) ukoliko je slučaj obrnut, tj. $v < v_0$, ekscitacije dobijene ovakvim prilazom nazivaju se solitonima.

Na osnovu ovde provedene analize može se zaključiti da se, pod gore navedenim uslovom, u sistemu eksitona i polja mehaničkih vibracija može očekivati kreacija takvih pobudjenja koja će imati SF karakter. Ova pobudjenja su eksitoni sa "šiftovanim" spektrom - usled interakcije sa fononima. Lako je pokazati da jednačinu (7.57) zadovoljava "ravan talas" oblika:

$$(7.58) \quad A(x,t) = A_0 e^{ikx - i\omega t};$$

$$A_0 = 1/\sqrt{N},$$

što za energiju elementarnih pobudjenja daje:

$$E(k) = \Delta - 2|X| + E_p + a^2|X|k^2 + C_0/(k^2 - k_S^2), \quad (7.59)$$

$$C_0 = \frac{\hbar^2(J_\Delta - J_X)^2}{MN a^2 X^2}, \quad k_S = \frac{1}{2} \frac{\hbar v_0}{a^2 |X|} = k_0/2.$$

Ispitivanjem funkcije $E(k)/|k|$, odnosno $E(\eta)/\eta$ ($\eta \equiv |k|/k_S$):

$$\frac{E(\eta)}{\eta} = \frac{E}{\eta} + B\eta + C/(\eta^2 - 1), \quad (7.60)$$

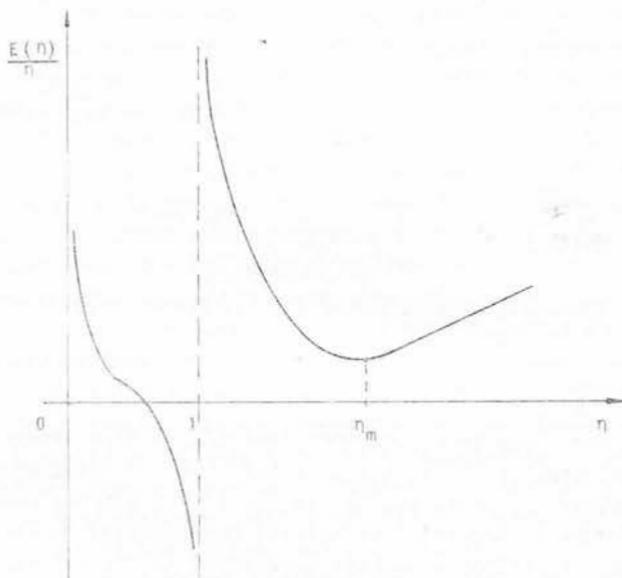
$$E_0 = \Delta - 2|X| + E_p, \quad B = a^2|X|k_S^2, \quad C = C_0/k_S^2,$$

koja je grafički predstavljena na slici 7.6, može se uočiti postojanje jednog pozitivnog minimuma u oblasti $\eta > 1$, što odgovara uslovu $|k| > k_S$, a što je, sa svoje strane, analogno uslovu $v > v_0$ i pada u oblast relativno malih impulsa $k_{\min} = 1/30 k_{gr}$ (k_{gr} - granični talasni vektor prve Brillouenove zone).

Ovo znači da optičke ekscitacije ("šiftovani" eksitoni) sa brzinom većom od brzine zvuka zadovoljavaju, pored makroteorijskog - jednačina (7.67), i mikroteorijski kriterijum SF (iz par. 1.1).

*

Na osnovu svega, u gl. 2 analiziranog i izloženog, može se, bez dileme i ograničenja, zaključiti da se u molekularnim kristalima može očekivati SF transfer optičkih pobudjenja, odnosno da molekularni kristali poseduju SF osobine. Ostaje još pitanje "drifta", odnosno pitanje načina usmeravanja kretanja ovih pobudjenja kako bi se ovaj efekat mogao u praksi i korisno upotrebiti. Odgovor na ovo pitanje ima multidisciplinarni-tehničko-fizički karakter i zahteva nova, u svakom slučaju, eksperimentalna istraživanja.



Sl. 7.6: Ispitivanje zakona disperzije "šiftovanih" eksitona na kriterijum SF: funkcija $E(\eta)/\eta$ ima u oblasti $\eta > 1$ pozitivan minimum u tački $\eta_m = 62$.

GLAVA 3:

MOGUĆNOST SUPERFLUIDNOSTI U FEROMAGNETICIMA

Ova glava teze biće posvećena ispitivanju mehanizama koji bi mogli biti uzrok pojave BAK i SF u feromagnetnim materijalima. Kao model pogodan za opisivanje ovakvog ponašanja sistema u literaturi se koristi Hajzenbergov feromagnetik (HF). Ispitivanja će biti ograničena na sisteme sa spinom (spinskim kvantnim brojem) $S = 1/2$ (HF $1/2$). Od pomenutih mehanizama svakako su uočljiva dva osnovna: prvi, čista spin-spin interakcija i efektivna spin-spin interakcija (videti par. 14.4 i 14.5).

Ovde sprovedena istraživanja, s obzirom na diskusiju u par. 3, moraju da obuhvate:

1) Izračunavanje vremena relaksacije spinskih talasa na čvorovima feromagnetne rešetke (odnosno vremena uspostavljanja termodinamičke ravnoteže sa fononima) i upoređivanje ovog vremena sa vremenom života feromagnetnih pobudjenja. Ovo je, zapravo, ispitivanje mogućnosti formiranja BAK spinskih talasa a dato je u par. 8.

2) Analizu koherentnih magnonskih stanja, odnosno formiranje jednačina kretanja operatora koji karakterišu kolektivizaciju magnona (par. 9). Ovde se ispituje uloga nelinearnih spinskih efekata u procesu SF transfera pobudjenja kroz kristal.

3) Odredjivanje uloge spin-fonon interakcije u procesu vezivanja magnona u bimagnone, odnosno magnonske kaplje. Usled toga što se kaplje raspadaju - cepaju u dve nove ekscitacije, potrebno je ispitati da li njihov zakon disperzije zadovoljava kriterijum SF (izložen u par. 1.1, odnosno 1.3). Isto tako, efektivna spin-spin interakcija može da izazove stvaranje novih pobudjenja u feromagnetnom sistemu koja mogu biti solitoni ali (pod određenim uslovima) i ekscitacije sa SF osobinama. Sve ove analize obuhvaćene su u par. 10 sa tri podparagrafa.

Provedene analize (par. 8,9 i 10) pokazuju odsustvo SF osobina feromagnetnog sistema u odsustvu magnetnog polja. Ako se HF $1/2$ postavi u jako (čak enormno jako) magnetno polje do SF efekta mogu da dovedu oba ukazana mehanizma: i čista i efektivna spin-spin interakcija, odnosno, i nelinearni magnonski efekti i virtuelni fononski procesi. No u tom slučaju ostaje otvoreno pitanje kako bi se uopšte mogli pobudjivati ovako (jakim poljem) ukrućeni spinovi, kako bi mogao da nastane spinski talas. Energije pobudjivanja ovih spinova daleko prevazilaze energije toplotnih kvantata te se jedino može pretpostaviti da bi se pobudjivanje moglo izvesti pomoću laserskog pumpanja (videti diskusiju u par. 9 i 10).

8. VREME RELAKSACIJE MAGNONA

Hamiltonijan HF $1/2$ sličan je ekscitonskim hamiltonijanima po kinematičkom operatoru koji u njemu figurišu ([141], videti i par. 14.2 i 14.4). Pošto je u par. 6 konstatovano da kinematička interakcija Frenkelovih eksitona (nelinearni efekti) može da bude razlog njihove BAK i, s tim u posledičnoj vezi, njihovog SF transfera kroz kristal [50], prirodno je da se ispita šta se zbiva sa spinskim talasima u istim uslovima. Hamiltonijan posmatranog spinskog sistema dat je u par. 14.4 formulom (14.22). U aproksimativnoj zameni Pauli operatora Boze operatorima, prema (14.13):

$$P = B, P^{\dagger}P = B^{\dagger}B - B^{\dagger 2}B^2,$$

ovaj hamiltonijan je potpuno istog tipa kao i eksitonski hamiltonijan (6.1), tj. može se napisati u obliku:

$$(8.1) \quad H = (\mu H + I) \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n} \rightarrow \vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}} - \\ - (\mu H + I) \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger 2} B_{\vec{n}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n} \rightarrow \vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{n}} B_{\vec{m}}^{\dagger} B_{\vec{m}}.$$

Da bi se mogla koristiti potpuna analogija između magnonskog i eksitonskog sistema, mora se videti da li treći sabirak u (8.1) može da bude tretiran metodama teorije rasejanja (rasejanje na δ - potencijalu, kako je to učinjeno u par. 5 i 6). Kako je energija izolovanog molekula (Δ) oko 100 puta veća od konstante dipol-dipolne interakcije (X) eksitona, to bi ovde trebalo da bude:

$$(8.2) \quad \mu H + I \gg 10^2 I \rightarrow \mu H \gg I.$$

U tom slučaju, poslednji sabirak u (8.1) bi mogao da se zanemari i izraz (8.1) bi bio potpuno isti kao i izraz (6.1). Sve što je važno za eksitone moglo bi jednostavno da se "preslika" na magnone. Međutim, ovaj uslov, koji bi dozvolio potpunu analogiju između (posmatranih) eksitonskog i magnonskog sistema, u praksi se, bar za sada, veoma teško ostvaruje. Naime, za njegovu realizaciju bila bi potrebna izuzetno jaka magnetna polja, reda 10^3 do 10^4 T [26]. Nadalje, ukoliko bi se i ostvarila ovako intenzivna polja, postavlja se pitanje kako bi uopšte nastao spinski talas, tj. kako bi se spinovi pobudjivali. Svakako bi za tako nešto bili nedovoljni toplotni kvanti jer je energija, potrebna za pobudjivanje, reda 10^{-19} J, a to je bar za red veličine veće od debajevske energije. Stoga bi pobudjivanje spinova moralo da se postigne nekim drugim izvorom, npr. "pumpanjem" laserskom

svetlošću, ili nešto slično.

Iako je uslov (8.2) veoma teško ostvarljiv, ne znači da on neće biti ostvarljiv, te je zanimljivo ispitati kako se ponaša magnonski sistem u ovim uslovima.

Kao prvo, može se proceniti vreme relaksacije ovog "ukrućenog" magnonskog sistema sa kristalnom rešetkom proste kubne feromagnetne strukture (vreme uspostavljanja termodinamičke ravnoteže spinova sa fononima). S obzirom na napred podvučenu analogiju sa eksitonskim sistemom ($\mu^H \leftrightarrow \Delta$; $|X| \leftrightarrow I$) ovaj proračun je ekvivalentan proračunu provedenom u par. 5. Zato će ovde biti dat samo konačan rezultat:

$$(8.3) \quad \tau_R^m = 10^{-12} \text{ s.}$$

Kako je ovo vreme dosta kraće od vremena života magnona, $\tau_R^m \ll \tau_L^m$ (vreme života $\tau_L^m = 10^{-8}$, prema podacima iz [25 i 142]), osnovni uslov za mogućnost obrazovanja BAK kvazičestica ([62], dat u par. 3) je ispunjen, te se može očekivati da u sistemu spinskih talasa u jakim magnetnim poljima dođe do BAK i, naravno, do svih njenih posledica.

Da do ovakve pojave dolazi eksperimentalno su pokazali autori rada [25], ali su kasnije [143] izrazili sumnju u tumačenje svojih rezultata.

U slučaju kada uslov (8.2) nije ispunjen, odnosno, kada sistem magnona nije "ukrućen" jakim magnetnim poljima (ona odsustvuju, ili su istog reda veličine kao i integral izmene I za najbliže susede), vreme relaksacije će biti znatno duže:

$$(8.4) \quad \tau_R^m = 10^{-7} \text{ s.}$$

kriterijum $\tau_L > \tau_R$ neće biti ispunjen, pa se ne može očekivati formiranje BAK kao ni posledica koje on izaziva.

9. KOHERENTNA STANJA SPINSKIH TALASA

Analiza vremena relaksacije spinskog sistema počiva na činjenici da je u sistemu zanemarljiva spin-fonon interakcija te se posmatra samo direktno rasejanje spinova na čvorovima rešetke ([40], str. 459). Ovakva slika je moguća samo u veoma jakim spoljašnjim magnetnim poljima. Ukoliko je, dakle, ispunjen uslov (8.2), može se izvršiti prelaz:

$$(9.1) \quad -\mu H \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger 2} B_{\vec{n}}^2 + \frac{2\pi\hbar^2}{m_m a^2} \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger 2} B_{\vec{n}}^2,$$

u spinskom hamiltonijanu (8.1), kao što je učinjeno za eksitonski hamiltonijan u par. 6.1. To znači da se, prelaskom na koherentna stanja spinskih talasa ($\Phi = \langle B \rangle$, $\Phi^* = \langle B^\dagger \rangle$), može formirati jednačina:

$$(9.2) \quad i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \mu H \Phi + 2a^2 IV^2 \Phi - \frac{2\pi\hbar^2}{m_m a^2} |\Phi|^2 \Phi = 0,$$

na potpuno isti način kao što je formirana jednačina (6.4) u slučaju molekularnog kristala.

Jednačina (9.2) je istog tipa kao i fenomenološka jednačina (2.12) koja opisuje kretanje klasičnog superfluida. Stoga se može zaključiti da se u feromagnetnom kristalu koji se nalazi u enormno jakom magnetnom polju može očekivati SF transfer pobudjenja kao posledica formiranja BAK. S obzirom da se u praksi ovakva polja praktično ne mogu ostvariti, može se reći da magnon-magnon interakcija (nelinearni spinski efekti) praktično ne može da izazove SF efekte u sistemu.

10. MAGNON-FONON INTERAKCIJA I SUPERFLUIDNOST

Kao što to analize, provedene u prethodna dva paragrafa, pokazuju, nelinearni magnonski efekti koji potiču od čiste spin-spin interakcije i od čistog rasejanja spinova na čvorovima rešetke, ne mogu da budu uzrok BAK feromagnetnih magnona ako se feromagnetik ne nalazi u enormno jakim spoljašnjim magnetnim poljima. No, pored ovog mehanizma, kao i kod eksitona, postoji još jedan koji bi mogao da "izazove" SF efekte u spinskim sistemima. To je efektivna spin-spin interakcija, koja nastaje kada dva spinska talasa interaguju izmenjujući virtuelni fonon. Fizička situacija je slična onoj koja se ima kod eksitona, odnosno kod elektrona (videti par. 7 i 13). Zato je potrebno videti da li ovaj mehanizam ovde, kao kod eksitona, može da stvori neophodne uslove za nastanak takvih ekscitacija u sistemu, koje bi imale SF karakter.

Kao prvo, potrebno je ispitati kako efektivna spin-spin interakcija utiče na vezana stanja magnonskog sistema (par. 10.1) i, da li može da dovede do formiranja magnonskih kaplji. U par. 10.2 se pokazuje da u ld HF $1/2$ postoje svi uslovi za nastanak ovog "kondenzovanog" stanja (dva spinska talasa suprotnih impulsa obrazuju magnonsku kaplju). Raspadom ove kaplje, nastaju nova pobudjenja koja zadovoljavaju kriterijum SF, ali opet samo u slučaju kada se sistem nalazi u vrlo intenzivnim, praktično neostvarljivim, spoljašnjim magnetnim poljima. Čak i ako bi se ostvarila ovakva magnetna polja, pitanje načina pobudjivanja "ukrućenih" spinova ostaje ne baš u potpunosti rešeno (moguće je npr. optičkim "pumpanjem" - laserskom svetlošću velike energije, kao što je to već napred objašnjeno).

Na kraju, efektivna spin-spin interakcija može da izazove stvaranje novih pobudjenja u sistemu koja su, u slučaju kada im je brzina manja od brzine zvuka u feromagnetiku, magnetni solitoni, a u obrnutom slučaju, kada im je brzina veća od brzine zvuka, ona mogu da izazovu SF efekte (videti par. 10.3) pod određenim uslovima.

10.1. Vezana stanja spinskih talasa

Vezana stanja spinskih talasa - bimagnone, prvi je ozbiljno ispitivao Dajson u svojim radovima [121] o niskotemperaturnskoj termodinamici HF. Vezano stanje dva spinska talasa on je opisao kao talas pobudjenja koji nastaje simultanim "prevrtanjem" spinova na paru atoma rešetke (ova predstava je danas prihvaćena kao definicija vezanih stanja sistema). U svojim analizama pokazao je da u 3d HF ovakva pobudjenja egzistiraju samo za one vrednosti talasnih vektora (koji opisuju položaj centra masa dva magnona) koji su u neposrednoj okolini kraja Brillueneve zone i, na osnovu toga, došao do zaključka da vezana stanja ne mogu bitno da utiču na niskotemperaturnsko ponašanje magnetizacije (detaljnije o tome i uopšte o magnonskim sistemima može se naći npr. u [124 i 144 do 146]; videti i par. 14.4 i 14.5). Detaljnu analizu problema vezanih stanja dva sparena spinska talasa dao je Vortis [147] ispitujući talasnu funkciju ovih stanja koja se, na osnovu gore izložene Dajsonove predstave, može zapisati u obliku:

$$(10.1) \quad |2\rangle = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} A_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^+ S_{\vec{m}}^- |0\rangle,$$

gde je sa $|0\rangle$ obeleženo vakuumsko stanje posmatranog feromagnetnog sistema a sa $S_{\vec{n}}^+$ operator kreacije magnona na čvoru \vec{n} . Ne ulazeći u detalje Vortisovih analiza (mogu se naći u citiranim radovima i monografijama) ovde će biti prezenti-

rani samo njegovi najbitniji rezultati:

1) Za slučaj spina $S = 1/2$ i 1d feromagnetne rešetke, nadjen je izraz za energiju bimagnona:

$$(10.2) \quad E_{bm} = 2\mu H + I \sin^2 \frac{Qa}{2}$$

Sve veličine koje ovde figurišu definisane su u prethodnim paragrafima i u par. 14.4, osim veličine Q : to je talasni vektor koji karakteriše kretanje centra masa dva vezana spinska talasa. Kao što se vidi, u 1d strukturama vezana stanja postoje za sve vrednosti talasnog vektora Q . U slučaju spina $S > 1/2$ analitički izraz za energiju bimagnona nije dobijen, ali je relativno prostim procenama pokazano da i ova stanja postoje za sve vrednosti talasnog vektora Q .

2) Analiza egzistencije vezanih stanja u 2d i 3d strukturama je pokazala da u 2d sistemima postoji bar jedno vezano stanje u celoj oblasti impulsa iz Brillouinove zone. Što se 3d struktura tiče, Vortisovi radovi potvrđuju Dajsonove zaključke: vezana stanja egzistiraju samo u uskoj oblasti (u [144], na str. 195 i 196 date su te oblasti eksplicitno, i u zavisnosti od veličine spina) talasnog vektora koja je bliska kraju Brillouinove zone. Takodje je pokazano da je ova oblast šira ukoliko je spin manji. To znači da je za veoma velike spinove obrazovanje vezanih spinskih stanja nemoguće.

U radu [146] vrlo detaljno su analizirane talasne funkcije i energije vezanih magnonskih stanja za slučaj spina $S = 1/2$ u 1d strukturama. Ovde su "testirane" različite bozonske reprezentacije spinskih operatora, a pokazano je da egzaktna bozonska reprezentacija, odnosno reprezentacija Agranovič - Tošića [63], kao i Dajson-Maljejeva [121, 122], daju ispravan rezultat za energije bimagnona. Medjutim, korektan rezultat za talasne funkcije ovih stanja daje jedino egzaktna reprezentacija: pokazano je da vezano stanje dva pobudjenja na istom čvoru (ova situacija je, prema napred navedenoj

Dajsonovoj predstavi, besmislena) ne postoji (njihova energija je jednaka nuli), a da energijama (10.2) odgovara talasna funkcija (10.1) sa koeficijentima A_{nm} , pri čemu je $n \neq m$.

U svim pomenutim analizama vezanih stanja spinskih talasa ispitivan je uticaj (i pokazao se kao uzrok njihovog nastanka) čiste spin-spin interakcije. Uloga virtuelne razmene fonona izmedju magnona, odnosno, uticaj spin-fonon interakcije (koja dovodi do efektivne spin-spin interakcije) na obrazovanje bimagnona do sada nije ispitivano. Ova će analiza biti ovde sprovedena i to u punoj metodološkoj analogiji sa odgovarajućom analizom iz par. 7.1 za eksitone, odnosno, bieksitone. Drugim rečima, ispitivaće se 1d HF 1/2 (videti par. 14.4) u kome će spinski operatori biti predstavljeni preko Boze operatora u reprezentaciji Dajsona-Maljejeva [121, 122]. Ovako dobijenom hamiltonijanu spinskog pod-sistema "dodaje se" interakcioni hamiltonijan (videti par. 14.5) spinskog i fononskog pod-sistema u prisustvu virtuelne fononske izmene.

Na osnovu ovoga, može se ukupni hamiltonijan ispitivanog sistema napisati u sledećem obliku:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k \epsilon_k B_k^+ B_k + \frac{1}{2N} \sum_{k_1 k_2 k_3} (I_{k_1} - I_{k_1 - k_3} + \\
 (10.3) & + 2NW_{k_1 k_3}) B_{k_1}^+ B_{k_2}^+ B_{k_3} B_{k_1 + k_2 - k_3},
 \end{aligned}$$

gde su

$$\begin{aligned}
 \epsilon_k = & \Delta - \frac{1}{2} I_k, \quad \Delta = uH + \frac{1}{2} I_0, \quad I_k = 2I \cos ak, \\
 (10.4) & W_{k,q} = \frac{|F_{k-q}|^2 M_{k-q}}{(\epsilon_k - \epsilon_q)^2 - M_{k-q}}, \quad M_k = \hbar v k, \quad F_k = i \frac{\Delta}{\sqrt{N}} \left(\frac{\hbar}{2Mv^2 k} \right)^{1/2} (\vec{k} \vec{l}_k).
 \end{aligned}$$

Kao i u par. 7.1, energije "dvočestičnih" ekscitacija biće određene iz polova Grinove funkcije:

$$(10.5) \quad G_{fg}(\omega) = \sum_s \langle\langle B_{f+g-s} B_s | B_f^+ B_g^+ \rangle\rangle_\omega$$

Pošto je računaska procedura praktično ista kao i u bieksionskom slučaju (par. 7.1), detalje računa, kao i korišćene aproksimacije ovde nije potrebno detaljno izlagati. Stoga će biti dati samo finalni rezultati.

Grinova funkcija (10.5) ima tri pola, i to:

$$(10.6) \quad E_{2m} = 2\Delta - 2I \cos \frac{Qa}{2} \cos ka,$$

koji odgovara energiji dva slobodna magnona; zatim E_{bm} , koji odgovara energiji bimagnona i koji je dat formulom (10.2), te konačno:

$$(10.7) \quad E_{mp} = 2\Delta - 2I f(Q),$$

gde su:

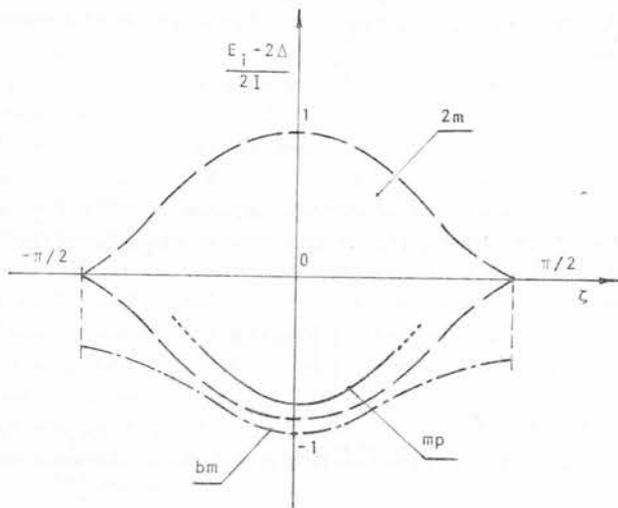
$$(10.8) \quad f(Q) = 1 - \frac{A_1^2}{8} \left[\left(1 - \frac{Q^2 a^2}{4} \right) \varphi(Q) \right]^{-2}, \quad A_1 = \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2MI^3 a^2},$$

$$\varphi(Q) = 1 + 2A_1 \left[A_2 \left(1 - \frac{Q^2 a^2}{4} \right) - 2 \right]^{-1}, \quad A_2 = 4 + \frac{\hbar^2 v^2}{I a^2}.$$

Ovde je k - talasni vektor koji karakteriše relativan položaj dva magnona.

Treba naglasiti da se pol E_{mp} pojavljuje usled obračunate magnon-fonon interakcije. Ovaj dopunski pol se ne može tretirati kao energija vezanog stanja dva magnona (iako bi to formalno sledilo iz (10.7) i sa sl. 10.1) i to iz dva razloga. Prvo, on leži u zoni energija slobodnih magnona (šrafirana oblast na slici), a vezano stanje, kao što je poznato, mora imati nižu energiju od sume energija dva slobodna magnona. Drugi razlog je još bitniji: zbog učinjenih aproksimacija (mali talasni vektori; videti diskusiju u par.

7.1) u izrazu E_{mp} (10.7) izgubljena je zavisnost od talasnog vektora k . U strožijem, na žalost samo numeričkom, računu ona bi morala da postoji.



Sl. 10.1: Energije vezanih magnonskih stanja u zavisnosti od redukovanog talasnog vektora $\zeta \equiv Qa/2$; dva slobodna magnona ($2m$), bimagnona (bm) i dopunskih pobudjenja (mp)

Zbog toga se može reći da virtuelna razmena fonona ne uzrokuje pojavu novog vezanog stanja, već izaziva nastanak dopunskih elementarnih pobudjenja koja su slobodne eksitacije, ali sa slabim relativnim kretanjem u odnosu na relativno kretanje dva slobodna spinska talasa.

10.2. Obrazovanje magnonskih kaplji i posledice

Novi metod rešavanja gep-jednačine, koji je izložen u par. 7.2 i primenjen na eksitonski slučaj, može se, zbog napred navedene sličnosti u opisivanju eksitonskog i spinskog sistema, primeniti i na id HF 1/2 u prisustvu virtuelnih fononskih procesa. I fizička slika je ovde slična kao i kod eksitona: virtuelna izmena fonona dovodi do efektivne interakcije spinskih talasa. Jedna od mogućih posledica ove interakcije (videti u prethodnom paragrafu) je stvaranje magnonskih kaplji (one nastaju kao rezultat sudara i "spajanja" dva spinska talasa sa suprotnim impulsima). Ovakvo nastala kaplja se raspada na dve nove (u poredjenju sa polaznim) elementarne ekscitacije. Njihov energetski spektar može pokazati da li se javljaju SF osobine u sistemu, te će ovde biti predmet ispitivanja.

Hamiltonijan posmatranog feromagnetnog lanca u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja:

$$(10.9) \quad H = H_S + H_P + H_{SP},$$

gde su:

$$H_S = \sum_k \epsilon_k B_k^+ B_k, \quad \epsilon_k = I(1 - \cos ak),$$

$$(10.10) \quad H_P = \sum_k M_k b_k^+ b_k, \quad M_k = \hbar v_s k,$$

$$H_{SP} = \sum_{k,q} F_q B_{k-q}^+ (b_{-q} + b_q^+), \quad F_q = i \frac{I}{\sqrt{N}} \left(\frac{2\hbar q}{Mv_s} \right)^{1/2},$$

hamiltonijani spinskog i fononskog podsistema i interakcije

ova dva podsistema, respektivno (videti par. 14.1, 14.4, 14.5), posle izvršene Frelihove transformacije [115], usrednjavanja po fononskom vakuumu (posmatra se samo spontana emisija fonona) i izdvajanja samo onog dela koji opisuje sparivanje magnona sa suprotnim impulsima, ima sledeći oblik:

$$H_{\text{eff}} = \sum_k \epsilon_k B_k^\dagger B_k + \frac{1}{N} \sum_{k,q} T_{kq} B_k^\dagger B_{-k} B_{-q} B_q, \quad (10.11)$$

$$T_{kq} = - \frac{8m_m^2 I^2}{M\hbar^2} \frac{1}{k_0^2 - (k-q)^2}, \quad k_0 = 2m_m \frac{v_s}{\hbar},$$

gde je

$$m_m = \frac{\hbar^2}{Ia^2} \approx 10^{-29} \text{ kg},$$

efektivna masa magnona.

Treba napomenuti da su sve opisane transformacije i aproksimacije identične onima koje su detaljno izložene u par. 7, te su ovde izbegnuti detalji tih računa. Isto tako važno je podvući da ovde nije uzeta u obzir čista spin-spin interakcija, koja, zajedno sa (10.9), čini hamiltonijan koji se koristi za opisivanje kako vezanih stanja tako i termodinamičkih osobina feromagnetnog sistema [144 do 146]. Striktno govoreći, čista spin-spin interakcija utiče i na osobine magnonskih kaplji. Prema Dajsonu [121] interakcija između spinskih talasa, koja sadrži odbojni kinematički i privlačni dinamički član, s obzirom na njihove suprotne znake, može značajno da promeni stanje sistema (u odnosu na stanje bez interakcije). Ovi efekti neće biti razmatrani, oni su predmet neke sasvim drugačije analize; ovde se pažnja usredsređuje na raspad magnonskih kaplji i na uticaj tog procesa na ponašanje sistema.

Hamiltonijan (10.11) je istog tipa i oblika kao i

hamiltonijan (7.26) ekscitonskog sistema iz par. 7.2 u kojem se ispituju osobine ovog sistema nastale posle raspada ekscitonskih kaplji. Sledeći potpuno isti postupak formiranja i rešavanja gep-jednačine (detalji će zbog toga biti preskočeni), odnosno jednačine koja definiše gep elementarnih ekscitacija, konačno se dobija izraz za traženi spektar elementarnih ekscitacija:

$$(10.12) \quad E(k) = \bar{\epsilon}_k (1 - |S(k)|^2)^{1/2},$$

gde je

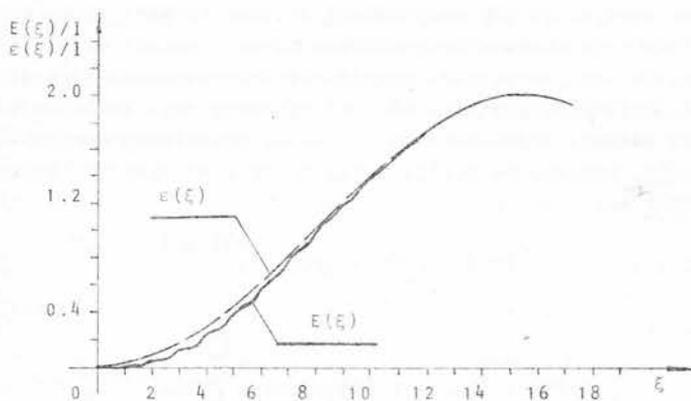
$$(10.13) \quad |S(k)| = \frac{1}{2} \left\{ \beta_0 + 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \beta_{\nu} \cos(2\pi \nu \frac{k}{k_0}) \right\} e^{-a|k|},$$

$$\beta_{\nu} = \frac{4 \cdot e^{0.5ak_0}}{ak_0} \left[1 - \left(\frac{\Lambda}{I} \right)^2 \right] \frac{(-1)^{\nu} - e^{-0.5ak_0}}{1 + d^2 \nu^2},$$

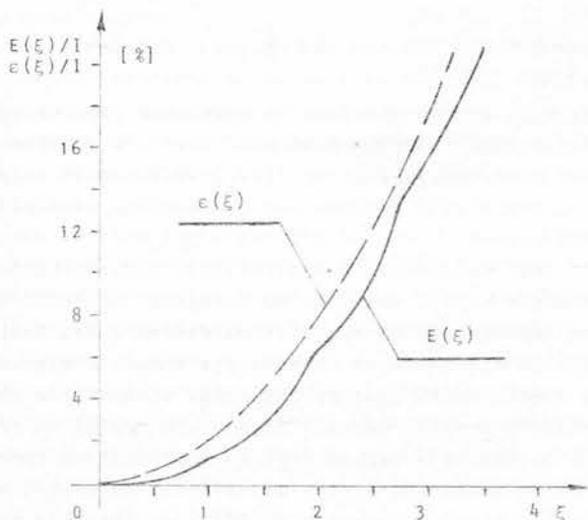
$$\Lambda = \frac{2m^2 I^2 a}{Mh^2 k_0}, \quad d = \frac{2\pi}{ak_0}, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots$$

Analiza ovih izraza uradjena je upotrebom numeričkog računara na računaru DELTA 700 (videti par. 15.2), a rezultati su grafički predstavljeni na sl. 10.2, 10.3 i 10.4 i upoređeni sa odgovarajućim rezultatima za energije harmonijskih spinskih talasa.

Kao što se sa sl. 10.2 i 10.3 vidi, energije E dezintegriranih kaplji manje su od energija "običnih" magnona. To je u saglasnosti sa rezultatima radova [149, 150] gde se pokazuje da magnon-fonon interakcija smanjuje magnonske energije u domenu malih impulsa. Nadalje, elementarne ekscitacije nastale u procesu raspada magnonskih kaplji su bezgепne ($E(0) = 0$) što je u saglasnosti sa Goldstonovom teoremom [151] (može se naći i u [152 do 154]). I na kraju, sa slike 10.4 je uočljivo da funkcija $E(k)/|k|$ ne poseduje pozitivne minimume u celoj oblasti impulsa, što znači da ovde posmat-

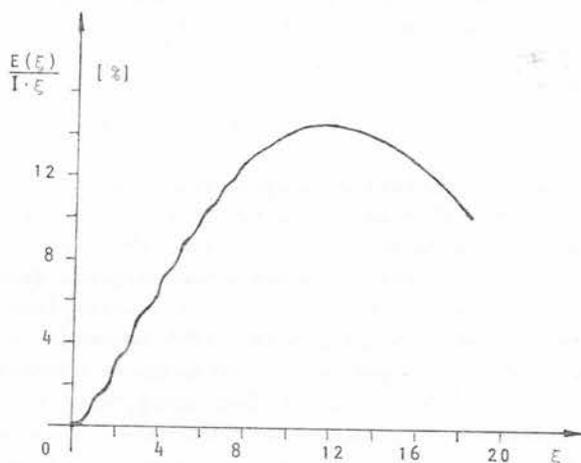


Sl. 10.2: Energije elementarnih ekscitacija $E(\xi)$ nastale raspadom magnonske kapije i energije harmonijskih spinskih talasa $\epsilon(\xi)$ u celjoj oblasti prve Brillueneve zone ($\xi \equiv |k|/k_0$).



Sl. 10.3: Energije $E(\xi)$ i $\epsilon(\xi)$ u oblasti malih talasnih vektora, gde je razlika izmedju ovih energija najveća ($\xi \equiv |k|/k_0$).

rane elementarne ekscitacije nemaju SF osobine. Ovo je u saglasnosti sa diskusijom u [108], str. 351, prema kojoj se u sistemu spinskih talasa ne mogu očekivati SF efekti.



Sl. 10.4: Ponašanje funkcije $E(\xi)/\xi$ ($\xi \equiv |k|/k_0$) - bez pozitivnih minimuma u celoj oblasti prve Brillouenove zone - ukazuje na odsustvo SF osobina u sistemu.

Upoređujući ove rezultate sa rezultatima iz par. 7.2 i hamiltonijane eksitonskog (7.26) i magnonskog (10.11) sistema, može se zaključiti da je najverovatnije jedini razlog zbog čega se kod eksitona javlja SF, a kod magnona ne, to što eksitoni poseduju veliki "statički" energetska gep Δ . Zato se može očekivati da bi se i u magnonskom sistemu mogli javiti SF efekti ako bi se feromagnetik smestio u veoma jako nepromenljivo magnetno polje H (o njegovoj jačini videti diskusiju u par. 8). U tom slučaju:

$$\epsilon_k + \epsilon(k) = \mu H + \epsilon_k;$$

te bi se i ovde, kada je $u \gg I$, pojavio veliki statički energetski gep kao i sve posledice u vezi s tim (medju kojima i SF). Ovo zaključivanje je u punoj analogiji sa rezultatima iz par. 8 i 9, gde se ističe da su ovako jaka magnetna polja danas praktično neostvarljiva te, samim tim i ovaj slučaj, bar za sada, nema neke dublje praktične primene.

10.3 Magnetni solitoni i superfluidnost

U par. 9 je pokazano da nelinearni efekti (čista spin-spin interakcija) mogu biti uzrok SF transferu magnona u feromagnetnim strukturama, ali u uslovima kada se feromagnetik nalazi u veoma intenzivnim magnetnim poljima. Nadalje, u par. 10.2 ispitana je uloga efektivne eksiton-eksiton interakcije (u prisustvu virtuelnih fononskih procesa) na formiranje BAK i SF osobine posmatranog id spinskog sistema. Rezultat toga se podudara sa prethodnim zaključkom: SF osobine ovog sistema odsustvuju ako se on ne nalazi u izuzetno jakim spoljašnjim magnetnim poljima. Potrebno je još ispitati, slično kao što je to uradjeno u par. 7.3 sa eksitonima, ulogu magnon-fonon interakcije u procesu realizacije SF transfera spinskih talasa, odnosno njihove energije, impulsa i sl. (kao što je to objašnjeno u par. 3), tzv. solitonskim mehanizmom.

Kao i u prethodnom paragrafu, i ovde će biti razmatran feromagnetni lanac - id HF 1/2 Hamiltonijan takvog sistema, u aproksimaciji najbližih suseda (videti npr. u [12, 86, 90, 124, 144 i 146]), kao i u par. 14.4 i 14.5), u koordinatnoj slici i egzaktnoj bozonskoj reprezentaciji [63], može da se napiše u sledećem obliku:

$$(10.14) \quad H = H_m + H_p + H_{mp},$$

sa:

$$\begin{aligned}
 H_m &= \Delta \sum_n B_n^+ B_n - \frac{I}{2} \sum_n B_n^+ (B_{n+1} + B_{n-1}), \\
 H_p &= \frac{1}{2} \sum_n \left[\frac{p_n^2}{M} + Q(u_n - u_{n-1})^2 \right], \\
 (10.15) \quad H_{mp} &= J_H \sum_n (u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n - \\
 &\quad - J_I \sum_n (u_{n+1} - u_n) (B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n),
 \end{aligned}$$

pri čemu su uvedene oznake:

$$\begin{aligned}
 \Delta &= \mu H + \frac{I_0}{2}, \quad I_k = \sum_n I_{0n} e^{-ikn}, \quad I_0 = 2I, \\
 (10.16) \quad J_H &= \frac{\mu H}{N} \sum_k k \sin ak + J_I, \quad J_I = \frac{1}{2N} \sum_k k I_k \sin ak,
 \end{aligned}$$

a P i Q su ovde impuls atoma i konstanta Hukove sile, respektivno; sve ostale veličine definisane su u par. 14.4 i 14.5. Ovako napisan hamiltonijan je potpuno istog oblika kao i hamiltonijan (7.1) sa (7.48) koji se koristi u analizi SF transfere molekularnih pobudjenja (par. 7.3). Kao i tamo, traženjem jednočestične talasne funkcije:

$$(10.17) \quad |\psi\rangle = \sum_n A_n(t) B_n^+ |0\rangle,$$

tzv. solitonskom procedurom (videti npr. u [128 do 133]), za spinske amplitude verovatnoće $A_n(t) + A(x,t) \equiv A$ može se, potpuno istim postupkom kao i u par. 7.3, formirati diferencijalna jednačina:

$$(10.18) \quad i\hbar(\partial A/\partial t - (\hbar\Omega + E_p)) + \frac{a^2 I}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \\ - \frac{4a^2(J_H - J_I)^2}{M(v^2 - v_0^2)} |A|^2 A = 0,$$

u kojoj figurišu: $\hbar\Omega = \Delta - I$, $E_p = \langle \varphi | H_p | \varphi \rangle$ ($|\varphi\rangle$ su talasne funkcije fononskih stanja, a $|0\rangle$ - talasne funkcije fononskog vakuuma i koherentnih spinskih stanja), $v_0 = a\sqrt{QM}$ - brzina zvuka i $v = a^2 k/\hbar$ - brzina ekscitacija u posmatranom sistemu.

Jednačina (10.18) je istog oblika kao i fenomenološka jednačina (2.12) koja opisuje kretanje klasične SF tečnosti (videti par. 2) pod uslovom da je koeficijent u poslednjem članu (ispred $|A|^2 A$) pozitivan. A on je pozitivan samo ako je brzina ekscitacija u sistemu veća od brzine longitudinalnog zvučnog talasa koji se kroz posmatrani sistem prostire. U tom slučaju ($v > v_0$), može se zaključiti, da se transfer pobudjenja u 1d feromagnetiku odvija superfluidno. U suprotnom slučaju, kada je $v < v_0$ u sistemu nastaju ekscitacije - magnetni solitoni, sa svojim zakonom disperzije i svojim (specifičnim) kretanjem (videti npr. u [155 do 158]). Veoma je važno napomenuti da izvodjenje kao i analiza jednačine (10.18) u slučaju $v > v_0$ uopšte ne zavisi od toga da li se feromagnetik nalazi u jakom ili slabom magnetnom polju. Međutim, ova jednačina ne važi u istom obliku ako se feromagnetik ne nalazi u magnetnom polju, jer je

$$J_H - J_I = \mu H \sum_k k \text{ sinka},$$

a to znači da poslednjeg, kubnog člana u tzv. Šredingerovoj nelinearnoj solitonskoj jednačini nema ako je $H = 0$. Ovaj rezultat, koji se unekoliko razlikuje od rezultata dobijenih u analizama koje su bile ranije sprovedene (par. 8 do 10.2; gde su neophodna izuzetno jaka polja), ukazuje na to da bi

efektivna spin-spin interakcija (posredstvom virtuelnih fononskih izmena izmedju magnona) mogla da bude onaj mehanizam koji stvara u 1d feromagnetnim strukturama takve kvazičestice koje bi se, ukoliko im je brzina veća od brzine zvuka "kretale" superfluidno kroz posmatrani sistem u magnetnom polju. Ove kvazičestice su "siftovani" magnoni, što se vidi iz činjenice da jednačinu (10.18) zadovoljava "ravan talas":

$$(10.19) \quad A(x,t) = A_0 e^{ikx - i\omega t}, \quad A_0 = N^{-1/2},$$

sa zakonom disperzije:

$$(10.20) \quad E(k) = E_0 + B_0 k^2 + C_0 / (k^2 - k_S^2)$$

$$E_0 = \Delta - I + E_p, \quad B_0 = \frac{1}{2} a^2 I, \quad C_0 = \frac{4\hbar^2 (J_H - J_I)^2}{MNa^2 I^2}.$$

Kao i u slučaju eksitonskih solitona (par. 7.3) ispitivanje ovog zakona disperzije pokazuje da funkcija $E(k)/|k|$ ima pozitivan minimum (sl. 10.5). Običnim algebarskim transformacijama tražena funkcija može da se napiše u obliku:

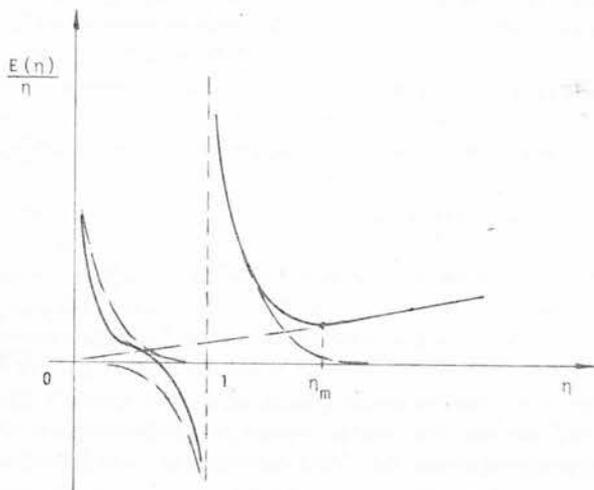
$$(10.21) \quad \frac{E(\eta)}{\eta} = \frac{E_0}{\eta} + B\eta + C/(\eta(\eta^2 - 1)),$$

gde su:

$$(10.22) \quad B = B_0 k_S^2, \quad C = C_0 / k_S^2, \quad \eta = |k|/k_S, \quad k_S = \frac{\hbar v_0}{a^2 I}.$$

Tražnje minimuma funkcije (10.21) svodi se na rešavanje bikubne jednačine, koja za slučaj pozitivnih talasnih vektora i $\eta > 1$, (što je analogno uslovu $k > k_S$, tj. $v > v_0$) ima samo jedno rešenje ($\eta_m = 10$, odakle je $k_m = 5k_S$). Numerički rezultati dobijeni su za magnetna polja "umerene" jačine, za koja važi $\mu H \approx I$. Na taj način, u slučaju kada su brzine ekscitacije (magnona u prisustvu virtuelnih fononskih procesa) u posmatranom feromagnetnom lancu veće od brzine longitudinalnog

zvučnog talasa, u sistemu mogu da se jave SF efekti ako se on nalazi u magnetnim poljima.



Sl. 10.5: Zakon disperzije "šiftovanih" magnona zadovoljava kriterijum SF u tački $\eta_m = 10$.

Egzaktnijim pristupom formiranju jednačine kretanja spinskih operatora, jednačina (10.18) "gubi" svoj kubni član [159], tako da zapravo ona i nema oblik koji bi ukazivao na prisustvo SF osobina u sistemu. Solitonska rešenja se, u tom slučaju, mogu naći (npr. [160]), ali ona nisu predmet ovih analiza.

Ostaje, dakle, zaključak, da se jednačina oblika (10.18), odnosno (2.12) može formirati samo u slučaju kada se feromagnetik nalazi u izuzetno jakim magnetnim spoljašnjim poljima.

Ovaj rezultat je u skladu sa svim ostalim rezultatima analiza iz ove glave, te se može zaključiti da se u feromagnetnim sistemima tipa HF 1/2 ne mogu očekivati SF efekti sve dok se oni ne "postave" u izuzetno jaka magnetna polja.

GLAVA 4:

SUPERPROVODLJIVOST METALA

Iako već relativno davno otkriven (pre oko 70 godina) efekat SP dugo vremena nije bio objašnjen. Sam mehanizam SP, koji je danas prihvaćen, a to je kondenzacija Kuperovih parova (KP) elektrona "prekopiran" je iz teorijskog objašnjenja SF tečnog He^4 (par. 1 i 4). Fundamentalna razlika između sistema elektrona i sistema helijuma je u prirodi čestica koje čine te sisteme. Elektronski sistem je sistem fermiona, a He^4 je sistem bozona. Kolektivne osobine poseduje samo bozonski sistem. Zbog toga se došlo na ideju da se u sistemu elektrona dešava nešto što nagoni elektrona da se sparuju, da sačine bozon. To nešto je, kako je Frelj pokazao, elektrofonon interakcija, koja čini da ukupna, odnosno efektivna interakcija između elektrona, pod određenim uslovima, može da bude privlačna (par. 11). Ovo privlačenje dovodi do sparivanja elektrona u KP (par. 12), a s obzirom da KP čine dva elektrona sa suprotnim impulsima, ovo vezano stanje je bozon - s ukupnim impulsom ravnim nuli.

Sistem elektrona u kome se ostvaruje sparivanje elektrona u KP je stabilniji od sistema elektrona bez sparivanja jer mu je energija osnovnog stanja niža. Ovo se pokazuje u poznatoj BSC teoriji (par. 12) koja polazi od postavke postojanja konstantnog energetskog gema oko Fermi sfere (ispod i iznad Fermijeveg nivoa). Energetski gep predstavlja energiju veze KP. Ovakvim rezonom objašnjava se priroda SP kretanja naelektrisanja kroz

metal, ali na niskim temperaturama ($T_c = 10$ do 20 K). Dokazano je da zakon disperzije zadovoljava kriterijum SF čestica. Na taj način sam proces SP prenošenja naelektrisanja kroz kristal tretira se kao SF transfer naelektrisanih čestica.

Ova teorija, iako ima dobro slaganje sa odgovarajućim eksperimentima, ima i svoje manjkavosti. Na primer, to je konstantnost efektivne interakcije za svaku vrednost talasnog vektora; različita od nule je samo u veoma uskom intervalu oko talasnog vektora koji odgovara Fermijevom nivou.

Polazeći od osnovnih postavki BCS teorije, a to je prisustvo sparivanja elektrona, u par. 13 je pokušano da se problem SP u 1d reši egzaktno. Iskorišćen je metod tačnijeg rešavanja gep-jednačine, koji je, u sličnoj formi već primenjen kod eksitona i magnona (par. 7.2 i 10.2). Rezultati su poredjeni sa već postojećim rezultatima drugih modela (par. 13.1 do 13.3). Iako su rezultati ovog prilaza "osetljivi" na izbor jednog arbitrarnog parametra (njegovo određivanje je nemoguće, u granicama teorijskog prilaza, i jedino bi se eksperimentalno mogao odrediti) ipak intuitivno se nameće zaključak da se SP efekti u 1d metalnim strukturama ne mogu očekivati. Isto daju i dva druga posmatrana modela (videti diskusiju u par. 13.5). Posebno interesantan slučaj nastaje za neke vrednosti tog arbitrarnog parametra, koje bi (ako je moguće da se ostvare takvi uslovi u sistemu) mogle da dovedu do toga da se u posmatranom sistemu "spušta" Fermijev nivo, da se javi nezanemarljiv energetska gep oko k_F , zbog toga da nastanu SF efekti ... (videti par. 13.5).

11. ELEKTRON-FONON INTERAKCIJA I FRELIHOVA TRANSFORMACIJA

Razmatranje SP na fonu svih procesa u elektronskom sistemu koji dovode do uredjenja sistema (videti par. 4) dozvoljava da se pretpostavi da je SP stanje metala uslovljeno

nekom specifičnom interakcijom - efektivnom elektron-elektron interakcijom koja obuhvata virtuelne fononske procese između dva elektrona, (koje su, nezavisno, objasnili Freilih [115] i Bardin [161]) i na osnovu koje su Bardin, Kuper i Šrifer [162] izgradili svoju, tzv. BSC teoriju SP. Da oscilacije kristalne rešetke imaju odlučujuću ulogu nad ostalim mogućim efektima (kulonovsko odbijanje, magnetne interakcije, prolet brzih elektrona, ...) ukazivale su eksperimentalne činjenice prema kojima je temperatura prelaza u SP stanje različitih izotopa jednog istog SPR zavisila od mase atoma (detaljno npr. u [89], gl. 3, par. 1).

Zbog svega toga posmatra se elektronski sistem u polju mehaničkih vibracija kristalne rešetke čiji hamiltonijan može da se napiše u obliku:

$$(11.1) \quad H = H_{el} + H_p + H_{el-p},$$

gde su:

$$(11.2) \quad H_{el} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}, \quad X_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu,$$

- hamiltonijan elektronskog podsistema (videti par. 14.6) - izražen u impulsnom prostoru,

$$(11.3) \quad H_p = \sum_{\vec{k}} Y_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}, \quad Y_{\vec{k}} = \hbar v_s k,$$

- hamiltonijan fononskog podsistema (par. 14.1) i

$$(11.4) \quad H_e = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} F_{\vec{q}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}-\vec{q}} (b_{\vec{q}}^{\dagger} + b_{-\vec{q}}^{\dagger}),$$

$$F_{\vec{q}} = -i\bar{W}(\hbar q / 2M v_s)^{1/2}$$

- hamiltonijan interakcije elektronskog i fononskog podsistema (par. 16.7).

Rukovodjen idejom da elektron-fonon interakcija može

da izazove privlačenje između elektrona, Frelih [115 i 163] je izvršio unitarnu transformaciju hamiltonijana (11.1) sa ciljem da elektron-fonon interakciju (koja može da bude velika) zameni nekom ekvivalentnom "malom" elektron-elektron interakcijom koja bi se provodila virtuelnom izmenom fonona:

$$(11.5) \quad H_{eq} = e^{-S} H e^S = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-1)^v}{v!} [S, [S, \dots, [S, H] \dots]],$$

v-puta

gde je S - antihermitski operator (detalje videti npr. u [12], str. 140 ili u [40], str. 423, zatim u [85], par. 41, tj. u [86], str. 284, pa u [92], gl. 1, par. 1 ili u [161]):

$$(11.6) \quad S = S_1 - S_1^\dagger, \quad S_1 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \lambda_{\vec{k}\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}-\vec{q}} b_{\vec{q}}.$$

Proizvoljna funkcija $\lambda_{\vec{k}\vec{q}}^\dagger$ bira se tako da se iz ekvivalentnog hamiltonijana eliminiše deo linearan po fononskim operatorima:

$$(11.7) \quad \lambda_{\vec{k}\vec{q}}^\dagger = F_{\vec{q}}^\dagger [\sqrt{N}(X_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger - X_{\vec{k}} + Y_{\vec{q}})]^{-1}.$$

Ako se dobijeni rezultat usrednji po fononskom vakuumu (posmatra se samo spontana emisija fonona):

$$H_{eff} = {}_p \langle 0 | H_{eq} | 0 \rangle_p,$$

i izdvoji samo onaj deo koji odgovara procesima između elektrona sa suprotnim impulsima (samo oni mogu da dovedu do BAK, videti u sledećem par.) dolazi do do sledećeg efektivnog hamiltonijana:

$$(11.8) \quad \hat{H} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \frac{|F_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger|^2 Y_{\vec{k}+\vec{q}}}{(X_{\vec{k}} - X_{\vec{q}})^2 - Y_{\vec{k}+\vec{q}}^2} a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{k}} a_{\vec{q}}.$$

U ovom, Frelihovom modelu, izraz za konstantu elektron-fonon interakcije zamenjen je nekom srednjom kvadratnom vrednošću

ψ , prema:

$$(11.9) \quad |F_{\vec{k}+\vec{q}}^+|^2 = \psi^2 \frac{n}{2Mv_S q}$$

Kao što se vidi, rezultat Frelihove transformacije je zamena elektron-fonon interakcije iz (11.1) - elektron-elektron interakcijom u (11.8). Dalja analiza sastoji se u tome da se ispita kada ova nova interakcija može da postane privlačna. Znak drugog sabirka u (11.8) zavisi samo od znaka njegovog imenioca i u slučaju:

$$|\vec{k} - \vec{q}|^2 \ll k_0 = 2mv_S / \hbar v \quad 10^8 \quad \text{m}^{-1}$$

on biva pozitivan, što znači da je elektron-elektron interakcija u celini negativna, tj. privlačna. Detaljnija diskusija o ovome je data i u par. 13.5. Znači, efektivna elektron-elektron interakcija, koja nastaje virtuelnom razmenom fonona, izaziva privlačenje medju elektronima suprotnih impulsa u domenu impulsa bliskih Fermijevim.

12. KUPEROVI PAROVI I BSC TEORIJA

U prethodnom paragrafu pokazano je da interakcija izmedju elektrona u prisustvu virtuelnih fononskih procesa može da dovede do privlačenja izmedju elektrona. Postavlja se pitanje kako se to ostvaruje u posmatranom sistemu, o kom mehanizmu se radi.

U kvazistatičkom ("žele") modelu atomi haotično osciluju oko svojih ravnotežnih položaja i ako se u ovu rešetku ubace dva negativna naelektrisanja (sva ostala trenutno zane-mare) onda će, u neposrednoj blizini ovih elektrona, doći do nekog privlačenja od strane pozitivnog ostatka: rešetka se polarizuje. Drugi elektron i njime polarizovana oblast reaguje na polarizaciju izazvanu prvim elektronom, tj. drugi elektron oseća privlačenje i na mestu polarizacije i od strane

prvog elektrona ...

Slikovito se to može prikazati kao zategnuta membrana na koju se postave dve kuglice na nekom rastojanju; kuglice prvo "ulube" membranu i nakon toga počnu kretanje jedna prema drugoj (primer uzet iz [89], gl. 2, par. 1). Zaustavljaju se jedna pored druge u stanju koje je niže od bilo kog prethodnog stanja kuglica pre zblizavanja, a to je stanje sa najnižom energijom.

Elektroni u metalu poseduju znatne brzine pa se ne može govoriti o statičkoj polarizaciji, već o polarizaciji koja se javlja duž trajektorije kretanja elektrona i koja zavisi od toga koliko brzo rešetka može da odgovori na polarizujuće dejstvo elektrona. To znači da stepen polarizacije pa i sama jačina interakcije zavise od frekvencije oscilacija rešetke, odnosno od mase atomskih ostataka. Da bi se napravila analogija sa "žele" modelom pretpostavlja se da se drugi elektron kreće po polarizovanom tragu prvog elektrona (pri tom on ima nižu energiju jer je rešetka već polarizovana). Ovde, u principu, postoje dve mogućnosti: oba elektrona imaju jednake impulse, oni čine elektronski par dvostruko većeg impulsa, ili, elektroni imaju suprotne impulse, kada opet čine elektronski par (KP), ali sa nultim ukupnim impulsom. Kuper [18] je pokazao da korelacija između elektrona u drugom slučaju dovodi do smanjenja energije; pri tom su suprotni kako orbitalni tako i spinski momenti:

$$\text{Kuperov par: } \{ \vec{p}^{\uparrow}, -\vec{p}^{\uparrow} \},$$

a elektroni koreliraju izmenjujući virtuelan fonon. Ukoliko je ovo smanjenje energije veće od porasta koje izaziva Kulonovsko odbijanje, rezultat će biti - privlačenje između elektrona. Treba napomenuti još jednu bitnu stvar u vezi interakcije između elektrona putem fonona. Rečeno je da je izmenski fonon - virtuelni jer postoji samo pri prelazu od jednog do drugog elektrona, za razliku od realnog fonona, koji bi, ukoliko bi se javio (elektron predaje svoju energiju kristalnoj rešetci), doprinio pojavi otpornosti u sistemu.

Š obzirom da se radi o relativno niskim temperaturama i da je elektrostatičko odbijanje jako ekranirano pozitivno naelektrisanim atomskim ostatkom, veoma je velika mogućnost formiranja KP u metalima.

Srednji domet korelacije između dva elektrona koji čine KP (to je tzv. dužina koherencije ili dimenzija KP) je 10^2 do 10^3 nm. Kako je srednje rastojanje između dva provodna elektrona reda 0.1 nm, to se može zaključiti da se između dva sparena elektrona nalazi 10^6 do 10^7 drugih elektrona koji takodje koreliraju i mogu da sačine parove. Intuitivno se može pretpostaviti da se imasistem KP koji nisu nezavisni već, naprotiv, jako korelisani, tako da se nalaze u istom kvantnom stanju. KP su kvazičestice sa ukupnim impulsom jednakim nuli, prema tome - bozoni, koji se odlikuju kolektivnim svojstvima, među kojima i makroskopskim skupljanjem na najnižem (u impulsnom smislu) nivou - dakle Boze kondenzacijom (videti par. 2). Posledica BAK KP je upravo nastanak SP. Naime, ukoliko se KP nadje u spoljašnjem električnom polju, ubrzaće se tj. dobiti odgovarajući impuls. Zbog jake korelacije svi KP će imati isti impuls pa ni jedan ne može da interaguje sa rešetkom (jer bi, u tom slučaju, došlo do razgradnje para). Za ovu razgradnju potrebno je uložiti rad - jednak energiji veze KP. Jasno je da je sistem KP stabilan (a time i superprovodan) sve dok je dovedena električna energija manja od sume vezivnih energija parova. To znači da postoji neko kritično polje, kritičan impuls, kritična gustina struje u SPR; takodje postoji i kritična temperatura iznad koje elektroni počinju realno da interaguju sa kristalnom rešetkom.

U celom elektronskom sistemu nisu svi elektroni spareni, dakle u njemu egzistira, pored KP, i velik broj "normalnih" elektrona. Oni zauzimaju stanja do Fermijeveg nivoa (videti par. 14.6). Uticaj fononske interakcije, kako će se kasnije videti, dovodi do pojave energetske gupa Δ iznad Fermijeveg nivoa, što znači da su stanja koja su u normalnom metalu zabranjena - ovde, u ovoj oblasti, dozvoljena. Jasno je da su ta stanja na raspolaganju KP jer upravo oni i nastaju

ju tek u prisustvu virtuelne fononske izmene. S obzirom da je ovo jednoelektronska slika, za KP biće potrebna oblast 2Δ , odnosno za "razbijanje" Kuperovog para potrebna je elektromagnetna energija $h\nu \geq 2\Delta$. (Postojanje energetskog gepa nije osnovna karakteristika SP stanja jer se javlja i "bezgepna" SP (videti npr. [89], gl. 8, par. 3), ali zato pojava KP jeste).

Sve ove činjenice imali su pred sobom Bardin, Kuper i Šrifer [162] kada su izgradjivali svoju, BCS teoriju ([116], može se naći i u [164]). U okviru ove teorije odredili su osnovno stanje SPR, pobudjena stanja, kritičnu gustinu struje, dubinu prodiranja magnetnog polja, veličinu energetskog gepa i druge relevantne termodinamičke veličine SPR. Kako ova teorija spada u red onih koje su inicirale pravilan razvoj celokupne teorije SP, može se naći u svim udžbenicima fizike čvrstog stanja (recimo [84 do 91]), kvantnim mehanikama [40, 165, 166], statističkim fizikama [12, 36, 167] i monografijama posvećenim ovoj oblasti [88, 89, 92, 101, 164]. Stoga će ona ovde biti izložena ukratko, sledeći metod jednačina kretanja primenjenog u [168]. Na osnovu Frelihovog rezultata (11.8) i svega napred iznetog, hamiltonijan BCS modela je formiran kao:

$$H_{BCS} = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} [a_{\vec{k}}^{\dagger}(\frac{1}{2})a_{\vec{k}}(\frac{1}{2}) + a_{-\vec{k}}^{\dagger}(-\frac{1}{2})a_{-\vec{k}}(\frac{1}{2})] - \quad (12.1)$$

$$- \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} W_{\vec{k}\vec{q}}^{\dagger\dagger} a_{\vec{k}}^{\dagger}(\frac{1}{2})a_{-\vec{k}}^{\dagger}(-\frac{1}{2})a_{-\vec{q}}(-\frac{1}{2})a_{\vec{q}}(\frac{1}{2}),$$

pri čemu funkcija $W_{\vec{k}\vec{q}}^{\dagger\dagger}$ egzistira samo u uskoj oblasti oko Fermi-sfere, tj.:

$$(12.2) \quad W_{\vec{k}\vec{q}}^{\dagger\dagger} = \begin{cases} W = \text{const} > 0, & k_F - k_G \leq k, q \leq k_F + k_G, \\ 0, & \text{van te oblasti.} \end{cases}$$

Granični impuls $k_G < k_0 = 10^8 \text{ m}^{-1}$, a X_k^\dagger dato je izrazom (11.2). Ako se izvrši kanonička transformacija Bogoljubova [169], prelazeći sa a_k^\dagger na - Boze operatore α_k^\dagger pomoću realnih i parnih funkcija u_k^\dagger i v_k^\dagger :

$$(12.3) \quad \begin{aligned} a_k^\dagger\left(\frac{1}{2}\right) &= u_k^\dagger \alpha_k^\dagger(1) + v_k^\dagger \alpha_k^\dagger(2) \\ a_{-k}^\dagger\left(-\frac{1}{2}\right) &= u_k^\dagger \alpha_k^\dagger(2) - v_k^\dagger \alpha_k^\dagger(1) \end{aligned} \quad ; \quad u_k^2 + v_k^2 = 1,$$

zatim zanemare forme četvrtog reda po operatorima a i izvrši "stabilizacija" hamiltonijana (12.1), koja zahteva:

$$(12.4) \quad 2X_k^\dagger u_k^\dagger v_k^\dagger - \Delta(u_k^2 - v_k^2) = 0, \quad \Delta = \frac{W}{2N} \sum_q u_q^\dagger v_q^\dagger,$$

gde su:

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{X_k^\dagger}{\epsilon_k^\dagger}\right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X_k^\dagger}{\epsilon_k^\dagger}\right),$$

on prelazi u:

$$(12.5) \quad H_{\text{BCS}} = \sum_k \left(X_k^\dagger - \frac{X_k^2 - \frac{1}{2}\Delta^2}{\epsilon_k} \right) + \sum_k \sum_{\nu=1}^2 \epsilon_k^\dagger \alpha_k^\dagger(\nu) \alpha_k^\dagger(\nu),$$

pri čemu su energije elementarnih ekscitacija:

$$(12.6) \quad \epsilon_k^\dagger = (X_k^2 + \Delta^2)^{1/2}.$$

Dobijeni izrazi, zbog (12.2), važe samo u uskom sloju impulsa oko k_F ($k \in [k_F - k_G, k_F + k_G]$, $k_G \ll 0.5 k_0$), debljine $2k_G$. Ako se potraži da li ovaj izraz (12.6) zadovoljava kriterijum SF (par. 1.2) dobija se sledeći izraz za minimum brzine elementarnih ekscitacija:

$$(12.7) \quad \min v_\varphi = \sqrt{2} \frac{p_F}{m}; \quad p_F = \hbar k_F,$$

i kako je on pozitivan može se zaključiti da operatori a^+ kreiraju elementarne ekscitacije koje ispunjavaju neophodan uslov za SF transfer elektrona kroz metal - za SP. Ova nova pobudjenja, nastala raspadom KP u sistemu koji poseduje SP osobine, kreiraju se, prema (12.7), u stanju sa $p = p_F$. Izraz (12.7) dobijen je uz pretpostavku da je $\Delta \neq 0$ i ne bi važio ako bi $\Delta = 0$. Pojava energetskog gema (praga, procepa) ima bitnu ulogu u procesu SP, barem u okviru ovog modela ili kod metala uopšte, jer ako ga nema - nema SP (kriterijum SF ne bi bio ispunjen). Rešenje jednačine (12.4), na apsolutnoj nuli, daje:

$$(12.8) \quad \Delta(0) = 2 \frac{\hbar^2}{m} k_F k_G \exp\left(-\frac{4\pi^2 \hbar^2}{W m k_F a^3}\right).$$

Jasno se vidi da Δ raste sa porastom konstante efektivne elektron-elektron interakcije W . Za karakteristične metalne vrednosti parametara, BCS teorija daje: $\Delta \sim 10^{-3}$ do 10^{-2} eV. Ako se uzmu u obzir i temperaturni efekti, ispostavlja se da Δ opada sa temperaturom i da na nekoj temperaturi T_C postaje jednaka nuli ([101], str. 17):

$$T_C = \left(\frac{\gamma}{\pi k_B}\right) \Delta(0) \sim 10 \text{ do } 20 \text{ K},$$

$\gamma = e^C$, $C = 0,577\dots$ (Ojlerova konstanta).

Osnovna zamerka ovom modelu je uzimanje konstantne interakcije $W_{\vec{k}\vec{q}}$ zbog koje je gep Δ nezavistan od talasnog vektora (u radu [170] pokazuje se da postoji ova zavisnost od \vec{k}).

Ovako niske kritične temperature su tehnički neprimenljive. Mogućnost konstrukcije drugačijeg mehanizma visokotemperaturnih SPR ($T_C \geq 10^2$ K) detaljno se analizira u [101]. Medjutim, svi pokušaju sa nefononskim mehanizmima pretrpeli su veliku kritiku jer je, u radovima [171, 172], pokazano da oni ne egzistiraju u iole realnijim sistemima.

13. ANALIZA JEDNODIMENZIONIH STRUKTURA

Metod rešavanja gep-jednačine u 1d eksitonskom sistemu (izložen u par 7.2) zbog strožijeg matematičkog tretmana nego li odgovarajuće rešavanje u 2d i 3d slučajevima (videti npr. [22, 115 do 117, 162 i 163]) dozvoljava da se on upotrebi i pri rešavanju problema SP u 1d metalnim strukturama.

Sistem elektrona sa efektivnom elektron-elektron interakcijom (videti par. 11 i 14.6 i 14.7), koja je posledica virtuelne izmene fonona, biće analiziran za sve moguće vrednosti elektronskih talasnih vektora k koje se nalaze, odnosno, leže unutar prve Brillouene zone, jer se, prema [116], SP efekti u 1d modelu mogu očekivati za sve (navedene) moguće vrednosti elektronskih impulsa $\hbar k$. Ova činjenica je vrlo bitna jer omogućuje rešavanje gep-jednačine s minimumom aproksimacija.

13.1 Formiranje gep-jednačine

Poznati [40, 86, 115 i 163] izraz za efektivni elektronski hamiltonijan, u prisustvu virtuelnih fononskih procesa, u 1d metalnim strukturama, može da se napiše u sledećem obliku (videti i par. 12):

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k X_k (a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + a_{-k\downarrow}^+ a_{-k\downarrow}) - \\
 (13.1) & - \frac{1}{2N} \sum_{k,q} W_{kq} a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ a_{-q\downarrow} a_{q\uparrow},
 \end{aligned}$$

gde su:

$$(13.2) \quad X_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu, \quad \mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad Y_k = \hbar v_s k,$$

$$(13.3) \quad W_{kq} = \frac{|F_{k+q}|^2 Y_{k+q}}{(X_k - X_q)^2 - Y_{k+q}^2}, \quad F_k = iJ \left(\frac{2\hbar k}{Mv_s} \right)^{1/2}.$$

X_k je elektronska energija, μ - hemijski potencijal, Y_k - fononska energija, v_s - brzina zvuka u posmatranom sistemu (moguće samo longitudinalni zvučni talas), m - efektivna masa elektrona, M i N su masa i broj atoma u ovom sistemu, respektivno, J je srednja vrednost jon-jon interakcije koja iznosi: $2\varepsilon_F/3 = \hbar^2 k_F^2/3m$, dok su $a_{k\uparrow}^+$ ($a_{k\uparrow}$) i $a_{-k\downarrow}^+$ ($a_{-k\downarrow}$) - Fermi operatori koji kreiraju (anihiliraju) elektron sa impulsom $\hbar k$ i spinom gore i impulsom $-\hbar k$ i spinom dole, respektivno. S obzirom na (13.2 i 13.3) i izračunatu vrednost za J , izraz za W_{kq} može da se napiše i kao:

$$(13.4) \quad W_{kq} = \frac{c}{(k-q)^2 - k_0^2}, \quad c = \frac{4}{9} \frac{\hbar^2 k_F^2}{M}, \quad k_0 = 2m \frac{v_s}{\hbar}.$$

Spektar elementarnih ekscitacija biće nadjen, slično kao i u par. 7.2, jednom opštom procedurom gde se kanoničkom transformacijom sa a prelazi na α -nove Fermi operatore:

$$(13.5) \quad \begin{aligned} a_{k\uparrow} &= u_k \alpha_{k1} + v_k \alpha_{k2}^+, & |u_k|^2 + |v_k|^2 &= 1, \\ a_{-k\downarrow} &= \theta_k \alpha_{k2} + \omega_k \alpha_{k1}^+, & |\theta_k|^2 + |\omega_k|^2 &= 1, \end{aligned}$$

ovde su u, v, θ i ω kompleksne, a njihovi moduli parne funkcije od k .

Nadalje se, korišćenjem jednačina kretanja:

$$(13.6) \quad i\hbar \dot{a}_{k\uparrow} = [a_{k\uparrow}, H], \quad i\hbar \dot{a}_{-k\downarrow} = [a_{-k\downarrow}, H],$$

i zamenom (13.5), u linearnoj aproksimaciji po operatorima α , dobija sistem algebarskih jednačina po nepoznatim transformacionim funkcijama:

$$\begin{aligned}
 (E - X_k)u_k + \Delta(k)\omega_k &= 0, \\
 \Delta^*(k)u_k + (E + X_k)\omega_k &= 0, \\
 (13.7) \quad (E - X_k)\theta_k - \Delta(k)v_k &= 0, \\
 \Delta^*(k)\theta_k - (E + X_k)v_k &= 0,
 \end{aligned}$$

gde se javljaju dve fundamentalne veličine: energetska gep $\Delta(k)$ kao rešenje jednačine:

$$(13.8) \quad \Delta(k) = \frac{1}{2N} \sum_q W_{kq} \theta_q v_q^*,$$

i energetska spektar elementarnih ekscitacija E:

$$(13.9) \quad E_k = (X_k^2 + |\Delta(k)|^2)^{1/2}.$$

Rešavanjem sistema jednačina (13.7) uz (13.9), dobija se:

$$\begin{aligned}
 (13.10) \quad |u_k|^2 = |\theta_k|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{X_k}{E_k}\right), \\
 |v_k|^2 = |\omega_k|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{X_k}{E_k}\right).
 \end{aligned}$$

Vidi se da u_k i θ_k , odnosno, v_k i ω_k nisu, u opštem slučaju, iste funkcije od k , te da je zbog toga transformacija (13.5) znatno opštija od sličnih transformacija koje se upotrebljavaju za rešavanje istih problema (tzv. transformacije Bogoljubova [134, 168]), ali koje zahtevaju da u i v budu realne funkcije. Takav zahtev isključuje pomenutu razliku, ali ima za posledicu i to da gep Δ (13.8) mora biti realna funkcija od k . Ovde to nije slučaj (detaljnije o ovim razlikama može se videti u diskusiji ispod jednačine (7.34) u par. 7.2). Mora se ipak podvući da se transformacija (13.5) svodi na transformacije Bogoljubova ako se proglase realnim i stavi da su: $\theta = u$, $\omega = -v$, ali, kako je već rečeno, to vodi do

realnih funkcija $\Delta(k)$. U ovom metodu, pretpostavke realnosti funkcija u i v te jednakosti $\theta = u$ i $\omega = -v$ nisu potrebne; kompleksna funkcija $\Delta(k)$ vodi do realnih vrednosti energija elementarnih ekscitacija (13.9). Zamenom (13.4, 13.9 i 13.10) u (13.8) dobija se gep-jednačina, koja definiše kompleksnu funkciju $\Delta(k)$, u obliku:

$$\Delta(k) = \frac{1}{4N} \sum_q \frac{c}{(k-q)^2 - k_0^2} \Delta(q) E_q^{-1}, \quad (13.11)$$

$$\Delta(k) = |\Delta(k)| e^{-i\varphi(k)}, \quad |\Delta(-k)| = |\Delta(k)|,$$

gde je $\varphi(k)$ - za sada, neodređena faza.

13.2 Različiti metodi rešavanja

Prelaskom na kontinuum (kontinualna aproksimacija):

$$\frac{1}{N} \sum_k \dots \rightarrow \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dk \dots \approx \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \dots,$$

(gde je a - konstanta rešetke) koja se obično koristi da bi se jednačine koje sadrže nepoznatu funkciju pod znakom sume prevele u integralnu jednačinu, za jednačinu (13.11) dobija se sledeći izraz:

$$(13.12) \quad \Delta(k) = \frac{a}{8\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{c}{(q-k)^2 - k_0^2} \Delta(q) [X_q^2 + |\Delta(q)|^2]^{-1/2},$$

koji će se koristiti u poredjenju različitih metoda njenog rešavanja.

(a) Freiliov pristup

Freiliov rezultat za energetski gep (dat u [117]) dobija se iz (13.12) posle sledećih aproksimacija:

$$(13.13) \quad \Delta(k) = \Delta_F = \text{const.}, \quad \frac{c}{(q-k)^2 - k_0^2} = g = \text{const.},$$

$$X_q = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} (q - k_F), \quad k_F = \pi v / 2a.$$

Nakon ovih uprošćenja gep-jednačinu (13.12) je lako rešiti, a rezultat je sledeći:

$$(13.14) \quad \Delta_F = 8\epsilon_F \exp\left(-32 \frac{\epsilon_F}{g}\right), \quad \epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}.$$

Nadalje, Frelj definiše bezdimenzionu konstantu elektron-fonon interakcije kao:

$$\phi = \frac{3g}{32 v \epsilon_F},$$

gde je v - broj slobodnih elektrona po atomu, i kaže da je njena vrednost takva da zadovoljava nejednakosti:

$$(13.15) \quad 1 > 4 \exp\left(-\frac{3}{2v\phi}\right) \geq \frac{\hbar k_F v_S}{\epsilon_F}.$$

Lako je zaključiti da minimalna vrednost za $4 \exp(-3/2v\phi)$ daje, uz pomoć (13.14), vrednost za Δ_F reda $2 \cdot 10^{-2}$ eV, što odgovara temperaturama prelaza od oko 200 K. S obzirom na ovo, ovaj rezultat se ne može smatrati realnim.

(b) BCS model

Rešenje gep-jednačine u slučaju BCS modela, ali primenjenog na 1d slučaj, može se naći uvodeći [162]:

$$(13.16) \quad \Delta(k) = \Delta_{BCS}^{1d} = \text{const.}, \quad X_q = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} (q - k_F),$$

$$(13.16) \quad \frac{c}{(q-k)^2 - k_0^2} = \begin{cases} g, & q \in [k_F - k_G, k_F + k_G], \\ 0, & \text{za druge } q, \end{cases}$$

$$g = \text{const.}, \quad k_G \ll k_F,$$

na osnovu čega se (13.12) svodi na:

$$(13.17) \quad 1 = \frac{g_a}{8\pi} \int_{k_F - k_G}^{k_F + k_G} dq \left\{ \left[\frac{\hbar^2 k_F}{m} (q - k_F) \right]^2 + (\Delta_{BCS}^{1d})^2 \right\}^{-1/2},$$

a odatle je rešenje za gep sledećeg oblika:

$$(13.18) \quad \Delta_{BCS}^{1d} = 2\hbar k_G v_F \exp\left(-\frac{4\pi\hbar v_F}{ga}\right), \quad v_F = \frac{k_F \hbar}{m}$$

Jednostavnim prilazom, u 3d slučaju, ista procedura dovodi do rešenja za gep u obliku (može se naći u [4, 7, 12, 40, 84 do 86, 90, 91 i 162]):

$$(13.19) \quad \Delta_{BCS}^{3d} = 2\hbar k_G v_F \exp\left(-\frac{4\pi^2 \hbar v_F}{ga^3 k_F^2}\right).$$

Poredjenjem poslednja dva izraza nalazi se da je:

$$(13.20) \quad \Delta_{BCS}^{1d} = \Delta_{BCS}^{3d} \exp\left[-\frac{4\pi\hbar v_F}{ga} \left(1 - \frac{\pi}{a^2 k_F^2}\right)\right],$$

a to za karakteristične vrednosti parametara posmatranog sistema (datih u par. 14.6 i 14.7 i $g = 1$ eV) daje:

$$\Delta_{BCS}^{1d} = 4 \cdot 10^{-6} \Delta_{BCS}^{3d}.$$

Kako Δ_{BCS}^{3d} odgovara temperaturama prelaza od oko 10 do 20 K, to jasno sledi da SP efekti u 1d primeni BCS modela neće biti приметni.

(c) Redukcija gep-jednačine na algebarsku jednačinu

Koristeći ideje iz [22] može se rešenje jednačina (13.12) svesti na oblik:

$$(13.21) \quad \Delta(k) = \Gamma \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\Delta(q)}{(q-k)^2 - k_0^2},$$

ako se pretpostavi da važi:

$$\Gamma = \frac{mk_F}{6M}, \quad \Delta(k) = \Delta^*(k) \ll |\bar{X}_k|,$$

(13.22)

$$(X_k^2 + \Delta^2(k))^{1/2} = |\bar{X}_k| \approx \left| \frac{1}{2k_F} \int_{-k_F}^{k_F} dk \frac{\hbar^2}{2m}(k - k_F) \right| = \frac{2}{3} \epsilon_F.$$

Integralna jednačina (13.21) se, upotrebom Furije transformacije oblika:

$$f(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx} f(x),$$

redukuje na algebarsku jednačinu:

$$(13.23) \quad \left(1 - \frac{\pi}{K_0} \int \sin k_0 x \right) \Delta(x) = 0,$$

koja, s obzirom na karakteristične vrednosti parametara posmatranog sistema (par. 14.7), tj. s obzirom na vrednost $\frac{\pi}{K_0} \Gamma \approx 10^{-3}$, ima jedino moguće rešenje: $\Delta(x) = 0$. To znači da i integralna jednačina (13.21) ima jedino trivijalno rešenje: $\Delta(k) = 0$, a to, sa svoje strane, opet znači da id metalne strukture ne poseduju SP osobine (u skladu sa tumačenjem da je $\Delta(k)$ - energija veze SP). Ovaj rezultat je kompatibilan sa rezultatom koji daje BCS model.

13.3 Egzaktniji tretman problema

Kako je to u uvodnom delu ovog paragrafa već rečeno, ono što je bitno za egzaktnije rešavanje gep-jednačine

(13.12) je činjenica da se SP efekti mogu u 1d slučaju očekivati za sve vrednosti talasnog vektora $k \in [-\pi/a, \pi/a]$. Na osnovu ovoga prelaz (iz par. 3.2):

$$\int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dk \dots + \int_{-\infty}^{+\infty} dk \dots$$

nije jako "grub" ($\pi/a \approx 10^{10} \text{ m}^{-1}$), a ima za posledicu da se jednačina (13.12) transformiše u:

$$(13.24) \quad \Delta(k) = \frac{\lambda}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left[\frac{1}{q-(k+k_0)} - \frac{1}{q-(k-k_0)} \right] \psi(q).$$

gde su:

$$(13.25) \quad \psi(q) = \Delta(q) E_q^{-1}, \quad \lambda = \frac{n^2 k_F^2 a^2}{36 M k_0}.$$

Isto tako, glavni doprinos integralu u (13.12), odnosno u (13.24), ima podintegralna funkcija u najbližoj okolini singulariteta, tako da proširenje granica integracije ne unosi bitniju grešku - za velike vrednosti impulsa ova funkcija je zanemariva. Pretpostavljajući analitičnost funkcije $\psi(k)$ u gornjoj poluravni, integralna jednačina (13.24) se redukuje u odgovarajuću diferencnu jednačinu (detaljnije o ovom postupku rečeno je u par. 7.2):

$$(13.26) \quad \psi(k - k_0) - \psi(k + k_0) = \frac{i}{\lambda} \Delta(k).$$

Rešenje ove jednačine može se potražiti u obliku:

$$(13.27) \quad S(k) \equiv \Delta(k) X_k^{-1} = A(k) \times \begin{cases} \exp[-(\ell+i\rho)k], & \text{za } k > 0, \\ \exp[(\ell-i\rho)k], & \text{za } k < 0, \end{cases}$$

pri čemu su:

$$A^*(k) = A(k), \quad A(k \pm k_0) = A(k), \quad A(-k) = A(k),$$

$$\lambda = \text{const.} > 0, \quad \rho = \text{const.} > 0,$$

(13.28)

$$X_k = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_F^2) = -\mu_0 - 2V \cos ak,$$

$$\mu_0 = \left(1 - \frac{2}{\pi^2}\right) \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad V = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m\pi^2}.$$

Simetrijski zahtevi slede iz simetrijskih osobina transformacionih funkcija u i v - iz (13.5), odnosno funkcije $\Delta(k)$ - iz (13.8 i 13.11); videti i par. 7.2. Pomoću ovih novih obeležavanja, uvedenih izrazom (13.27), veličina $\psi(k)$ definisana u (13.25) će biti:

$$(13.29) \quad \psi(k) = \Omega(k)e^{i\rho k}, \quad \Omega(k) = \frac{X_k}{E_k} A(k)e^{-\lambda|k|},$$

a jednačina (13.26) će se svesti na dve jednačine:

$$(13.30) \quad \Omega(k - k_0) - \Omega(k + k_0) \cos \rho k_0 = 0,$$

$$\Omega(k - k_0) + \Omega(k + k_0) \sin \rho k_0 = \frac{1}{\lambda} X_k A(k) e^{-\lambda|k|},$$

iz kojih (iz prve) se može odrediti faza ρ :

$$(13.31) \quad \rho = (4n + 3) \frac{\pi}{2k_0}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

a pomoću nje i ona, iz jednačine (13.11), neodređena faza $\varphi(k)$:

$$(13.32) \quad \varphi(k) \equiv \rho k = (4n + 3) \frac{\pi k}{2k_0}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Druga (donja) jednačina iz (13.30) prelazi onda u:

$$(13.33) \quad \Omega(k + k_0) + \Omega(k - k_0) = \frac{1}{\lambda} X_k A(k) e^{-\lambda|k|}.$$

Uvodeći translacioni operator $\hat{\tau}_g$ (kao i u par. 7.2; videti jednačinu (7.37)) pomoću definicione jednačine:

$$(13.34) \quad \hat{\tau}_g \chi(k) = \chi(k+g),$$

(χ je proizvoljna funkcija od k) odakle slede osobine tog operatora:

$$(13.35) \quad \hat{\tau}_g^n = \hat{\tau}_{ng}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

jednačina (13.33) se može napisati u obliku:

$$(13.36) \quad \Omega(k) = -\frac{1}{\lambda} (\hat{\tau}_{k_0} + \hat{\tau}_{-k_0})^{-1} X_k A(k) e^{-2|k|}$$

Operator $(\hat{\tau}_{k_0} + \hat{\tau}_{-k_0})^{-1}$ se može predstaviti u dve ekvivalentne forme:

$$(13.37a) \quad (\hat{\tau}_{k_0} + \hat{\tau}_{-k_0})^{-1} = \begin{cases} \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^\nu \hat{\tau}_{(2\nu+1)k_0}, \\ \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^\nu \hat{\tau}_{-(2\nu+1)k_0}. \end{cases}$$

Primena (13.37a), za $k > 0$ i (13.37b) za $k < 0$, na jednačinu (13.36) vodi do konvergencije rešenja u oba slučaja, pa se ona mogu napisati u sledećem jedinstvenom obliku:

$$(13.38) \quad A(k) = e^{k|k|} B(k) \quad B(k) = [b_g^2(k) - 1]^{1/2}$$

pri čemu je obeleženo:

$$(13.39) \quad b_g(k) = 2 \frac{\lambda}{u_0} \left[\operatorname{ch}^{-1} 2k_0 + \frac{\operatorname{ch} 2k_0 \operatorname{cos} a k_0 \operatorname{cos} a k - \operatorname{sh} 2k_0 \operatorname{sin} a k_0 \operatorname{sin} a |k|}{\operatorname{ch}^2 2k_0 - \operatorname{sin}^2 a k_0} \right]^{-1}$$

Jednačine (13.27, 13.31 i 13.38) definišu moduo energetskog gepa u sledećoj formi:

$$(13.40) \quad |\Delta(k)| = |X_k| A(k) e^{-\ell|k|}.$$

13.4 Određjivanje arbitrarnog parametra

Na osnovu osobina funkcije $A(k)$, iz (13.28), i na osnovu izraza (13.38), sledi da će funkcija $A(k)$ biti realna samo ako bude ispunjen uslov da je:

$$(13.41) \quad b_{\ell}^2(k) \geq 1.$$

Zadovoljenje ovog uslova zavisi od jednog "damping" parametra (ℓ) koji se javlja zbog (iz) homogenosti gep-jednačine. Analiza uslova (13.41) zavisi od numeričkih vrednosti za sledeće konstante (koje su izračunate na osnovu karakterističnih vrednosti parametara elektronskog sistema datih u par. 14.6 i 14.7):

$$(13.42) \quad k_0 = 10^8 \text{ m}^{-1}, \quad \mu = 5 \cdot 10^{-19} \text{ J}, \\ \lambda = 1.7 \cdot 10^{-22} \text{ J}, \quad V = 5 \cdot 10^{-20} \text{ J}, \quad \mu_0 = 6 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Koristeći ovo i jednačinu (13.39), iz (13.41) se može zaključiti o vrednostima parametra ℓ .

(a) Ako je:

$$(13.43) \quad \ell \geq 8.00637 \cdot 10^{-8} \text{ m},$$

uslov (13.41) je ispunjen za svaku vrednost talasnog vektora k . To znači da je, u ovom slučaju, energetski gep različit od nule, a njegova veličina zavisi od izbora ℓ .

Za $\lambda = 10^{-7}$ m rezultati se mogu dobiti na sledeći način: kvadratni koren iz (13.38) se, s obzirom na izabranu vrednost za λ , može aproksimativno razviti kao:

$$(13.44) \quad B(k) = b_{\lambda}(k) - \frac{1}{2} b_{\lambda}^{-1}(k)$$

jer je $b_{\lambda} \gg 1$, te se može dobiti aproksimativan izraz za $A(k)$ u sledećem obliku:

$$(13.45) \quad A(k) = e^{\lambda |k|} (9.12321 - 2.30804 \cos ak),$$

$$(\lambda = 10^{-7} \text{ m}, \quad a = 3 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \quad k \in [-0.5k_0, 0.5k_0]).$$

Uzimajući u obzir periodičnost (sa periodom k ; videti (13.28)) parne funkcije $A(k)$, date izrazom (13.38), ona se može razviti u Furije red prema formulama:

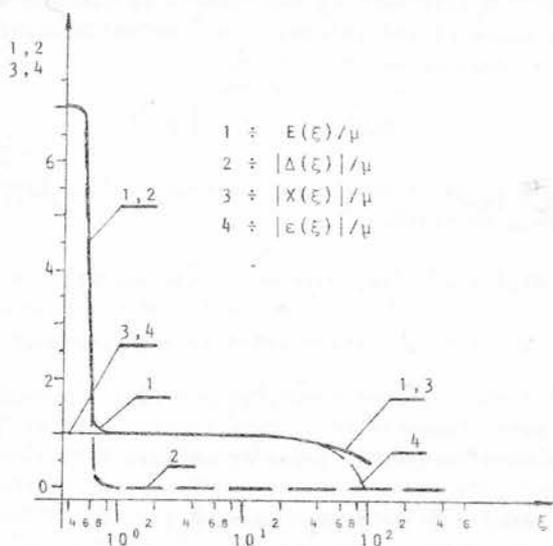
$$(13.46) \quad A(k) = \frac{D_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} D_n \cos 2\pi n \frac{k}{k_0},$$

$$D_n = \frac{4}{k_0} \int_0^{0.5k_0} dk A(k) \cos 2\pi n \frac{k}{k_0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Na osnovu (13.45 i 13.46), u posmatranom slučaju ($\lambda = 10^{-7}$ m), dobija se:

$$(13.47) \quad A(k) = 204.40515 \left[1 + 2.01357 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n - 0.00674}{1 + 0.39478 n^2} \cos(2\pi n \frac{k}{k_0}) \right].$$

Energetski gep, prema (13.40), zakon disperzije, prema (13.9), kao i funkcija $E_k/|k|$, sve izražene kao bezdimenzionne veličine, računane su numerički (videti par. 15.3 i Elektron 1) u funkciji bezdimenzionog talasnog vektora $\xi = |k|/k_0$, sa $A(k)$ datim preko (13.47), a rezultati su prikazani na sl. 13.1 i 13.2.

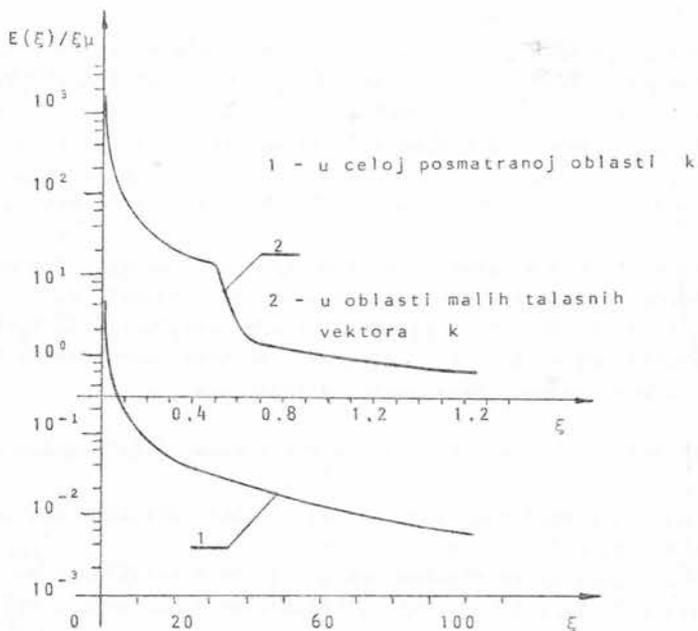


Sl. 13.1: Energetski gap $|\Delta(\xi)|/\mu$ i zakon disperzije $E(\xi)/\mu$ u poredjenju sa energijom "čistih" elektrona $|X(\xi)|/\mu$, odnosno $|\epsilon(\xi)|/\mu$, u funkciji talasnog vektora $\xi \equiv |k|/k_0$.

Numerički rezultati u ovom slučaju ($\ell = 10^{-7}$ m) pokazuju da je u okolini k_F vrednost energetskog gema $|\Delta(k)|$ manja od 10^{-55} J, što je u skladu sa rezultatima dobijenim u par. 13.2 (slučaj b i c). Funkcija $E(\xi)/\xi$ (sl. 13.2) monotonno opada sa povećanjem ξ (odnosno k), te, shodno tome, SP efekti ovde nisu prisutni.

U okolini impulsa $k = 0.5k_0$ ($\xi = 0.5$ na sl. 13.1) vrednost energetskog gema dostiže vrednost oko $7\mu \approx 5 \cdot 10^{-16}$ J. Ovaj apsurdan rezultat (sa energetske tačke gledišta) ukazuje na to da je izabrana vrednost arbitrarnog parametra apsolutno neprihvatljiva. Svakako da je umesto toga moglo biti uzeto i npr. $\ell = 10^{-5}$ m, 10^{-3} m, 10^3 m ili nešto drugo. Međutim,

i ovaj test-primer pokazuje da slučaj $\lambda > 8.00637 \cdot 10^{-8}$ m
nema fizičkog opravdanja.



Sl. 13.2: Odsustvo pozitivnih minimuma funkcije $E(\xi)/\xi$ u celoj oblasti promene talasnog vektora ξ .

(b) Ako je:

(13.48)

$$\lambda < 7.49554 \cdot 10^{-8} \text{ m,}$$

uslov (13.41) nije ispunjen ni za jednu vrednost talasnog vektora k , pa se rešenje gep-jednačine svodi samo na trivijalno: $\Delta(k) = 0$. U ovom slučaju, egzaktniji tretman gep-jednačine daje isti rezultat koji daje model opisan u slučaju c iz par. 13.2 i rezultat kojem teži rezultat u slučaju b iz istog paragrafa.

Znači, u ovom slučaju ($\lambda < 7.49554 \cdot 10^{-8}$ m), u sistemu nema sparivanja elektrona u KP (energija veze KP je 2Δ ; videti par. 12) i SP efekti odsustvuju.

(c) Ako λ leži u intervalu:

$$(13.49) \quad 7.49554 \cdot 10^{-8} \text{ m} \leq \lambda < 8.00637 \cdot 10^{-8} \text{ m},$$

uslov (13.41) je zadovoljen samo za one vrednosti talasnog vektora k koje su veće od neke granične vrednosti k_g ($k > k_g \neq 0$). S obzirom na (13.45), lako je zaključiti da k_g mora biti manje od $0.5k_0$. Ovo dovodi do novog ograničenja za λ ; njena vrednost mora ležati u intervalu:

$$(13.50) \quad 8.00634 \cdot 10^{-8} \text{ m} < \lambda < 8.00637 \cdot 10^{-8} \text{ m}.$$

U narednim analizama bira se: $k_g = 0.3k_0$, što odgovara izboru $\lambda = 8.00636 \cdot 10^{-8}$ m.

U tom slučaju, trivijalno rešenje ($D_n = 0 \Rightarrow A(k) = 0 \Rightarrow \Delta(k) = 0$) za $k \in [0, 0.3k_0]$ i rešenje $A(k)$, na osnovu (13.46), ali sa koeficijentima:

$$(13.51) \quad D_n = \frac{4}{k_0} \int_{0.3k_0}^{0.5k_0} dk A(k) \cos 2\pi n \frac{k}{k_0},$$

za $k \in [0.3k_0, 0.5k_0]$ se "nadovezuju" i obrazuju jedinstveno rešenje za $A(k)$. Naravno, treba imati na umu da je na ovaj način definisana funkcija $A(k)$ samo u toku jednog poluperioda, ali kad se zna da je ona periodična i parna funkcija od k (videti formule 13.28 i 13.46) onda je jasno da je ona definisana i u celom intervalu promene talasnog vektora.

Dakle, u ovom slučaju ($\lambda = 8.00636 \cdot 10^{-5}$ m) kvadratni koren iz (13.28) može se aproksimativno zameniti parabolom:

$$(13.52) \quad B(k) \approx a^2 k^2 + a_1 |k| + a_0,$$

koja treba da prodje kroz tri tačke: $(0.3k_0, B(0.3k_0))$, $(0.4k_0, B(0.4k_0))$ i $(0.5k_0, B(0.5k_0))$. Naime, ove tačke su potrebne, određuju se na osnovu tačnih formula za $B(k)$ i $b_{\lambda}(k)$, (13.38 i 13.39), da bi se odredili koeficijenti a_s ($s = 0, 1, 2$). Na ovaj način, aproksimativan izraz za $A(k)$, pomoću (13.38 i 13.52) će biti:

$$(13.53) \quad A(k) = e^{\lambda |k|} \cdot 10^{-2} [-8.664(k/k_0)^2 + 9.614 |k|/k - 2.104],$$

$(\lambda = 8.00636 \cdot 10^{-5} \text{ m}, k \in [-0.5k_0, 0.5k_0]),$

a na osnovu (13.51 i 13.53):

$$(13.54) \quad A(k) = 4.293 \cdot 10^{-2} [1 + 3.42301 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=1}^3 P_n^{(j)} \cos(2\pi n \frac{k}{k_0})],$$

gde su koeficijenti $P_n^{(j)}$ dati kao:

$$(13.55) \quad P_n^{(1)} = \frac{(-1)^n - 0.00014\alpha_n}{1 + d^2 n^2}, \quad d = 0.78477,$$

$$P_n^{(2)} = -0.22096 \frac{1-d^2 n^2}{1+d^2 n^2} \frac{(-1)^n - 0.93726\beta_n}{1 + d^2 n^2},$$

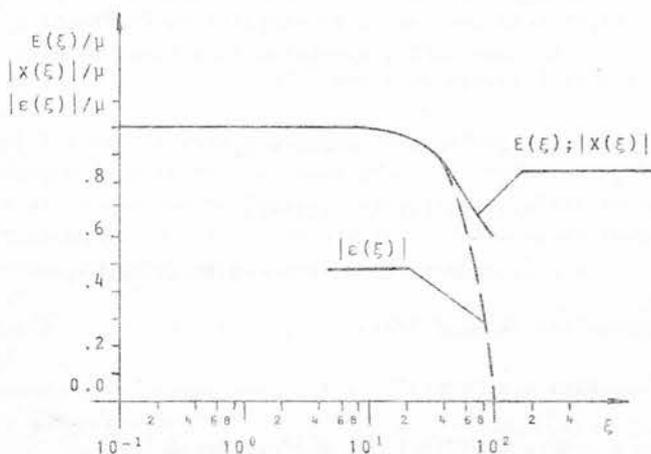
$$P_n^{(3)} = -0.50337 \frac{1-3d^2 n^2}{1+d^2 n^2} \frac{(-1)^n - 0.20164\gamma_n}{(1 + d^2 n^2)},$$

a u ovim formulama figurišu:

$$\alpha_n = \cos(0.6\pi n) + dn \sin(0.6\pi n),$$

$$(13.56) \quad \beta_n = \cos(0.6\pi n) + \frac{2dn}{1-d^2n^2} \sin(0.6\pi n),$$

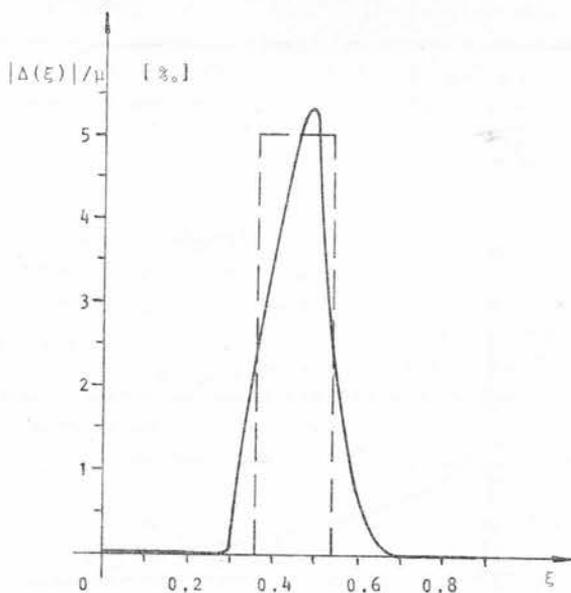
$$\gamma_n = \cos(0.6\pi n) + dn \frac{3-d^2n^2}{1-3d^2n^2} \sin(0.6\pi n).$$



Sl. 13.3: Zakon disperzije $E(\xi)$ u poredjenju sa energijama "čistih" elektrona $|X(\xi)|$, odnosno $\epsilon(\xi)$, u funkciji od $\xi \equiv |k|/k_0$.

Koristeći formule (13.2), (13.9) i (13.40) sa (13.54 do 13.56), kao i pomoć računara (videti par. 15.3 i Elektron 2), izračunate su bezdimenzione funkcije: $|\Delta(\xi)|/\mu$, $E(\xi)/\mu$, $|X(\xi)|/\mu$ i $|\epsilon(\xi)|/\mu$, znači energetski gep, energetski spektar i energije "čistih" elektrona, respektivno, kao i funkcija $[E(\xi)/\mu]/\xi$, sve u funkciji bezdimenzionog talasnog vektora $\xi \equiv |k|/k_0$ u celom intervalu promene ξ (što je grafički

predstavljeno na sl. 13.3 do 13.5).

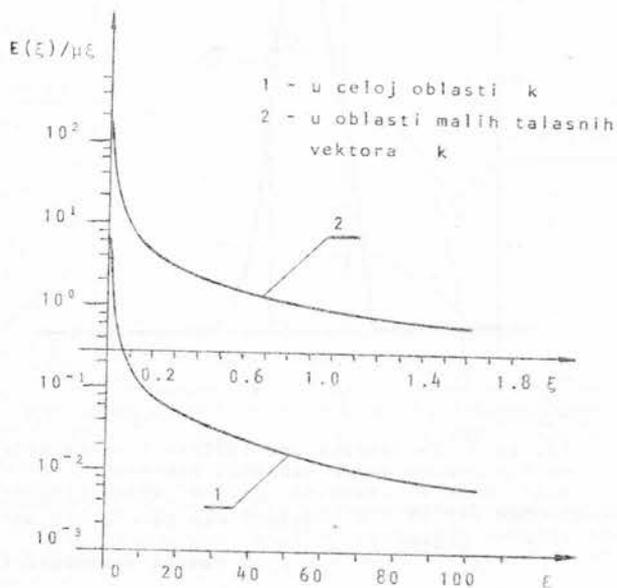


Sl. 13.4: Energetski gep $|\Delta(\xi)|$, u zavisnosti od ξ u domenu malih talasnih vektora (ξ oko 0.5), može se zameniti "pravim" gepom (isprekidana linija):

$$\Delta/\mu = \begin{cases} 5 \cdot 10^{-3}, & \text{za } \xi \in [0.36, 0.54] \\ 0, & \text{za ostale vrednosti } \xi. \end{cases}$$

Numerički rezultati, kao što se sa sl. 13.3 do 13.5 vidi, pokazuju da je energetski gep $|\Delta(k)|$ zanemarivo mali u okolini k_F , te da funkcija $E(k)/|k|$ monotono opada sa porastom talasnog vektora k . Po tome su (odsustvo SP osobina) ovi rezultati analogni onima koji su dobijeni u slučaju a (iz ovog paragrafa), odnosno u slučajevima b i c iz paragrafa 13.2.

U okolini talasnog vektora $k = 0.5k_0$, energetski gep je reda $5 \cdot 10^{-3} \mu \sim 4 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ ($\sim 250k_B$; k_B - Bolcmanova konstanta). Ovaj rezultat (predstavljen na sl. 13.4) zasluuje posebnu pažnju iako on direktno ne ukazuje na postojanje SP osobina u sistemu zbog toga što je oblast impulsa u kojima se energetski gep javlja daleko od oblasti impulsa (oko Fermijevog) odgovornih za SP.



Sl. 13.5: Funkcija $E(\xi)/\xi$ nema pozitivnog minimuma u celom intervalu promene ξ .

Sve analize provedene u ovom paragrafu pokazuju da se SF efekti u id metalnim strukturama ne mogu očekivati.

Specijalan (ali ne i obavezno SF) efekat se može desiti u slučaju kada "damping" faktor ima vrednost $\lambda = 8.00636 \cdot 10^{-3} m$ (slučaj c)

13.5 Analiza i diskusija rezultata

Prvo pitanje koje bi trebalo razjasniti je pitanje znaka medjuelektronske interakcije izazvane virtuelnom izmenom fonona izmedju elektrona. Ako je efektivni hamiltonijan sistema sparenih elektrona napisan u obliku (13.1) sa "konstantom" interakcije W_{kq} u obliku (13.4) može se zaključiti da je interakcija privlačna ako je $|k-q| > k_0$. Ovakvo rezonovanje je zastupljeno u Frelihovim radovima [115, 117, 163]. Velika pažnja posvećena znaku efektivne medjuelektronske interakcije može se naći u [40, 86] i u [7, 12, 84, 85, 90 i 91]. U ovim radovima hamiltonijan (13.1) napisan je u sledećem obliku:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k X_k (a_{k+}^+ a_{k+} + a_{-k+}^+ a_{-k+}) + \\
 (13.57) & + \frac{1}{2N} \sum_{k,q} W_{kq} a_{k+}^+ a_{-q+} a_{-k+}^+ a_{q+}.
 \end{aligned}$$

i on, sa W_{kq} u istom obliku (13.4), daje sasvim suprotan zaključak: interakcija je privlačna za svako k i q manje od k_0 , ali i za k i q veće od k_0 - kada zadovoljavaju relaciju $|k-q| < k_0$. Ovakvo rezonovanje je kompatibilno sa onim na čemu počiva BCS teorija.

Najbolje razjašnjeno pitanje medjuelektronske interakcije kao i energije osnovnog stanja sistema elektrona sa KP može se naći u [4], gl. 10.

Za ovde provedene analize je najbitnije to da rezultat za energiju (13.9), odnosno za energetski gep (13.11), ne zavisi od znaka drugog člana u (13.1) ili (13.57).

Drugo pitanje je problem stabilnosti elementarnih ekscitacija sa energijama (13.3). Ako se napiše izraz za slobodnu energiju (za dato k) sistema:

$$(13.58) \quad F_k = -2k_B T \ln \left[1 + \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \left(\hbar^2 k^2 + |\Delta(k)|^2 \right)^{1/2} \right\} \right],$$

jednostavnom analizom može se zaključiti da ovaj izraz ima minimalnu vrednost kada je $|\Delta(k)| = 0$. To navodi na zaključak da su elementarne ekscitacije sa nenultim gecom ($\Delta \neq 0$) nestabilne. Ovo bi važno za BCS teoriju (par. 12 i 13.2b) i za teoriju izloženu u par. 13.3 i 13.4.

Kriterijum minimuma slobodne energije ne može se koristiti u ovoj teoriji SP za određivanje "damping" arbitrarnog parametra jer je $\Delta(k) \equiv 0$ samo za $\ell < 7.49554 \cdot 10^{-8}$ m. Ovaj rezultat (slučaj b iz par. 13.4), pored toga što vodi do nefizičkih rešenja, daje (opet) proizvoljnost u odlučivanju za vrednost ℓ .

Pokušaj da se ℓ odredi pomoću normiranja talasne funkcije sistema:

$$(13.59) \quad |\Psi\rangle = \sum_{kq} p_k(t) q_q(t) \alpha_{k_1}^+ \alpha_{q_2}^+ |0_1 0_2\rangle,$$

ostao je bez uspeha jer koeficijenti normiranja ne zavise od E_k pa preko toga, ni od ℓ .

Tako, nije pronađen ni jedan siguran teorijski put koji bi omogućio određivanje ovog odlučujućeg parametra posmatranog sistema.

Analize izložene u par. 13.2 (b i c), kao i sve analize u par. 13.3 i 13.4 navode na jedan isti zaključak: u oblasti impulsa relevantnih za SP (k oko k_F) energetski gep ne postoji (ili je zanemarljivo mali) te SP efekte u 1d metalnim strukturama ne bi trebalo očekivati. Izuzetak čini Frelihov rezultat koji je dat u par. 13.2a kao i slučaj $\ell = 8.00636 \cdot 10^{-8}$ m (par. 13.4c).

Treba naglasiti da se funkcija $\Delta(k)$, striktno go-

voreći, ne može smatrati energetskim gepom, jer se reč "gap" (od engleske reči: - gap) koristi za neku konstantnu vrednost energije, koja, znači, ne zavisi od k . Zbog toga je funkcija $|\Delta(k)|$ za $\lambda = 8.00636 \cdot 10^{-8}$ m zamenjena aproksimativnom konstantnom vrednošću Δ koja je na sl. 13.4 prikazana isprekidanom linijom. Ova interesantna situacija, postojanje energetskog gepa $\Delta = 5 \cdot 10^{-3}$ μ , u oblasti malih talasnih vektora ($k = 5 \cdot 10^{-3} k_F$), navodi na dodatna razmišljanja. Interakcija između elektrona, u oblasti ovako malih talasnih vektora ($k \ll 0.5 k_0$), je privlačna, tako da njihovo sparivanje ima smisla. Domen sparivanja (domen dejstva KP) je ovde $9 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$, tj. približno je isti kao i kod 3d BCS modela. U prisustvu ovako "jakog" gepa dolazi do formiranja parova elektrona - koji su sada bozoni. Usled prisustva bozona u intervalu talasnih vektora (k, q) $\in [0.36k_0, 0.54k_0]$ oslobadaju se vakantna mesta za elektrone sa nešto višim energijama (impulsima) koji onda "padaju" na ova slobodna mesta, vezuju se u nove parove... Energetski gep se ponaša kao procep koji "guta" elektrone, prevodeći ih u bozonske parove. Posledica ovakvog sukcesivnog nastajanja parova (prelaz elektrona sa višim energijama na niža energetska stanja je dozvoljen, u prirodi je spontan) je pomeranje graničnog elektronskog impulsa $\hbar k_F$ sve do $0.5 \hbar k_0$. Tada bi za SP relevantni talasni vektori bili oni koji se nalaze u neposrednoj okolini $0.5k_0$, svi uslovi bili bi ispunjeni i SP efekti bi mogli da se pojave. Uzimajući da je energetski gep veličine $\Delta \approx 5 \cdot 10^{-3} \mu \approx 4 \cdot 10^{-21}$ J to bi odgovaralo temperaturi prelaza iz normalnog u SP stanje, znači kritičnoj temperaturi SP stanja sistema, od oko 200 K, što opet znači da bi se na taj način ostvarila visokotemperaturska SP rezultat je uporediv sa Frelihovim rezultatom iz par. 13.2a). Ovaj veoma optimistički rezultat počiva na brojnim nerazjašnjenostima: da li je ovako izabrana vrednost arbitrarnog damping faktora ($\lambda = 8.00636 \cdot 10^{-8}$ m) realno moguća?; da li kulonovsko odbijanje (čista medjuelektronska interakcija) menja ovakvu sluku?; kako utiču procesi rekombinacije, koji

nisu uzeti u obzir? itd. Odgovor na sva ova pitanja mogao bi da dâ jedino odgovarajući eksperiment.

Nameće se ipak, sve u svemu, jedan intuitivan zaključak, a to je da je najverovatnija varijanta ta kada odsustvuje energetski gep ($\lambda < 7.49554 \cdot 10^{-8}$ m) koja odgovara potpunom odsustvu SP osobina u id metalnim strukturama. U vezi sa ovim treba naglasiti da je za odgovarajući damping parametar u slučaju eksitona (iz par. 7.2) izabrana vrednost $\lambda = a = 5 \cdot 10^{-10}$ m (dakle, mnogo manja od $7.49554 \cdot 10^{-8}$ m) i da je ona, s obzirom na dobijene rezultate, sasvim realna. Slično tome, mala vrednost parametra koja se ima i kod magnona (videti par. 10.2) takodje daje odgovarajuće rezultate. Neophodno je još podvući da ovde dobijeni rezultati, s obzirom na učinjene procene veličina energetskog gema i dr., zavise od izbora karakterističnih veličina sistema (13.42), međjutim, promena tih veličina (u granicama realnih vrednosti) ne menja generalne zaključke o ponašanju i osobinama posmatranog elektronskog sistema u prisustvu virtuelnih fononskih procesa.

" Ništa nije praktičnije
od teorije "

L. Bolcman

ZAKLJUČAK

Pregled osnovnih rezultata ove disertacije bi bio sledeći:

1. Pokazano je da je vreme relaksacije Frenkelovih eksitona reda 10^{-13} s i da je mnogo manje od njihovog vremena života koje je reda 10^{-8} s. Što se tiče spinskih talasa, vreme relaksacije bitno zavisi od prisustva spoljašnjeg magnetnog polja. Kod jakih polja ono je kraće od vremena života spinskih pobudjenja, dok je u odsustvu polja približno istog reda veličine kao i vreme života. Na osnovu ovoga došlo se do zaključka da se SF efekti mogu očekivati u eksitonskom sistemu dok je za ove efekte u spinskom sistemu neophodno prisustvo jakog spoljašnjeg magnetnog polja.

2. Analizom efekata rasejanja eksitona na eksitonu pokazano je da oni dovode do pojave SF. Nadjen je spektar SF pobudjenja i pokazano je da ima pozitivan minimum fazne brzine. Ovaj spektar je veoma sličan spektru tečnog He^4 koji je izložen u teoriji Bogoljubova.

3. Usrednjavanjem jednačine kretanja za eksitone i magnone (spinski sistem je u jakom magnetnom polju) po koherentnim stanjima sistema dobijena je jednačina kretanja koja

je istog tipa kao i jednačina koja opisuje SF kretanje tečnosti. SF transfer kvazičestica sa pozitivnom efektivnom masom uzrokuje negativan znak nelinearnog člana u kubnoj Šredingerovoj jednačini. Fizički proces koji kod pomenutih kvazičestica čini ovaj znak negativnim je rasejanje na δ -potencijalu, po modelu tvrdih sfera.

4. Nadjeni su izrazi za hamiltonijane efektivne eksiton-eksiton i spin-spin interakcije koji nastaju usled virtuelne razmene fonona. Za 1d strukture je pokazano da je ova interakcija, u globalu, privlačna i da je, samim tim, obrazovanje kvazičestičnih kaplji (BAK) moguće.

5. Za 1d strukture predložen je metod za egzaktno rešavanje jednačine koja definiše gep elementarnih pobudjenja nastalih raspadom kvazičestičnih kaplji. Metod je primenjen na eksitonski sistem i pokazano je da pomenute elementarne ekscitacije imaju pozitivan minimum fazne brzine, što prema opštem kriterijumu, stvara potrebne uslove za SF transfer. Analogna jednačina za sistem spinskih talasa u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja dala je spektar elementarnih pobudjenja koja nemaju pozitivan minimum fazne brzine.

6. Napred pomenuti metod rešavanja gep jednačine primenjen je na sistem elektrona u 1d metalnoj strukturi. Pokazano je da u okolini graničnog Fermi impulsa gep ima zanemarljivo malu vrednost i da se, prema tome, u ovakvim strukturama ne mogu očekivati observabilni SP efekti. Interesantno je da se u izvesnim slučajevima može pojaviti relativno visok gep u oblasti malih impulsa ($k \approx 5 \cdot 10^{-3} k_F$). Diskutovane su posledice prisustva ovakvog gepa i konstatovano je da bi on mogao da dovede do sužavanja Fermi sloja, što bi, sa svoje strane, znatno poboljšalo provodne osobine sistema.

7. Formirane su solitonske jednačine za molekularne kristale i Hajzenbergove feromagnete i analiziran je slučaj

kada brzina solitona postaje veća od brzine zvuka u sistemu. Konstatovano je da se, u ovom slučaju, soliton gubi, a umesto njega pojavljuje elementarna ekscitacija koja ima pozitivan minimum fазне brzine, dakle zadovoljava mikroteorijski kriterijum SF. Takodje treba istaći da, u ovom slučaju, jednačina kretanja po kvazičestičnim amplitudama dobija formu jednačine za SF kretanje tečnosti, dakle pobudjenja zadovoljavaju i makroteorijski kriterijum SF. Sve pomenuto u eksitonskom sistemu uvek važi, dok je za spinski sistem neophodno prisustvo jakog spoljašnjeg magnetnog polja.

8. Nadjeni su energetski spektri vezanih stanja dva eksitona i vezanih stanja dva magnona u uslovima kada, pored čiste kvazičestične interakcije, deluje i efektivna interakcija nastala virtuelnom razmenom fonona. Prisustvo efektivne interakcije dovodi do pojave novih kvazičestica sa slabim relativnim kretanjem. Pored ovih kvazičestica obrazuju se i vezana stanja sa istim zakonom disperzije kao i u slučaju kada se efektivna interakcija ne obračunava.

Rezimirajući dobijene rezultate može se zaključiti da je SF transfer u eksitonskom sistemu uvek moguć, dok je u sistemu spinskih talasa uvek uslovljen prisustvom jakog spoljašnjeg magnetnog polja. Takodje se vidi da čitav niz različitih mehanizama (nelinearni efekti, efektivna interakcija, solitonski mehanizam itd.) može da dovede do obrazovanja BAK i do pojave kvazičestične SF. Medjutim, ostaje otvoreno pitanje kojim bi se spoljnim mehanizmom izazvalo kretanje kondenzata, jer je ovo veoma važno ne samo zbog eksperimentalne provere dobijenih teorijskih rezultata, već i zbog moguće praktične primene ovog efekta. Nema sumnje da će ovo, kao i ostala tehnička pitanja, u budućnosti biti rešeni, a najveća satisfakcija bi bila ako bi ovde prezentirani rezultati inicirali nove napore za eksperimentalnu potvrdu, a kasnije i praktičnu primenu, superfluidnosti kvazičestičnih sistema.

PRILOZI

Ova teza tretira problem superfluidnog transfera čestica i kvazičestica u metalima, magneticima i izolatorima. Kako je sam akt analize pojedinih od ovih struktura dug i obiman, pogotovo kad se radi o kvazičestičnim sistemima, da se ne bi izgubila usmerena nit istraživanja opterećivanjem ogromnim uvodnim delovima i detaljima (i onako ih ima dosta), elementi teorije posmatranih sistema kao i programi za numeričku obradu podataka izdvojeni su u posebne paragrafe (par. 14 i 15, respektivno).

Nesumnjivo je da elektroni, magnoni, eksitoni i fononi čine takve sisteme za koje su, ponaosob, napisane mnoge monografije, čitavi udžbenici fizike čvrstog stanja. Obimnost literature omogućuje teorijsko predstavljanje ovih sistema u znatno skromnijem obimu. Bez obzira na to ovi paragrafi (14.1 do 14.7) čine jedan sastavni deo i kompletiraju sliku o eventualno mogućim SF osobinama posmatranog sistema.

Nasuprot ovome, paragrafi za numeričko računanje nisu neizostavljivi deo ove teze. Međutim, uzevši u obzir da se savremena nauka ne može odvojiti od pomoći-moćnih računarskih sistema, kao i moguću primenu ovih programa na druge slične ili srodne probleme, smatrano je da bi bilo dobro da i oni nadju svoje mesto, bar kao jedan od priloga ovoj tezi.

14. ELEMENTI TEORIJE POSMATRANIH SISTEMA

U ovom paragrafu će biti ukratko izloženi osnovi teorije sistema koji se tretiraju u ovoj tezi: eksitoni, magnoni i elektroni. Ključnim uzrokom "neobičnog" ponašanja molekularnih, feromagnetnih i metalnih sistema se javljaju fononi, odnosno, jedinstven uticaj mehaničkih vibracija elementarnih ćelija (sastavljenih iz atoma ili molekula) kristalne rešetke. S obzirom na veoma obimnu gradju koju treba prezentirati u ovom paragrafu izbegnuti su detalji, ali se oni mogu naći u citiranoj literaturi.

14.1 Fononi

Atomi ili molekuli kristala osciluju oko svojih ravnotežnih položaja zbog elastičnih sila kojima na svaki atom (molekul) deluju ostali iz kristalne rešetke. Ove, tzv. oscilacije kristalne rešetke, su jedne od osnovnih pobudjenja u čvrstim telima, te se mogu naći u svim monografijama čvrstog stanja (npr. [84 do 87 i 90]), statističkim fizikama [4, 12, 49], kvantnim mehanikama [40, 165] pa i teorijskim fizikama [83, 173].

U okviru klasične mehanike problem oscilovanja kristalne rešetke rešava se razmatranjem sistema od N oscilujućih čestica i nalaženjem normalnih moda, normalnih koordinata i normalnih frekvencija oscilovanja.

U kvantnomehaničkom smislu oscilacije kristalne rešetke predstavljaju sistem uzajamno povezanih oscilatora. Zbog ove povezanosti jedan atom (molekul) pri svom oscilovanju "oseća" uticaj oscilovanja svih ostalih. Može se to i ovako predstaviti: kristal je "zamrznut" i svi atomi miruju u ravnotežnim položajima; ako se jedan od njih na neki način

(mehanički, temički, ...) pobudi na oscilovanje, zbog povezanosti, ovo kretanje se prenosi na susjedni atom, sa njega na drugi, itd. - formira se mehanički talas u kristalu, a elementarno pobudjenje ovog tipa je fonon. Znači, fonon nije oscilatorno pobudjenje jednog atoma već kvant oscilovanja celog kristala.

Razvijanjem potencijalne energije "zamrznutog" kristala proste kubne strukture ([12], str. 89 do 96):

$$W = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n} - \vec{m}),$$

($V(\vec{n}-\vec{m}) = V(\vec{m}-\vec{n})$) je energija interakcije između atoma na mestu \vec{n} i \vec{m} po malim pomerajima atoma iz ravnotežnih položaja ($\vec{n} + \vec{u}_n^+$):

$$(14.1) \quad \vec{u}_n^+ = \sum_{\vec{k}} \sum_{j=1}^s \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\vec{k})}} \vec{x}_j(\vec{k}) [b_j(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{n} - i\omega_j(\vec{k})t} + \text{h.c.}],$$

problem povezanih oscilatora, čiji je hamiltonijan

$$(14.2) \quad H = \sum_{\vec{n}} \frac{M}{2} \dot{\vec{u}}_n^+(t)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V\{(\vec{n}-\vec{m}) + [\vec{u}_n^+(t) - \vec{u}_m^+(t)]\},$$

svodi se na problem uzajamno nezavisnih oscilatora sa hamiltonijanom:

$$(14.3) \quad \hat{H} = \sum_{\vec{k}} H_{\vec{k}}; \quad H_{\vec{k}} = [b_j^+(\vec{k})b_j(\vec{k}) + \frac{1}{2}] \epsilon_j(\vec{k}).$$

U formulama (14.1 - 14.3) M i N su masa i broj atoma (molekula) u kristalu, respektivno, a $b_j^+(\vec{k})$ i $b_j(\vec{k})$ - Boze operatori kreacije, odnosno anihilacije fonona sa energijom $\hbar\omega_j(\vec{k})$. Kvanti mehaničkih pobudjenja sa linearnim zakonom disperzije:

$$(14.4) \quad \epsilon_j(\vec{k}) = \hbar v_j k,$$

nazivaju se akustičkim fononima.

Frekvencije oscilovanja ovih fonona su linearne funkcije talasnog vektora ([12], str. 93):

$$\omega_j(\vec{k}) = v_j k, \quad v_j = a(c_{jj}/M)^{1/2}, \quad j = (x, y, z),$$

gde je v_j - komponenta brzine zvučnih talasa u kristalu (jer mehaničke oscilacije sredine nisu ništa drugo do prostiranje zvuka kroz posmatranu sredinu). Vidi se da ona zavisi od karakteristika kristala: mase atoma, konstante rešetke (a) i Hukovih konstanti elastičnosti (c_{jj}).

Ako se na sličan način analizira kristal složene strukture (N elementarnih ćelija sa po σ atoma u svakoj ćeliji) umesto 3, dobijaju se 3σ rešenja za frekvencije sistema (j uzima vrednosti: $1, 2, 3, \dots, 3\sigma$) od kojih su uvek 3 akustičke ($\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \omega_A(\vec{k}) = 0$), a preostale $3(\sigma-1)$ - optičke ($\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \omega_O(\vec{k}) \neq 0$). Veličine $\vec{\xi}_j(\vec{k})$, $j = 1, 2, 3$, su ortovi polarizacije fonona; pri tom je jedan ($\vec{\xi}_L(\vec{k})$) kolinearan sa \vec{k} , i to su tzv. longitudinalni zvučni talasi, dok su druga dva ($\vec{\xi}_{T1,2}(\vec{k})$) normalni na \vec{k} , te odgovaraju transverzalnim zvučnim talasima.

14.2. Frenkelovi eksitoni

Optičke pobudjenja ove vrste, tzv. eksitoni malog radiusa [174], javljaju se uglavnom u molekularnim kristalima tipa antracena, naftalina, benzola i sl. (za razliku od Vanije-Motovih ili eksitona velikog radiusa [175], koji se najčešće javljaju kod poluprovodničkih kristala).

Molekularnim eksitonima posvećeno je nekoliko monografija [108, 176, 177] zato će ovde biti navedene samo njihove glavne osobine.

Molekularni kristali su tekvi kristali kod kojih su sile interakcije izmedju pojedinih molekula (Van der Valsove sile) mnogo manje od sila interakcije izmedju atoma i elektrona unutar molekula (valentne sile). Zbog toga molekuli imaju ne-

ku svoju individualnost, a najniže elektronsko pobudjenje nastalo osvetljavanjem takvog kristala može se, u nultoj aproksimaciji, razmatrati kao stanje u kojem je samo jedan molekul pobudjen dok su svi ostali molekuli u osnovnom stanju. Ovo pobudjenje prenosi se silama dipol-dipolne interakcije sa čvora na čvor kroz ceo kristal i rasprostire u vidu talasa, eksitona (detaljnije videti u citiranim monografijama). Energije Frenkelovih eksitona su reda veličine nekoliko eV (isto kao i izolovanog molekula), od čega na doprinos usled dipol-dipolnih interakcija otpada oko 1%.

U opštem slučaju eksitonski hamiltonijan se može napisati u obliku (detaljno izvodjenje ovog hamiltonijana je dato u [178], gde je izvršen prelaz od elektronskih operatera na kvazi-Pauli operatore i dobijena operatorska forma "stabilizovana" minimiziranjem energije osnovnog stanja; u ovom procesu nestaju forme linearne po kvazi-Pauli operatorima):

$$(14.5) \quad H = H_0 + H_2 + H_3 + H_4,$$

gde su:

$$(14.6) \quad \begin{aligned} H_0 &= LN[E_0 + \frac{1}{2} W(00,00)], \\ H_2 &= \sum_{\vec{s}} \sum_{\mu, \nu=1}^M \Delta(\mu, \nu) P_{\mu\vec{s}}^+ P_{\nu\vec{s}} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{s}, \vec{s}'} \sum_{\mu, \nu=1}^M X_{\vec{s}\vec{s}'}(\mu, \nu) P_{\mu\vec{s}}^+ P_{\nu\vec{s}'} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{s}, \vec{s}'} \sum_{\mu, \nu=1}^M [Y_{\vec{s}\vec{s}'}(\mu, \nu) P_{\nu\vec{s}'}^+ P_{\mu\vec{s}} + \text{h.c.}], \\ H_3 &= \sum_{\vec{s}, \vec{s}'} \sum_{\mu, \mu', \nu=1}^M [Z_{\vec{s}\vec{s}'}(\mu, \mu', \nu) P_{\mu\vec{s}}^+ P_{\mu'\vec{s}} P_{\nu\vec{s}'} + \text{h.c.}], \\ H_4 &= \sum_{\vec{s}, \vec{s}'} \sum_{\mu, \mu'=1}^M \sum_{\nu, \nu'=1}^M T_{\vec{s}\vec{s}'}(\mu, \mu', \nu, \nu') P_{\mu\vec{s}}^+ P_{\mu'\vec{s}} P_{\nu\vec{s}'}^+ P_{\nu'\vec{s}'}. \end{aligned}$$

Ovde su upotrebljene oznake:

$$\begin{aligned}
 W(\mu\mu', \nu\nu') &= \sum_{\vec{s}} V_{\vec{s}\vec{0}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu\mu', \nu\nu'), \\
 \Delta(\mu, \nu) &= [E_{\mu} - E_{\nu} - W(00, 00)]\delta_{\mu\nu} + \\
 &+ \frac{1}{2}[W(\mu\nu, 00) + W(00, \mu\nu)], \\
 X_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu, \nu) &= \frac{1}{2}[V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu 0, 0\nu) + V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(0\nu, \mu 0)], \\
 Y_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu, \nu) &= V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(0\mu, 0\nu), \\
 Z_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu, \mu', \nu) &= \frac{1}{2}[V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu\mu', \nu 0) + V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\nu 0, \mu\mu')], \\
 T_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu, \mu', \nu, \nu') &= \frac{1}{2}[V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu\mu', \nu\nu') + \\
 (14.7) \quad &+ V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(00, 00)\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} - V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu\mu', 00)\delta_{\nu\nu'} - \\
 &- V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(00, \mu\mu')\delta_{\nu\nu'}], \\
 V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu\mu', \nu\nu') &\equiv V_{\vec{s}\vec{s}}^{\rightarrow\rightarrow}(\mu'\mu, \nu'\nu) = \\
 &= \int d\vec{\xi}_{\vec{s}} d\vec{\xi}_{\vec{s}'} \varphi_{\mu}^*(\vec{\xi}_{\vec{s}}) \varphi_{\nu}(\vec{\xi}_{\vec{s}'}) \times D(|\vec{s}-\vec{s}'|) \varphi_{\nu'}(\vec{\xi}_{\vec{s}'}) \varphi_{\mu'}(\vec{\xi}_{\vec{s}}), \\
 D(|\vec{s}-\vec{s}'|) &= |\vec{s}-\vec{s}'|^{-5} \{ |\vec{s}-\vec{s}'|^2 (\vec{d}_{\vec{s}} \vec{d}_{\vec{s}'}) - \\
 &- 3[\vec{d}_{\vec{s}}(\vec{s}-\vec{s}')][\vec{d}_{\vec{s}'}(\vec{s}-\vec{s}')]\}, \\
 \hat{H}_M \varphi_{\mu}(\vec{\xi}_{\vec{s}}) &= E_{\mu} \varphi_{\mu}(\vec{\xi}_{\vec{s}}), \\
 \vec{d}_{\vec{s}} &= e \vec{\xi}_{\vec{s}},
 \end{aligned}$$

pri čemu su: N - broj elementarnih ćelija u kristalu, L - broj molekula u elementarnoj ćeliji, e - elementarno naelektrisanje elektrona, \hat{H}_M je hamiltonijan izolovanog molekula, a φ - njegove svojstvene funkcije (podrazumeva se da su φ - svojstvene

funkcije elektronskog podsistema datog molekula; vibracioni i rotacioni efekti se zanemaruju), dok su P^+ i P - operatori kreacije i anihilacije eksitona. To su kvazi-Pauli operatori:

$$P_{\mu\vec{s}}^+ = \alpha_{\mu\vec{s}}^+ \alpha_{0\vec{s}}, \quad P_{\mu\vec{s}} = \alpha_{0\vec{s}}^+ \alpha_{\mu\vec{s}},$$

gde oni predstavljaju produkte Fermi operatora koji kreiraju i anihiliraju elektrone u pobudjenom stanju μ i osnovnom stanju 0 u molekulu na mestu $\vec{s} \equiv \vec{n} + \vec{p}_j$ ($j = 1, 2, \dots, L$). U delu fermionskog Hilbertovog prostora, koji je odredjen uslovom:

$$\sum_{\mu=0}^M \alpha_{\mu\vec{s}}^+ \alpha_{\mu\vec{s}} = 1,$$

(M je broj pobudjenih stanja elektrona), kvazi-Pauli operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[P_{\mu\vec{s}}, P_{\mu'\vec{s}'}^+] = \delta_{\vec{s}\vec{s}'} [\delta_{\mu\mu'} (1 - \sum_{\nu=1}^M P_{\nu\vec{s}}^+ P_{\nu\vec{s}}) - P_{\mu\vec{s}}^+ P_{\mu'\vec{s}'}],$$

(14.8)

$$[P_{\mu\vec{s}}, P_{\mu'\vec{s}'}] = 0, \quad P_{\mu\vec{s}} P_{\mu'\vec{s}'} = 0, \quad P_{\mu\vec{s}} P_{\mu'\vec{s}'}^+ = 0 \quad (\mu \neq \mu').$$

U slučaja proste rešetke (jedan molekul po elementarnoj ćeliji) i dvonivovske šeme (optički aktivan elektron može da dođe samo u jedno pobudjeno stanje f , ili da ostane u nepobudjenom stanju 0) eksitonski hamiltonijan ima oblik [50]:

$$(14.9) \quad H_e = H_0^e + H_2^e + H_3^e + H_4^e,$$

gde su:

$$H_0^e = N[E_0 + \frac{1}{2}W(00,00)],$$

(14.10a)

$$H_2^e = \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}, \vec{m}} Y_{\vec{n}\vec{m}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}^+ + P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}),$$

$$H_3^e = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} Z_{nm}^{\leftrightarrow} (P_m^{\dagger} P_n^{\dagger} P_n^{\rightarrow} + P_n^{\dagger} P_n^{\rightarrow} P_m^{\rightarrow}),$$

(14.10b)

$$H_4^e = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} T_{nm}^{\leftrightarrow} P_n^{\dagger} P_n^{\rightarrow} P_m^{\dagger} P_m^{\rightarrow},$$

a upotrebljene su oznake:

$$\begin{aligned} \Delta &= E_f - E_0 - W(00,00) + \frac{1}{2}[W(ff,00) + W(00,ff)], \\ X_{nm}^{\leftrightarrow} &= V_{nm}^{\leftrightarrow}(f0,0f) = V_{nm}^{\leftrightarrow}(0f,f0), \\ Y_{nm}^{\leftrightarrow} &= \frac{1}{2}V_{nm}^{\leftrightarrow}(f0,f0) = \frac{1}{2}V_{nm}^{\leftrightarrow}(0f,f0), \\ Z_{nm}^{\leftrightarrow} &= \frac{1}{2}[V_{nm}^{\leftrightarrow}(ff,f0) + V_{nm}^{\leftrightarrow}(f0,ff)] = \\ &= \frac{1}{2}[V_{nm}^{\leftrightarrow}(ff,0f) + V_{nm}^{\leftrightarrow}(0f,ff)], \\ (14.11) \quad T_{nm}^{\leftrightarrow} &= \frac{1}{2}[V_{nm}^{\leftrightarrow}(ff,ff) + V_{nm}^{\leftrightarrow}(00,00) - \\ &\quad - V_{nm}^{\leftrightarrow}(ff,00) - V_{nm}^{\leftrightarrow}(00,ff)], \end{aligned}$$

$$W(\mu\mu', \nu\nu') = \sum_{\vec{n}} V_{n0}^{\leftrightarrow}(\mu\mu', \nu\nu'),$$

$$V_{nm}^{\leftrightarrow}(\mu\mu', \nu\nu') = \int d\vec{\xi}_n^{\dagger} d\vec{\xi}_m^{\dagger} \varphi_{\mu}(\vec{\xi}_n^{\dagger}) \varphi_{\nu}(\vec{\xi}_m^{\dagger}) D(|\vec{n}-\vec{m}|) \varphi_{\nu'}(\vec{\xi}_n^{\dagger}) \varphi_{\mu'}(\vec{\xi}_m^{\dagger})$$

$$\begin{aligned} D(|\vec{n}-\vec{m}|) &= |\vec{n}-\vec{m}|^{-5} (|\vec{n}-\vec{m}|^2 \vec{d}_n^{\dagger} \vec{d}_m^{\dagger} - \\ &\quad - 3[\vec{d}_n^{\dagger}(\vec{n}-\vec{m})][\vec{d}_m^{\dagger}(\vec{n}-\vec{m})]), \end{aligned}$$

$$\hat{H}_M \varphi_{\mu}(\vec{\xi}_n^{\dagger}) = E_{\mu} \varphi_{\mu}(\vec{\xi}_n^{\dagger}), \quad (\mu = 0, f), \quad \vec{d}_n^{\dagger} = e \vec{\xi}_n^{\dagger}.$$

U formulama (14.6 do 14.8) N je broj molekula u kristalu, a P^{\dagger} i P su Pauli operatori koji zadovoljavaju sledeće komutaci-

one relacije:

$$[P_n^+, P_m^\dagger] = (1 - 2P_n^\dagger P_n^+) \delta_{nm}, \quad (14.12)$$

$$[P_n^+, P_m^+] = 0, \quad P_n^2 = 0.$$

Zbog nedefinisane statistike pauliona prelazi se na bozonsku sliku (a i ispituju se kolektivne osobine). Egzaktna bozonska reprezentacija Pauli operatora (data u [63]) glasi:

$$P_n^+ = \left[\sum_{\rho=0}^{\infty} \frac{(-2)^\rho}{(1+\rho)!} B_n^\dagger{}^\rho B_n^\rho \right]^{1/2} B_n^+, \quad (14.13)$$

$$P_n^+ P_n^+ = \sum_{\rho=0}^{\infty} \frac{(-2)^\rho}{(1+\rho)!} B_n^\dagger{}^{\rho+1} B_n^{\rho+1}$$

Hamiltonijan (14.6) sa (14.7, 14.8, 14.10 i 14.11) je osnovni eksitonski hamiltonijan koji se tretira u ovoj tezi. Karakteristične veličine i vrednosti parametara posmatranog sistema (molekularni kristali tipa antracena - prema [108]) su:

$$\Delta = 5 \cdot 10^{-19} \text{ J}, \quad m_e = 10^{-30} \text{ kg},$$

$$|X| = |Y| = 10^{-20} \text{ J}, \quad a \approx 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

14.3. Eksiton-fonon interakcija u molekularnim kristalima

Za razliku od "standardne" definicije eksiton-fonon interakcije (videti u [108, 176 i 177]) ovde će biti prezentirana eksiton-fonon interakcija kao posledica lokalne deformacije elektromagnetnog polja uzrokovane oscilacijama molekula kristalne rešetke [129 i 130]. Ovaj prilaz odgovara veoma

jakom eksiton-fonon kuplovanju ([177], str. 149 do 164).

Eksitonski hamiltonijan (videti par. 14.2 i jednačine (14.9 i 14.10), u kojima se sa P predje na B pomoću (14.13) u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji - [108], str. 77) može da se napiše u obliku:

$$(14.14) \quad H_{ex} = H_{\Delta} + H_X + H_Y$$

gde su:

$$(14.15) \quad H_{\Delta} = \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{n}} \equiv \Delta \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \delta_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}},$$

$$H_X = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} X_{\vec{m}\vec{n}} B_{\vec{m}}^{\dagger} B_{\vec{n}}$$

$$H_Y = \sum_{\vec{n}, \vec{m}} Y_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}}.$$

Prisustvo molekulskih oscilacija uvodi se perturbacijom ravnotežnih molekulskih položaja: $\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}}$, za mali poremećaj akustičkih fonona (videti paragraf 14.1 i jednačinu (14.1)):

$$(14.16) \quad \vec{u}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{q}} (\hbar/2MN\omega_{\vec{q}})^{1/2} \vec{\epsilon}_{\vec{q}} (b_{-\vec{q}} + b_{\vec{q}}^{\dagger}) e^{i\vec{q}\vec{n}}.$$

Razvijajući matricele elemente

$$X_{\vec{n}\vec{m}} \rightarrow X_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}, \vec{m}+\vec{u}_{\vec{m}}}, \quad Y_{\vec{n}\vec{m}} \rightarrow Y_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}, \vec{m}+\vec{u}_{\vec{m}}},$$

i Kronekerov simbol:

$$\delta_{\vec{n}\vec{m}} \rightarrow \delta_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}, \vec{m}+\vec{u}_{\vec{m}}},$$

po ovim pomerajima i prelazeći u \vec{k} - prostor, autori radova [129 i 130] su uspeli da redefinišu eksiton-fonon interakciju:

$$H_{\text{int}} = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} F_{\vec{k}, \vec{q}}^{\dagger} B_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} B_{\vec{k}} (b_{-\vec{q}} + b_{\vec{q}}^{\dagger}), \quad (14.17)$$

$$F_{\vec{k}, \vec{q}}^{\dagger} = i(\hbar/2Mv_{\text{S}}q)^{1/2} \vec{k} \cdot \vec{q} \{ \vec{q}(\Delta + X_{\text{O}} + X_{\vec{q}}^{\dagger}) + (\vec{k}-\vec{q}) Y_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} - \vec{k} Y_{\vec{k}} \}.$$

Jasno se vidi da najveći uticaj imaju longitudinalni fononi ($\vec{q} \parallel \vec{q}$), a da najveći doprinos ima član

$$F_{\vec{q}}^{\dagger} = i\Delta (\hbar/2Mv_{\text{S}}q)^{1/2} (\vec{q} \parallel \vec{q}), \quad (14.18)$$

jer sadrži "veliku" energiju izolovanog molekula Δ . U standardnoj definiciji ovog člana nema. (Ovakvim prikazom eksiton-fonon interakciji uspešno se objašnjava Urbahovo pravilo [179]). Karakteristične vrednosti parametara eksiton-fonon interakcije su: $M \approx 10^{-25}$ kg i $v_{\text{S}} \approx 5 \cdot 10^2$ m/s (ostale vrednosti su definisane u prethodnom paragrafu).

14.4 Feromagnetni magnoni

Magnetizam je univerzalno svojstvo materije koje potiče od orbitalnog kretanja naelektrisanja i od spina čestica. Izvori magnetizma su elementarni nosioci magnetnih momenata (elektroni, protoni, neutroni), njihove kombinacije (atomska jezgra, elektronski omotači) i kombinacije tih kombinacija (atomi, molekuli, ..., makroskopska tela). Ovoj oblasti fizike čvrstog stanja posvećeno je više monografija (npr. [124 ili 144 do 145]).

Predmet izučavanja, ovde, su samo jaki magnetni materijali -

feromagnetici, koji pored velike pozitivne magnetne susceptibilnosti (ispod Kirijjeve tačke - [153], gl. 1) poseduju, za razliku od dijamagnetika i paramagnetika, i tzv. spontanu magnetizaciju (detaljnije videti u citiranim monografijama, ili u [84], gl. 16). Broj ovih materijala nije velik, velikim makroskopskim magnetnim momentom odlikuju se samo neki od prelaznih elemenata - metali (Fe, Co, Ni, Pt, Cr, Mn), zatim neki od elemenata iz grupe retkih zemalja - lantanida (Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tu) i legure gvoždja, nikla i kobalta.

Prihvatajući Veberovu ideju o magnetiku kao skupu uredjenih elementarnih magnetića koji se razuredjuju toplotom ili mehaničkim dejstvom, savremena mikroteorija imala je zadatak da utvrdi: koji su to uredjeni elementi i kakva je priroda sila koje izmedju njih deluju. Na osnovu eksperimenata, poznavanja strukture omotača atoma i korišćenjem empirijskog Hundovog pravila (koje glasi (npr. [146], str. 28): najmanju energiju (osnovno stanje) ima term sa najvećom (pri zadataj konfiguraciji) vrednošću sumarnog spina $S = \sum m_s$ i najvećim (pri ovoj vrednosti S) sumarnim orbitalnim momentom L , sve u granicama koje dopušta Paulijev princip), odgovor na ovo pitanje relativno lako je nadjen: elementi odgovorni za pojavu jakog magnetizma su spinovi elektrona iz nepopunjenih 3d ljuski (za metale), odnosno 4f (za lantanide). Spinovi elektrona ovih ljuski obrazuju jedan efektivni spin koji odstupa vrlo malo od sumarnog spina u slučaju kada su atomi vezani u kristal. Upravo taj efektivni spin atoma, koji je i eksperimentalno potvrđen, predstavlja elementarni magnetić, odnosno domen, iz Veberove teorije. Odgovor na drugo pitanje definitivno nije nadjen. Ispostavilo se da je konstanta dipol-dipolnih interakcija (Vejsova teorija, npr. [84], gl. 6 ili [180], str. 119), magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljuski reda 10^{-22} J, a eksperimenti daju da su energije faznih prelaza za feromagnetike od oko 10^{-21} J (za lantanide) do oko 10^{-20} J (za metale). Pošto interakcije dovode do razuredjivanja skupa spinova, energije faznog prelaza će biti

istog reda veličine kao i konstante interakcije. Mnogo veći uspeh ima ideja koja kaže da su za magnetizam odgovorne električne (kulonovske) sile između elektrona i da su interakcije između spinova elektrona čisto kvantnomehaničkog porekla (HF, npr. u [40], gl. 8). Naime, srednja vrednost energije interakcije između dva elektrona, usled antisimetričnih talasnih funkcija (zbog Paulijeveg principa), dobija jedan dopunski član - energiju izmene. Ona je reda 10^{-21} do 10^{-20} J i to je potpuno slaže sa eksperimentalnim činjenicama.

Prema Hajzenbergovom modelu, feromagnetik je sistem uređenih efektivnih spinova atoma (vektorskih veličina), smeštenih u čvorovima kristalne rešetke, koji između sebe interaguju kvantnomehaničkim silama izmene. Na apsolutnoj nuli svi ovi spinovi su međusobno paralelni (pravac spinova je tzv. osa magnetizacije) i upereni su u istom smeru. Povišenjem temperature ili nekim spoljašnjim (mehaničkim i sl.) dejstvom uređen sistem spinova odstupa od ose kvantizacije - razuređuje se. Totalno narušenje uređenosti spinova dešava se na Kirijevoj temperaturi (detalje videti npr. u [181], par. 3) iznad koje kristal egzistira u paramagnetnoj fazi.

Štaviše, na $T = 0$ K svi spinovi atoma feromagnetika imaju istu orijentaciju koja odgovara minimumu njegove energije (osnovno stanje, u skladu sa Hundovim pravilom i Paulijeveg principom). Ako se na bilo koji način promeni orijentacija spina jednog atoma, ta promena, zbog interakcije izmene, neće ostati lokalizovana na polaznom atomu već će se prenositi od atoma do atoma, tj. rasprostiraće se u vidu talasa - spinskog talasa. Sa porastom temperature raste intenzitet talasa "zaljuljanih" spinova. Elementarna pobudjenja u spinskom sistemu, koja se rasprostiru u vidu spinskih talasa, nazivaju se magnonima ([145], gl. 2 i 5).

Hamiltonijan izotropnog HF, koji ima prostu kubnu strukturu i jedan atom po elementarnoj ćeliji, u spoljašnjem magnetnom polju, a na osnovu svega napred izloženog, može se napisati u sledećem obliku ([86], str. 105):

$$(14.19) \quad \hat{H} = -\mu\hbar \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}^{\pm\pm} \vec{S}_{\vec{n}}^{\pm} \vec{S}_{\vec{m}}^{\pm}.$$

Pravac z-ose kristala bira se u pravcu magnetnog polja jačine H . Veličine $I_{\vec{n}\vec{m}}^{\pm\pm}$ su integrali izmene, u teoriju ulaze kao fenomenološke veličine (smatra se da eksponencijalno opadaju sa rastojanjem $|\vec{n}-\vec{m}|$, zna se da je $I_{\vec{n}\vec{m}}^{\pm\pm} \equiv I_{\vec{n}-\vec{m}}^{\pm\pm} = I_{\vec{m}\vec{n}}^{\pm\pm}$; $I_0 = 0$; detaljnije u [86], str. 105) a reda su 10^{-20} J (za jake feromagnetike) do 10^{-21} J (za lantanide) za najbliže susede. Magnetni moment atoma μ predstavlja efektivnu sumu Borovih magnetona za elektrone ($Z_{\text{eff}} g \mu_B$; gde je $Z_{\text{eff}} \ll 10$, g - Landeov faktor: $g = 1$ za orbitalne momente i $g = 2$ za spinove). Spinski operatori \vec{S} zadovoljavaju sledeće komutacione relacije za svoje komponente:

$$[S_{\vec{n}}^x, S_{\vec{n}}^y] = i\hbar \epsilon_{k\ell m} S_{\vec{n}}^m \delta_{\vec{n}\vec{n}}, \quad (k, \ell, m) = (x, y, z).$$

Hamiltonijan (14.11) najčešće se izražava preko operatora S^+ i S^- ($S^{\pm} = S^x \pm S^y$) koji smanjuju, odnosno, povećavaju z-projeksiju spina za vrednost \hbar . Zgodno je, takodje, uvesti operator $S - S^z$ koji predstavlja meru odstupanja z-projeksije spina od njene maksimalne vrednosti S . Tako napisan spinski hamiltonijan ima oblik ([12], str. 98):

$$(14.20) \quad \hat{H} = -\mu N \hbar S - \frac{1}{2} N S^z J_0 + \sum_{\vec{n}} (\mu \hbar + S J_0) (S - S_{\vec{n}}^z) - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}^{\pm\pm} \vec{S}_{\vec{n}}^{\pm} \vec{S}_{\vec{m}}^{\pm} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}^{\pm\pm} (S - S_{\vec{n}}^z) (S - S_{\vec{m}}^z),$$

gde je $J_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}\vec{o}} I_{\vec{n}\vec{o}}^{\pm\pm} e^{-i\vec{k}\vec{n}}$, N - broj atoma u kristalu. Operatori kreacije S^- i anihilacije magnona S^+ zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[S_{\vec{n}}^+, S_{\vec{m}}^-] = 2N S_{\vec{n}}^z \delta_{\vec{n}\vec{m}}; \quad [S_{\vec{n}}^+, S_{\vec{m}}^-] = 2[N^2 S(S+1) - (S_{\vec{n}}^z)^2] \delta_{\vec{n}\vec{m}}.$$

Vidi se da one nisu ni božonskog ni fermionskog tipa. U slučaju spina $S = 1/2$ to su Pauli operatori ([124], str. 57 i [182]):

$$(14.21) \quad S^- = P^+, \quad S^+ = P_-, \quad \frac{1}{2} - S^z = P^+P_-,$$

(postoji i božonska reprezentacija spinskih operatora [183] za slučaj $S = 1/2$), a u slučaju $S > 1/2$ oni se mogu izraziti preko kvazi-Pauli operatora [184]; takodje postoji jednobozonska [140] i multibozonska [185] reprezentacija spinskih operatora kod $S > 1/2$.

U ovoj tezi analizira se HF 1/2 tako da se efektivni hamiltonijan ovog sistema, (14.12) sa (14.13), može napisati u obliku ([12], str. 101):

$$(14.22) \quad H = \sum_{\vec{n}} (\mu H + I) P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}, \vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{m}}.$$

Pauli operatori P^+ i P^- zadovoljavaju komutacione relacije (14.9) i mogu se egzaktno izraziti preko Boze operatora (14.10). Veličina $I \equiv I_{\vec{n}, \vec{n}+\vec{\lambda}}^+ = I_{\vec{n}, \vec{n}-\vec{\lambda}}^+$ je integral izmene za najbliže susede ($\vec{\lambda}$ je vektor koji spaja dva najbliža suseda u spinskoj rešeci).

Karakteristične vrednosti parametara feromagnetnog sistema, opisanog pomoću hamiltonijana (14.22), dakle za spin $S = 1/2$, su: $I = 5 \cdot 10^{-21}$ J, $m_m = 10^{-29}$ kg, $a = 3 \cdot 10^{-10}$ m, $\mu = 10^{-22}$ Am².

14.5. Magnon-fonon interakcija u feromagnetizima

Interakcija spinskih talasa sa atomima kristalne rešetke feromagnetika izučava se u literaturi (npr. [4, 86, 124, 146]) u dvojakom vidu: kao interakcija između magnona posredstvom fonona i kao interakcija između fonona i magno-

na (detalje videti npr. u [145], par 26 do 28).

Hamiltonijan izotropnog HF 1/2 dat je jednačinom (14.22) u prethodnom paragrafu. Ukoliko se izvrši prelaz na Boze operatore pomoću (14.13) i zadrže samo kvadratni članovi po ovim operatorima (za određivanje interakcije to je dovoljno), on ima oblik:

$$(14.23) \quad H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}}^{\dagger} B_{\vec{m}}^{\dagger}.$$

Atomi feromagnetika osciluju oko svojih ravnotežnih položaja, te treba izvršiti prelaz: $\vec{n} \rightarrow \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}}^{\dagger}$, gde su $\vec{u}_{\vec{n}}^{\dagger}$ - dati jednačinom (14.1), odnosno, (14.16). Standardnim pristupom: $I_{\vec{n}\vec{m}} \rightarrow I_{\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}^{\dagger}, \vec{m}+\vec{u}_{\vec{m}}^{\dagger}}$, i prelaskom u impulsni prostor, hamiltonijan spin-feron interakcije dobija oblik:

$$(14.24) \quad H_{int} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \Gamma_{\vec{k}, \vec{q}} B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}-\vec{q}} (b_{\vec{q}}^{\dagger} + b_{-\vec{q}}^{\dagger}),$$

$$F_{\vec{k}, \vec{q}} = i (N/2Mv_s q)^{1/2} \hat{k}_{\vec{q}} |(\vec{k}-\vec{q}) I_{\vec{k}-\vec{q}} - \vec{k} I_{\vec{k}} - \vec{q} I_{\vec{q}}|.$$

U aproksimaciji najbližih suseda i uz obračun bitne - interakcije sa longitudinalnim zvučnim talasom, on može da se napiše kao:

$$(14.25) \quad H_{int} = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \Gamma_{\vec{q}} B_{\vec{k}}^{\dagger} B_{\vec{k}-\vec{q}} (b_{\vec{q}}^{\dagger} + b_{-\vec{q}}^{\dagger}),$$

$$F_{\vec{q}} = -iI(2N/Mv_s q)^{1/2} (\vec{q} \hat{k}_{\vec{q}}),$$

gde su: I - integral izmene za najbliže susede, M i N - masa i broj atoma proste kubne feromagnetne strukture i v_s - brzina longitudinalnih zvučnih talasa u feromagneticima (njihove karakteristične vrednosti se uzimaju kao: $M = 10^{-25}$ kg i $v_s = 3 \cdot 10^3$ m/s; ostale su navedene u prethodnom paragrafu).

14.6 Elektroni u metalima

Elektroni i joni u kristalu čine jedinstven sistem, koga je vrlo teško opisati. Oslanjajući se na model slobodnih (neinteragujućih) elektrona ([84], gl. 7 i 8), prema kome se najslabije vezani (valentni) elektroni slobodno kreću po celoj zapremini kristala (tako predstavljaju osnovne nosioce električne struje), može se objasniti čitav niz veoma važnih fizičkih svojstava metala: provodjenje električne struje (Omov zakon i dr.), nastanak i uticaj elektromagnetnog polja, vezu između električne struje i toplotne provodljivosti i sl. Međutim, ovaj model ne može da objasni zašto su, npr. jedni hemijski elementi dobri provodnici, a drugi - izolatori i poluprovodnici, zašto električna svojstva jako zavise od temperature (pojavu SP, fazne prelaze, ...), itd. Svako čvrsto telo sadrži elektrone; elektroni su u kristalu raspoređeni po energetskim (dozvoljenim) zonama koje su odvojene oblastima u kojima ni jedno elektronsko stanje nije dozvoljeno (zabranjene zone). Ove poslednje nastaju kao rezultat interakcije talasa provodnih elektrona sa jonskim ostatkom kristala ([84], gl. 9 i 10). Zbog ovoga, model slobodnog elektronskog gasa mora da se dopuni činjenicom da čvrsta tela poseduju periodičnu atomsku (ili molekulsku) strukturu - kristalnu rešetku, kao i time da se, pod dejstvom spoljašnjeg elektromagnetnog polja, elektroni ponašaju kao "druge" čestice, koje imaju neku efektivnu masu (ona može biti veća ili manja od mase slobodnog elektrona, može biti i negativna).

Tako se dolazi do modela kvazislobodnih elektrona, u kome se interakcija između elektrona medju sobom i jona ("zamrznutim" u čvorovima rešetke) predstavlja u vidu sume nekog srednjeg polja $W(\vec{r})$, koje zavisi samo od koordinata elektrona, i neke remanentne interakcije W_r , koja zavisi od koordinata tzv. jonskog ostatka (kod veoma čistih kristala i niskih temperatura ova interakcija se može zanemariti).

Kristalna periodičnost (ograničava talasni vektor elektrona: $k_i = 2n_i\pi/L_i$; $i = x, y, z$) ogleda se u translacionoj invarijantnosti hamiltonijana ([83], str. 518 do 543) sistema:

$$H_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = H_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

Rešenje Šredingerove jednačine, za svojstvene funkcije ovog hamiltonijana, daje "modulisane" ravne talase:

$$(14.26) \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

pri čemu su $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n})$ - Blohove funkcije [186], koje "ograničavaju" energije elektrona. Naime, suprotno od energije slobodnog elektrona, energija elektrona u kristalu ne može biti neprekidna funkcija talasnog vektora. Potpun spektar Šredingerove jednačine zavisi od celog broja λ (sledi iz uslova realnosti \vec{k} i $\epsilon(\vec{k})$), tj.:

$$\epsilon(\vec{k}) \equiv \epsilon_{\lambda}(\vec{k}); \quad \lambda = 1, 2, 3, \dots,$$

što znači da za svako λ postoji kontinuum energija određene širine - zone, koje mogu biti razmaknute ili se prepoкрivati (sl. 14.1a).

Strožiji proračuni zonske strukture, zasnovani na metodu pseudopotencijala ([85], gl. 5) i redukovanih (na prvu Brillouenovu zonu) talasnih vektora, daje jednoelektronske energije u obliku $\epsilon_{\alpha}(\vec{k})$ prikazanih na sl. 14.1b; broj α prebrojava, u stvari, dozvoljene elektronske zone u kristalu. Vidi se nastanak zabranjene zone u kojoj ne može da bude ni jedno elektronsko stanje. Iznad i ispod ove oblasti pružaju se zone dozvoljenih energija koje naseljavaju elektroni (detaljnije videti npr. u [85], gl. 4).

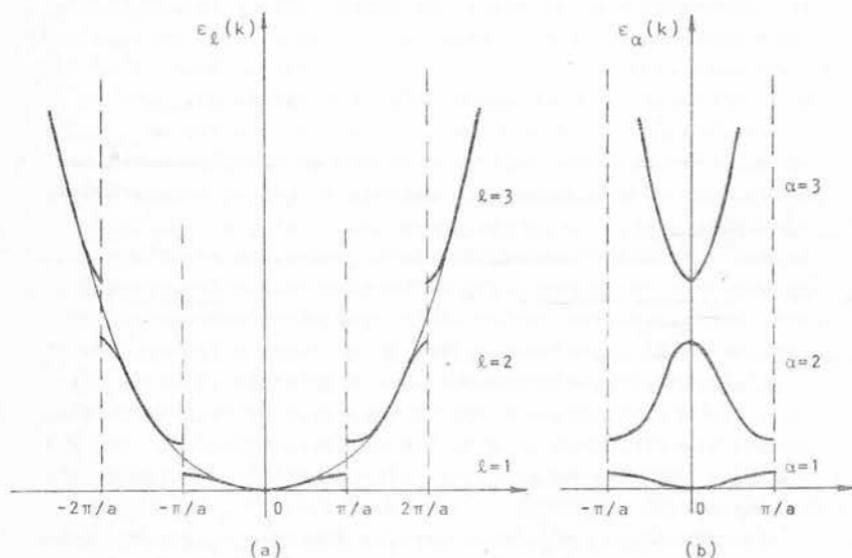
Srednje polje $W(\vec{r})$ opisuje osnovnu interakciju posmatranog elektrona sa svim drugim elektronima i jezgrima kristala. Zbog toga ϵ_{λ} i ψ_{λ} (indeks λ zamenjuje skup indeksa α , koji uključuje i spin elektrona, i funkcionalnu zavisnost od

redukovanog talasnog vektora \vec{k}) karakterišu stanje kvazičestice efektivne mase m^* koja se za slučaj spina 1/2 i dalje naziva elektronom ([86], str. 140) ili obučenim elektronom, i koja, za razliku od običnog elektrona, odražava svojstva celog kristala.

U jednoelektronskoj aproksimaciji hamiltonijan N elektrona celog kristala daje se izrazom:

$$(14.27) \quad H = \sum_{i=1}^N H(\vec{r}_i); \quad H(\vec{r}_i) = \frac{\vec{p}_i^2}{2m^*} + W(\vec{r}_i).$$

Zbog Paulijevog principa u stanju Ψ_λ (uključujući i spinska stanja) može da se nalazi samo jedan elektron, ili da bude "prazno". Na osnovu toga stanje svih N elektrona biće u potpunosti određeno ako se odredi koja su, od mogućih elektron-



Sl. 14.1: Zavisnost jednoelektronskih energija od talasnog vektora (iz [86], str. 136): a) Uticaj periodičnog potencijala (debeli linija) i poredjenje sa energijom slobodnog elektronskog gasa; b) Uticaj redukovanog talasnog vektora.

skih stanja, popunjena elektronima (to je tzv. reprezentacija okupacionih brojeva, [40], par. 86). U osnovnom stanju (na apsolutnoj nuli) elektroni zauzimaju N stanja Ψ_λ sa energijama $\epsilon_{\lambda_i} \leq \epsilon_F$ (ϵ_F - Fermijeva energija; $i = 1, 2, \dots, N$) i ono je određeno energijom:

$$(14.28) \quad \epsilon_0 = \sum_{i=1}^N \epsilon_{\lambda_i},$$

i talasnom funkcijom:

$$(14.29) \quad |\varphi_0\rangle = \prod_{i=1}^N a_{\lambda_i}^+ |0\rangle,$$

gde je $|0\rangle$ - vakuumsko stanje, a $a_{\lambda_i}^+$, odnosno a_{λ_i} - Fermi operatori kreacije, odnosno anihilacije (obučenih) elektrona. Sva stanja sa $\epsilon_{\lambda_j} > \epsilon_F$ su nepopunjena. Pobudjena stanja elektronskog sistema odgovaraju prelazu elektrona iz popunjenog stanja λ_i u nepopunjeno λ_j pri čemu sistemu treba saopštiti energiju (porastom temperature ili slično) $\epsilon_{\lambda_j} - \epsilon_{\lambda_i} > 0$; talasna funkcija pobudjenog stanja sistema biće:

$$(14.30) \quad \Psi_\lambda = \sum_{i,j} a_{\lambda_j}^+ a_{\lambda_i} |\varphi_0\rangle.$$

Hamiltonijan (14.27) u reprezentaciji druge kvantizacije i u impulsnom prostoru, koji će se nadalje koristiti, može da se napiše u obliku (videti npr. [12], par. 17 i 22):

$$(14.31) \quad H = \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}, \quad X_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$$

gde je $X_{\vec{k}}$ - energija elektrona (sa impulsom $\hbar\vec{k}$) obračunata u odnosu na Fermijev nivo: $\mu = \epsilon_F = (\hbar^2 k_F^2)/(2m)$. Operatori $a_{\vec{k}}^+$ i $a_{\vec{k}}$ su Fermi operatori kreacije i anihilacije elektrona u stanju sa talasnim vektorom \vec{k} .

Hemijski potencijal μ ([187], str. 146 do 168) zavisi od temperature i određuje se iz uslova normiranja ([86], str. 153 do 160) funkcije raspodele (Fermi-Dirakove) na ukupan broj neinteragujućih elektrona:

$$N = \sum_{\vec{k}} \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{\theta}\right) \right]^{-1}, \quad \theta = k_B T.$$

Na apsolutnoj nuli:

$$(14.32) \quad \mu(0) = \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2, \quad k_F = \begin{cases} (6\pi^2)^{1/3}/a, & \text{u 3d,} \\ \pi/2a, & \text{u 1d slučaja,} \end{cases}$$

i iznosi 3 do 5 eV (za metale).

Za niske temperature $\theta < 10\varepsilon_F$ važi:

$$(14.33) \quad \mu(\theta) = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} (\theta/\varepsilon_F)^2 \right]$$

Temperatura θ_F (temperatura degeneracije) koja odgovara Fermijevoj energiji je toliko visoka ($T_F = 10^4$ K) da se sve do sobnih temperatura elektronski sistem može tretirati kao da se nalazi na apsolutnoj nuli (detaljno objašnjenje u [188], gl. 5, par. 5.6), dakle:

$$(14.34) \quad \mu = \mu(\theta) = \mu(0) = \varepsilon_F$$

Karakteristične vrednosti parametara elektronskog sistema (u metalima) mogu se uzeti kao: $m = 10^{-30}$ kg, $\mu = 5 \cdot 10^{-19}$ J i $a = 3 \cdot 10^{-10}$ m, za slučaj jednog provodnog elektrona po atomu.

14.7 Elektron-fonon interakcija u metalima

Otpor metala uslovljen je interakcijom elektrona sa fononima rešetke (koja dovodi do rasejanja elektrona). Još je u radovima [18 i 134] bilo pokazano da ovakva interakcija, pri nekim uslovima dovodi do pojave energetskog gema iznad osnovnog stanja u spektru pobudjenih stanja elektrona, koja ima fundamentalnu ulogu u objašnjenju pojave SP (detaljno objašnjenje uloge elektron-fonon interakcije može se naći

npr. u [86], gl. 7).

Pri pomeranju \vec{n} -tog jona kristalne rešetke za $\vec{\xi}_n^+$ energija interakcije ([40], par. 88) elektrona sa rešetkom

$$\sum_{\vec{n}} W(\vec{r} - \vec{n})$$

promeni se za

$$\sum_{\vec{n}} \vec{\xi}_n^+ [V_n W(\vec{r} - \vec{n})],$$

tako da se operator elektron-fonon interakcije u reprezentaciji druge kvantizacije može napisati u obliku:

$$(14.35) \quad H_{el-p} = - \int d^3 r \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \sum_{\vec{n}} W(\vec{r}-\vec{n}) (V_n \vec{\xi}_n^+) \hat{\Psi}(\vec{r}),$$

gde je $\hat{\Psi}(\vec{r})$ - operator polja koji se izražava pomoću "moduliranih" ravnih talasa (par. 14.6) i Fermi operatora $a_{\vec{k}}$:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = V^{-1/2} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

($u_{\vec{k}}(\vec{r})$ su tzv. Blohove funkcije elektrona). Operator pomeranja jona $\vec{\xi}_n^+$ određen je jednačinom (14.1).

Sve u svemu, operator elektron-fonon interakcije kod metala može se napisati u sledećem obliku:

$$(14.36) \quad H_{el-p} = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} F_{\vec{k}\vec{q}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^+).$$

Veličina $F_{\vec{k}\vec{q}}$ karakteriše kolektivne oscilacije jona (transverzalne i longitudinalne fonone) tj. njihov uticaj za kvazi-slobodne elektrone. Za metale, provodnike na sobnim temperaturama, samo longitudinalni zvučni talasi daju doprinos ovoj interakciji ([40], str. 222 ili [86], str. 282). Zbog toga $F_{\vec{k}\vec{q}}$ zavisi samo od talasnog vektora \vec{q} i ima oblik:

$$(14.37) \quad F_{\vec{q}} = - i\bar{W}(\hbar/2Mv_g q)^{1/2} (\vec{q} \vec{\xi}_q^+),$$

gde su:

$$\bar{W} = a^{-3/2} \int d^3r u_{k-q}^*(\vec{r}) W(\vec{r}) u_k(\vec{r}),$$

integracija ide po jednoj elementarnoj ćeliji; a je konstanta proste kubne rešetke, \vec{k}_q - ort polarizacije longitudinalne fononske grane, M - masa jona i v_s - brzina zvuka u metalu.

Usled interakcije elektrona sa fononima menjaju se energetska stanja, kako elektrona tako i fonona. Dok se promena zakona disperzije elektrona u prisustvu fonona prati (istražuje) dotle se promena fononskog spektra pod uticajem elektrona obračunava indirektno, korišćenjem eksperimentalnih vrednosti za brzinu zvuka.

Veličina \bar{W} takodje se uzima kao eksperimentalni podatak ([85], gl. 5, par. 29b), ili pak uračunava kao srednja vrednost medjuelektronske interakcije (videti npr. [12], str. 142).

Karakteristične vrednosti parametra elektronskog sistema (osim onih iz prethodnog paragrafa) su: $M = 5 \cdot 10^{-26} \text{kg}$ i $v_s = 5 \cdot 10^3 \text{ m/s}$.

15. PROGRAMI ZA NUMERIČKO RAČUNANJE

Današnji stepen razvoja nauke, kako eksperimentalne tako i teorijske, zahteva upotrebu moćnih računara za numeričku obradu finalnih rezultata.

Tako su rezultati iz ove teze (par. 7.2, 10.2 i 13), s obzirom na komplikovanost svoje forme, morali biti analizirani i izračunavani u moćnim računskim centrima (Elektrotehnički fakultet u Banja Luci, Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu) koji poseduju računare velikih kapaciteta (VAX 11/780, odnosno DELTA 700).

Programi su pisani u Fortran jeziku i ovde će biti prikazani u celosti, zbog njihove, eventualne, primene na rešavanje drugih sličnih problema.

15.1 "Eksiton"

```

DIMENSION XP(4),XK(4),DX(4)
CALL ASSIGN(2,"EX.DAT")
DATA XP/.000001,2.,10.,100./,XK/2.,10.,100.,800.
1/,DX/.01,.1,1.,5./
WRITE(2,4)
4  FORMAT(7X,"X",12X,"A",15X,"G",16X,"E",13X,"E/X",
113X,"XX"/)
DO 1 I=1,4
DO 2 J=1,200
X=XP(I)
X=X+(J-1)*DX(I)
IF(X.GT.XK(I)) GO TO 1
S=0.
DO 3 N=1,200
S1=COS(6.28319*N*X)
S2=(-1)**N-.9975
S3=801.02362/(1.+1.59914*(10.**6)**(N**2))
3  S=S+(S1*S2*S3)
A=1.00119*(1.+S)
B=A*EXP(-.005*X)
XX=1.-COS(0.005*X)
G=XX*B
Y1=XX*(1.+B)
Y2=XX*(1.-B)
E=SQRT(Y1*Y2)
F=E/X
WRITE(2,5)X,A,G,E,F,XX
5  FORMAT(2X,"",F7.3,3X,"",E13.6,3X,"",E13.6,3X,"",
1  "",E13.6,3X,"",E13.6,3X,"",E13.6)
2  CONTINUE
1  CONTINUE
STOP
END

```

15.2 "Magnon"

```

DIMENSION XP(2),XK(2),DX(2)
CALL ASSIGN(2,'MAG.DAT')
DATA XP/.000001,2./,XK/2.,18./,DX/.01,.1/
WRITE(2,4)
4  FORMAT(7X,'X',12X,'A',15X,'G',16X,'E',13X,'E/X',
113X,'XX'/)
DO 1 I=1,2
DO 2 J=1,200
X=XP(I)
X=X+(J-1)*DX(I)
IF(X.GT.XK(I)) GO TO 1
S=0.
DO 3 N=1,200
S1=COS(6.28319*N*X)
S2=(-1)**N-.91393
S3=23.23722/(1.+1.21847*(10**3)*(N**2))
3  S=S+(S1*S2*S3)
A=1.04638*(1.+S)
B=A*EXP(-.18*X)
XX=1.-COS(.18*X)
G=XX*B
Y1=XX*(1.+B)
Y2=XX*(1.-B)
E=SQRT(Y1*Y2)
F=E/X
WRITE(2,5)X,A,G,E,F,XX
5  FORMAT(2X,' ',F7.3,3X,' ',E13.6,3X,' ',E13.6,3X,' ',
1E13.6,3X,' ',E13.6,3X,' ',E13.6)
2  CONTINUE
1  CONTINUE
STOP
END

```

15.3 "Elektron"

(a) "Elektron 1"

```

DIMENSION XP(3),XK(3),DX(3)
CALL ASSIGN(2,"EL1.DAT")
DATA XP/.000001,2.,10./,XK/2.,10.,102./,DX/.01,.1,.5/
WRITE(2,4)
4  FORMAT(7X,"X",12X,"A",15X,"G",16X,"E",13X,"E/X",13X,
1  "XX",13X,"XPX"/)
DO 1 I=1,3
DO 2 J=1,200
X=XP(I)
X=X+(J-1)*DX(I)
IF(X.GT.XK(I)) GO TO 1
S=0.
DO N=1,200
S1=COS(6.28319*N*X)
S2=(-1)**N-.00674
S3=1+.39478*(N**2)
3  S=S+(S1*S2)/S3
A=204.40515*(1.+2.01357*S)
XX=1.-2.*(1.-cos(.03*X))/(3.1459**2)
XPX=1.-.0001*(X**2)
G=XX*A*EXP(-10.*X)
E=SQRT((XX**2)+(G**2))
F=E/X
WRITE(2,5)X,A,G,E,F,XX,XPX
5  FORMAT(2X,"",F7.3,3X,"",E13.6,3X,"",E13.6,3X,
1  E13.6,3X,"",E13.6,3X,"",E13.6,3X,"",E13.6)
2  CONTINUE
1  CONTINUE
STOP
END

```

(b) "Elektron 2"

```

DIMENSION XP(3),XK(3),DX(3)
CALL ASSIGN(2,'EL2.DAT')
DATA XP/.000001,2.,10./,XK/2.,10.,102./,DX/.01,.1,.5/
WRITE(2,4)
4  FORMAT(50X,'ELEKTRON 2'//7X,'X',12X,'A',15X,'G',16X,
1'E',16X,'E/X',14X,'XX',16X,'XPX'/)
DO 1 I=1,3
DO 2 J=1,200
X=XP(I)
X=X+(J-1)*DX(I)
IF(X.GT.XK(I)) GO TO 1
S=0.
DO 3 N=1,500
S1=COS(6.28319*N*X)
C=.78477*N
D=1.88496*N
B1=COS(D)+C*SIN(D)
B2=COS(D)+(2.*C*SIN(D))/(1.-(C**2))
B3=COS(D)+(C*(3.-C**2)*SIN(D))/(1.-3.*C**2)
P1=(-1.)*N-.00014*B1)/(1.+C**2)
P2=.22096*(1.-C**2)*((-1.)*N-.93726*B2)/((1.+C**2)**2)
P3=.50337*(1.-3.*C**2)*((-1.)*N-.20164*B3)/((1.+C**2)**3)
3  S=S+S1*(P1-P2-P3)
A=.04293*(1.+3.42301*S)
XX=1.-2.*(1.-COS(.03*X))/(3.14159**2)
XPX=1.-.0001*X**2
G=XX*A*EXP(-8.00636*X)
E=SQRT((XX**2)+(G**2))
F=E/X
WRITE(2,5)X,A,G,E,F,XX,XPX
5  FORMAT(2X,' ',F7.3,3X,' ',E13.6,3X,' ',E13.6,3X,' ',
1E13.6,3X,' ',E13.6,3X,' ',E13.6,3X,' ',E13.6)
2  CONTINUE
1  CONTINUE
STOP
END

```

L I T E R A T U R A

- [1] P.L. Kapica;
DAN SSSR 18, 20(1938) i *Zh. eksp. teor. Fiz.* 11, 1 i 561(1947).
- [2] G. Rickayzen:
Green's Functions and Condensed Matter, Ac. Press, London 1980.
- [3] S. Milošević:
Osnovi fenomenološke termodinamike, PFV, Beograd 1979.
- [4] R.P. Feynman:
Statistical Mechanics, Benjamin, Massachusetts 1972 (r. pr.: R. Feinman: *Statističeskaya mehanika*, Mir, Moskva 1978).
- [5] R.B. Hallock;
Am. J. Phys. 50, 202(1980).
- [6] A.J. Leggett;
Rev. Mod. Phys. 47, 331(1975).
- [7] D.R. Tilly, J. Tilly:
Superfluidity and Superconductivity, Reinhold, New York 1974 (r. pr.: D.R. Tili, Dzh. Tili: *Sverhtekuchesty i sverhprovodimosty*, Mir, Moskva 1977).
- [8] P.L. Kapica:
Ekperiment - teorija - praksa (članci i predavanja), red. B. Tošić, D. Kapor; RU R. Čirpanov, Novi Sad 1980.
- [9] I.M. Halatnikov:
Teorija sverhtekuchesti, Nauka, Moskva 1971.

- [10] A. Ishihara:
Statistical Physics, Ac. Press, London 1971 (r. pr.:
A. Ishihara: *Statističeskaya fizika*, Mir, Moskva
1973).
- [11] F.M. Kuni:
Statističeskaya fizika i termodinamika, Nauka, Mo-
skva 1971.
- [12] B.S. Tošić:
Statistička fizika, FNP IF, Novi Sad 1978.
- [13] L.D. Landau, E.M. Lifshic:
Mehanika splošnyh sred, GITTL, Moskva 1964 (sh. pr.:
L.D. Landau, E.M. Lifšic: *Mehanika neprekidnih sredi-
na*, Gradj. knjiga, Beograd 1965).
- [14] V.P. Minev;
Usp. Fiz. Nauk 132, 303 (1983).
- [15] J.C. Wheatley;
Rev. Mod. Phys. 42, 415 (1975).
- [16] Yu. Kagan, G.V. Shlyapnikov;
P. Zh. eksp. teor. Fiz. 34, 359 (1981).
- [17] I.F. Silvera, J. Walraven;
Sci. Am. 246, 56 (1982) i A.F. Silyvera, Yu. Walra-
ven; *Usp. Fiz. Nauk* 132, 701 (1983).
- [18] L.N. Cooper;
Phys. Rev. 104, 1189 (1956).
- [19] I.V. Keldysh:
*Kogerentnye sostoyaniya elektronov, u: Problemy teo-
retičeskoj fiziki*, Nauka, Moskva 1972.
- [20] E. Hanamura, H. Haug;
Phys. Rep. 33, 209 (1977).
- [21] D. Hulin, A. Mysyrowicz, C.B. Guillaume;
Phys. Rev. Let. 45, 1970 (1980).
- [22] S.D. Stojanović, J.P. Šetrajčić, M.J. Škrinjar, B.S.
Tošić;
phys. stat. sol. (b) 79, 433 (1977).
- [23] M.G. Macko;
P. Zh. eksp. teor. Fiz. 81, 281 (1976).
- [24] M.J. Škrinjar, J.P. Šetrajčić, D.V. Kapor;
phys. stat. sol. (b) 84, 826 (1977).

- [25] K. Hirakawa, H. Yoshizawa;
J. Phys., Soc. Jpn. 47, 388 (1979).
- [26] J.P. Setrajčić, M.J. Škrinjar, D. Mirjanić;
Phys. stat. sol. (b) 124, K45 (1984).
- [27] N.N. Bogolyubov;
Ves. AN SSSR 28, 25 (1958).
- [28] L.D. Landau;
Journ. Phys. (USSR) 5, 71 (1941); 11, 91 (1947);
Zh. eksp. teor. Fiz. 11, 592 (1941) i 14, 112 (1944).
- [29] D.G. Henslav, A.D.B. Woods;
Phys. Rev. 121, 1268 (1961).
- [30] R.A. Cowley, A.D.B. Woods;
Can. J. Phys. 49, 177 (1971).
- [31] L.D. Landau, E.M. Lifshic;
Statističeskaya fizika, Nauka, Moskva 1964.
- [32] P.V.E. Mc Clintock;
Nature 292, 394 (1982).
- [33] R.P. Feynman;
Phys. Rev. 94, 262 (1954).
- [34] R.P. Feynman, M. Cohen;
Phys. Rev. 102, 1189 (1956).
- [35] K. Huang;
Statistical Mechanics, Wiley & Sons, New York 1963
(r. pr.: K. Huang: *Statističeskaya mehanika*, Mir, Moskva 1968).
- [36] V.V. Tolmachev;
Teoriya Bose-gasa, Mos. Univ., Moskva 1969.
- [37] R. Kubo;
Statistical Mechanics, NHP, Amsterdam 1965 (r. pr.:
R. Kubo: *Statističeskaya mehanika*, Mir, Moskva 1967).
- [38] N.N. Bogolyubov;
Izv. AN SSSR 11, 77 (1947) i *Zh. eksp. teor. Fiz.*
9, 23 (1947).
- [39] N.N. Bogolyubov -
Sobranie sočineniya, Naukova dumka, Kiev 1971.
- [40] A.S. Davydov;
Kvantovaya mehanika, Nauka, Moskva 1973.

- [41] E.L. Andronikashvili;
Zh. eksp. teor. Fiz. 15, 780 (1946).
- [42] V.F. Sears, E.C. Svensson, P. Martel, A.D.B. Woods;
Phys. Rev. Lett. 49, 279 (1982).
- [43] Sunakawa et. al. ;
Progr. Theor. Phys. 41, 919 (1969) i 44, 565 (1970).
- [44] L. Tisza;
Nature 171, 913 (1938) i *Phys. Rev.* 72, 838 (1947).
- [45] Dj. Mušicki;
Uvod u teorijsku fiziku I, ICS, Beograd 1978.
- [46] I.L. Bekarevich, I.M. Halatnikov;
Zh. eksp. teor. Fiz. 40, 820 (1961).
- [47] N.N. Bogolyubov;
Preprint OIYaI Dubna, P-1395 (1963).
- [48] D. Pines:
The Many Body Problem, Benjamin, New York 1961 (r. pr.: D. Paine: Problema mnogih tel, IL, Moskva 1963).
- [49] E.M. Lifshic, L.P. Pitaevskii:
Statisticheskaya fizika, Nauka, Moskva 1978.
- [50] J.P. Šetrajić, D.V. Kapor, D. Mirjanić;
phys. stat. sol. (b) 124, 235 (1984).
- [51] V.L. Ginzburg, L.P. Pitaevskii;
Zh. eksp. teor. Fiz. 34, 1240 (1958).
- [52] L.P. Pitaevskii;
Zh. eksp. teor. Fiz. 35, 408 (1958).
- [53] V.L. Ginzburg, A.A. Sobyenin;
Usp. Fiz. Nauk 120, 153 i 733 (1976).
- [54] N.N. Bogolyubov -
Isbrannye trudy III, Naukova dumka, Kiev 1971.
- [55] N.N. Bogolyubov;
Preprint IOYaI Dubna, P-1451 (196.).
- [56] F. Reif;
Stat. Am. 203, 188 (1960).
- [57] J.M. Blat, K.W. Böer, W. Brand;
Phys. Rev. 126, 1261 (1962).
- [58] S.A. Moskalenko;
FTT 4, 276 (1962).

- [59] R.C. Casella;
J. Appl. Phys. 34, 1703 (1963).
- [60] L.V. Keldysh, A.N. Kozlov;
Zh. eksp. teor. Fiz. 54, 978 (1968).
- [61] P. Bocchieri, F. Seneci;
Nuovo Cimento 18B, 392 (1965).
- [62] V.A. Gergely, R.F. Kazarinov, R.A. Suris;
Zh. eksp. teor. Fiz. 53, 544 (1967) i 54, 298 (1968).
- [63] V.M. Agranovich, B.S. Toshich;
Zh. eksp. teor. Fiz. 53, 149 (1967).
- [64] B.S. Toshich;
FTT 9, 1713 (1967).
- [65] Y.A. Finkelstein, M.J. Škrinjar, B.S. Tošić;
Preprint IBK-Vinča, IBK-976 (1971).
- [66] M.J. Škrinjar;
Dr. disertacija, PMF, Novi Sad 1975.
- [67] D. Jerome, T.M. Rice, W. Kohn;
Phys. Rev. 158, 462 (1967).
- [68] W. Kohn;
Phys. Rev. Let. 19, 439 (1967).
- [69] B.I. Halperin, T.M. Rice;
Rev. Mod. Phys. 40, 755 (1968).
- [70] W. Kohn, D. Sherrington;
Rev. Mod. Phys. 42, 1 (1970).
- [71] A.S. Alekseev i dr.;
P. Zh. eksp. teor. Fiz. 21, 578 (1975).
- [72] J. Shah et al.;
Solid State Com. 24, 71 (1977).
- [73] M.G. Sceats, K. Tomioka, S.A. Rice;
J. Chem. Phys. 66, 2984 i 4486 (1977).
- [74] V.A. Korneichuk, M.P. Lisica, A.M. Yaremko;
FTT 21, 1723 (1979).
- [75] M.S. Brodin, M.G. Matsko;
Solid State Com. 25, 789 (1978) i 35, 375 (1980).
- [76] K. Sotome, Y. Nozue, M. Ueta;
Solid State Com. 36, 555 (1980).

- [77] Y. Masumoto, S. Shionoya;
Solid State Com. **41**, 147 (1982).
- [78] Y. Aoyagi, Y. Segawa, S. Namba;
Phys. Rev. **B25**, 1423 (1982).
- [79] Y. Imry, M. Schwartz;
J. Low Temp. Phys. **21**, 543 (1975).
- [80] P. Nozieres, D. Saint James;
J. Physique **43**, 1133 (1982).
- [81] J.P. Setrajčić;
Magistarski rad, FNF Beograd 1983.
- [82] H.K. - Onnes;
Akad. Wetenschappen (Amsterdam) **14**, 118 i 813 (1911);
Com. Leiden 120b (1911) i Com. Leiden Suppl. **34**
(1913).
- [83] I. Supek;
Teorijska fizika i struktura materije, GZH, Zagreb
1977.
- [84] C. Kittel;
Introduction to Solid State Physics, Wiley & Sons,
New York 1971 (r. pr.: Ch. Kittely: Vvedenie v fiziku
tverdogo tela, Nauka, Moskva 1978).
- [85] H. Haken;
Quantenfeldtheorie des Festkörpers, Teubner, Stuttgart
1973 (r. pr.: H. Haken: *Kvantovopolevaya teoriya*
tverdogo tela, Nauka, Moskva 1980).
- [86] A.S. Davydov;
Teoriya tverdogo tela, Nauka, Moskva 1976.
- [87] J.M. Ziman;
Principles of the Theory of Solids, Univ. Press,
Cambridge 1972 (r. pr.: Dzh. Zajman: Principy teorii
tverdogo tela, Mir, Moskva 1974).
- [88] P.G. de Gennes;
Superconductivity of Metals and Alloys, Benjamin,
New York 1968 (r. pr.: P. de Zhen: Sverhprovodimosty
metallov i splavov, Mir, Moskva 1968).
- [89] W. Buckel;
Supraleitung, Phys. Verlag, Weinheim 1972 (r. pr.:
V. Hukkely: Sverhprovodimosty, Mir, Moskva 1975).
- [90] C. Kittel;
Quantum Theory of Solids, Wiley & Sons, New York
1963 (r. pr.: Ch. Kittely: *Kvantovaya teoriya tver-*
dyh tel, Nauka, Moskva 1967).

- [91] R.M. White, T.H. Geballe:
Long Range Order in Solids, Ac. Press, New York
1979 (r. pr.: F. Uait, T. Dzhebell: *Dalynii ponyadok
v tverdyh telakh*, Mir, Moskva 1982).
- [92] A.V. Svidzinskiĭ:
*Prostranstvenno-neodnorodnye zadachi teorii sverkh-
provodimosti*, Nauka, Moskva 1982.
- [93] ***
*Fiziko-himicheskie osnovy polucheniya sverkhprovodya-
shchih materialov*; red. E.M. Savickii, O. Henkely,
Yu.V. Efimova, *Metalurgiya*, Moskva 1971.
- [94] J.P. Carbotte, R.C. Dynes;
Phys. Rev. 172, 476 (1968).
- [95] J. Witting;
Phys. Rev. Let. 24, 812 (1970).
- [96] Yu.V. Kapaev;
Zh. eksp. teor. Fiz. 61, 1591 (1971).
- [97] A.P. Rusakov;
phys. stat. sol. (b) 72, 503 (1975).
- [98] C. Compte, P. Nozieres;
J. Physique 43, 1083 (1982).
- [99] M.S. Brodin, P.I. Budnik, N.I. Vitrihovskii, M.G.
Macko;
Ukr. Fiz. Zh. 25, 1836 (1980).
- [100] Lj. Mašković, J. Šetrajić:
Visokotemperaturni anomalni efekti u CuCl, seminar-
ske rad, PMF Beograd 1982.
- [101] ***
Problema visokotemperaturnoi sverkhprovodimosti, red.
V.L. Ginzburg, D.A. Kirshnic, Nauka, Moskva 1977.
- [102] A.S. Kompaneec:
Kurs teoreticheskoj fiziki I, Mir, Moskva 1972 (eng.
pr.: A.S. Kompaneyets: *A Course of Theoretical Phy-
sics I*, Mir, Moscow 1978).
- [103] W. Meissner, R. Ochsenfeld:
Naturwiss. 21, 787 (1933).
- [104] H. London, F. London:
Proc. Roy. Soc. A149, 71 (1935) i *Physica* 2, 341
(1935).

- [105] D.N. Zubarev:
Neravnopasnaya statisticheskaya termodinamika, Nauka, Moskva 1971.
- [106] I. Prigogine:
Thermodynamics of Irreversible Processes, ... nois 1955 (r. pr.: I. Prigouhin: *Vvedenie v termodinamiku neobratimyh processov*, IL, Moskva 1960).
- [107] I. Prigogine:
Non-Equilibrium Statistical Mechanics, Wiley Intersc., New York 1962 (r. pr.: I. Prigouhin: *Neravno-vesnaya statisticheskaya mehanika*, Mir, Moskva 1964).
- [108] V.M. Agranovich:
Teoriya eksitonov, Nauka, Moskva 1968.
- [109] A. Mysyrowicz, D.Hulin, A. Antonetti;
Phys. Rev. Let. 43, 1123 i 1275 (1979).
- [110] A. Mysyrowicz;
J. Physique 41, C7-281 (1980).
- [111] M. Lax:
Fluctuation and Coherence Phenomena in Classical and Quantum Physics, Gordon & Breach, New York 1968 (r. pr.: M. Leks: *Fluktuacii i kogerentnye yavleniya*, Mir, Moskva 1969).
- [112] E.M. Livshic;
Zh. eksp. teor. Fiz. 18, 293 (1948).
- [113] O.A. Dubovskii, Yu.V. Konobeev;
FTT 7, 345 (1965).
- [114] L.D. Landau, E.M. Lifshic:
Kvantovaya mehanika, Pizmatgiz 1969 (sh. pr.: L.D. Landau, E.M. Lifshic: *Kvantna mehanika*, Gradj. knjiga Beograd 1968).
- [115] H. Fröhlich;
Phys. Rev. 79, 845 (1950).
- [116] C. Kuper;
Adv. Phys. 0, 1 (1958).
- [117] H. Fröhlich;
Proc. Roy. Soc. A223, 286 (1954).
- [118] J. Bardeen, D. Pines;
Phys. Rev. 92, 1140 (1955).
- [119] Z.M. Škrbić, M.J. Škrinjar, D.V. Kapor;
phys. stat. sol. (b) 83, K125 (1977).

- [120] D.B. Chesnut;
J. Chem. Phys. 41, 472 (1964).
- [121] F.J. Dyson;
Phys. Rev. 102, 1217 i 1230 (1956).
- [122] S. Maleev;
Zh. eksp. teor. Fiz. 33, 1010 (1957).
- [123] C. Comte, P. Nozieres;
J. Physique 43, 1069 (1982).
- [124] S.V. Tyablikov;
Metody kvantovoi teorii magnetizma, Nauka, Moskva
1965.
- [125] M. Wortis;
Phys. Rev. 132, 85 (1963).
- [126] N.A. Efremov, E.P. Kaminskaya;
FTT 15, 3338 (1973).
- [127] M.J. Škrinjar, D.V. Kapor, D. Mirjanić;
Physica 101B, 247 (1980).
- [128] Ya.E. Pokrovskii;
phys. stat. sol. (a) 11, 385 (1972).
- [129] D.V. Kapor, S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar, B.S. Tošić;
phys. stat. sol. (b) 74, 103 (1976).
- [130] S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar, B.S. Tošić;
Phys. Let. 59A, 396 (1976).
- [131] S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar;
phys. stat. sol. (b) 84, K101 (1977).
- [132] S.D. Stojanović, J.P. Setrajčić, M.J. Škrinjar,
B.S. Tošić;
Fizika 8, 111 (1976).
- [133] S.D. Stojanović, J.P. Setrajčić, M.J. Škrinjar;
Fizika 10, 427 (1978).
- [134] N.N. Bogolyubov;
Nuovo Cimento 2, 784 (1958).
- [135] A.S. Davydov;
phys. stat. sol. (b) 102, 275 (1980); 115, 15 (1983).
- [136] M.M. Marinković, S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar;
Zbornik PMF - ser. fiz. 12, 33 (1982).

- [137] V.G. Makhankov;
Phys. Rep. 36, 1 (1978).
- [138] ***
Solitons and Condensed Matter Physics, red. A.R. Bishop, T. Schneider, Verlag, Berlin 1978.
- [139] G.L. Lamb, Jr.:
Elements of Soliton Theory, Wiley & Sons, New York 1980 (r. pr.: Ush.L. Lem: Vvedenie v teoriyu solitonov, Mir, Moskva 1983).
- [140] A.S. Davydov;
Usp. Fiz. Nauk 138, 603 (1982).
- [141] D.I. Lalović, B.S. Tošić, R.B. Žakula;
phys. stat. sol. 28, 635 (1968).
- [142] B.I. Koshelaev;
Proc. XVIIth Congr. AMPERE, Bucharest 1970.
- [143] K. Hirakawa, G. Shirane, J.D. Axe;
J. Phys. Soc. Jpn. 50, 787 (1981).
- [144] D.C. Mattis:
The Theory of Magnetism, Harper & Row, New York 1965 (r. pr.: D. Mattis: Teoriya magnetizma, Mir, Moskva 1967).
- [145] A.I. Ahiezer, V.G. Baryahatar, S.V. Peletminskii:
Spinovye volny, Nauka, Moskva 1967.
- [146] S.V. Vonsovskii:
Magnetizm, Nauka, Moskva 1971.
- [147] M. Wertis;
Phys. Rev. 132, 85 (1963).
- [148] D.I. Lalović, B.S. Tošić, J.B. Vujaklija, R.B. Žakula;
Nuovo Cimento 68B, 75 (1970).
- [149] E. Pytte;
Ann. Phys. (USA) 32, 377 (1965).
- [150] B.S. Tošić, F.R. Vukajlović;
phys. stat. sol. (b) 57, K89 (1973).
- [151] J. Goldstone;
Nuovo Cimento 19, 154 (1961).
- [152] R. Brout:
Phase Transitions, Univ. Brussels, New York 1965 (r. pr.: R. Brout: Fazovye perekhody, Mir, Moskva 1967).

- [153] H. Stanley:
Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon, Oxford 1971 (r. pr.: H. Sten-
li: *Fazonys perekhody i kriticheskie yavleniya*, Mir,
Moskva 1973).
- [154] E. Belorizky, R. Casalegno, J.J. Niez;
phys. stat. sol. (b) 102, 368 (1980).
- [155] J. Coronas;
Phys. Rev. 16, 1763 (1977).
- [156] ***
Trends in Physics 1978; red. M.M. Wolfson, Hilger
Ltd., Bristol 1978.
- [157] M. Steiner, J.K. Kjems;
4th EPS Gen. Conf., York 25-29 sept. 1978.
- [158] A.M. Kosevich, B.A. Ivanov, A.S. Kovalev;
*Nelineinye volny namagnichennosti: Dinamicheskie i
topologicheskie solitony*, Naukova dumka, Kiev 1983.
- [159] M.J. Škrinjar;
Privatno sapštenje.
- [160] L.G. de Azevedo, M.A. de Moura, C. Cordeiro, B. Ze-
kš;
J. Phys. C 15, 7391(1982).
- [161] J. Bardeen;
Phys. Rev. 80, 567 (1950).
- [162] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer;
Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [163] H. Fröhlich;
Proc. Roy. Soc. A215, 291 (1952).
- [164] ***
Teoriya sverkhprovodimosti, red. N.N. Bogolyubov, II,
Moskva 1960.
- [165] E. Merzbacher;
Quantum Mechanics, Wiley & Sons, New York 1970.
- [166] A. Messiah;
Mécanique Quantique, Dunod, Paris 1959 (r. pr. A.
Mesia: *Kvantovaya mehanika*, Nauka, Moskva 1979).
- [167] V.V. Tolmachev;
Teoriya Fermi-gaza, Mos. Univ., Moskva 1973.

- [158] N.N. Bogolyubov;
Zh. eksp. teor. Fiz. 7, 41 i 51 (1958).
- [169] N.N. Bogolyubov;
Zh. eksp. teor. Fiz. 9, 23 (1947).
- [170] D. Hadžiahmetović, D. Mirjanić;
Fizika 15, 37 (1983).
- [171] E.G. Maksimov:
High-T. Superconductivity: Physical Mechanism; pred. na *Workshop on Low Temperature Physics, Portorož - sept. 1984.*
- [172] O.V. Dolgov, E.G. Maksimov;
AN SSSR 148, 3 (1983).
- [173] L.D. Landau, E.M. Lifshic:
Mehanika, Nauka, Moskva 1973.
- [174] Ya.I. Frenkel;
Phys. Rev. 32, 17 i 1276 (1931).
- [175] G.H. Wannier;
Phys. Rev. 52, 191 (1937).
- [176] R. Knox:
Theory of Excitons, Ac. Press, New York 1963 (r. pr.: R. Noks: Teoriya eksitonov, Mir, Moskva 1966).
- [177] A.S. Davydov:
Teoriya molekulyarnyh eksitonov, Nauka, Moskva 1968.
- [178] G.N. Knežević;
Dr. disertacija, PMF Novi Sad 1978.
- [179] F. Urbach;
Phys. Rev. 92, 1324 (1953).
- [180] Dj. Mušicki:
Uvod u teorijsku fiziku II, ICS, Beograd 1966.
- [181] M. Fisher:
The Nature of Critical Points, Univ. Colorado, Boulder 1966 (r. pr.: M. Fisher: Priroda kritičeskogo sostojaniya, Mir, Moskva 1968).
- [182] J. Katriel;
phys. stat. sol. (b) 93, K177 (1979).
- [183] D. Kapor, A. Ivić;
Phys. stat. sol. (b) 90, K157 (1978).

- [184] D.I. Lalović, R.B. Žakula;
phys. stat. sol. 40, 235 (1970).
- [185] D. Kapor, R.B. Žakula;
phys. stat. sol. (b) 97, 881 (1980).
- [186] F. Bloch;
Zs. für Phys. 52, 555 (1928).
- [187] L. Landau, E. Lifshic;
Statističeskaya fizika, Nauka, Moskva 1961 (sh.
pr.: Naučna knjiga, Beograd 1960).
- [188] R. Balescu;
Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics (Vol. 1), Wiley & Sons, New York 1975 (r. pr.:
R. Balescu: Ravnovesnaya i neravnovesnaya statističeskaya mehanika (tom 1), Mir, Moskva 1978).

M.Sc. Jovan P. Šetrafić

ON THE PROBLEM OF SUPERFLUID TRANSFER
IN CONDENSED MATTER

- thesis -

submitted to the Institute of Physics, Faculty of Sciences,
University of Novi Sad in order to obtain the degree of the
Doctor of Physical Sciences

A B S T R A C T

This thesis treats the problem of the superfluid transfer of quasiparticles in molecular, magnetic and metallic structures. Not only the possibility of the appearance of superfluid properties of the system (the phenomena of: quasiparticle Bose-Einstein condensation, superfluid equations of motion, the minimum of phase velocity) was investigated, but also the different mechanisms which could lead to such effects (high excitation concentration, non-linear effects, pure and effective interaction, coherent states).

It was shown that the system of Frenkel excitons satisfies all necessary conditions for the realization of superfluid transfer of optical excitations: relaxation time due to collisions with lattice vibrations is much smaller than their lifetime, which represents the condition for the realization of Bose-Einstein condensation, high quasiparticle concentration leads to the dispersion law of the same form as in Bogolyubov's theory of liquid He^4 , coherent states satisfy the eq-

uation of motion of the same type as for the superfluid liquid, virtual phonon exchange leads to the bound states of the system-boson drops, whose desintegration introduces the excitations with superfluid spectrum, but in the other hand also to the creation of solitons, which are, in the case when their velocity is higher than sound velocity, quasifree excitons with shifted energies and the positive minimum of the phase velocity.

Spin wave system in Heisenberg model for spin $1/2$ ferromagnet, possesses all superfluid properties as the Frenkel excitons, but only if the ferromagnet is placed to external magnetic fields of enormous strength. System lacks superfluid properties in the absence of these fields.

One dimensional structures, investigated mostly here, have the special importance: in this case the equation defining the energy gap of elementary excitations can be solved exactly. New method for solving proposed here was applied not only to the problem of superfluidity in molecular and ferromagnetic system, but also to problem of superconductivity of metallic structures. Analysis of the superconductivity, treated as superfluid charge transfer, has shown that no observable superconducting effects should be expected. The only exception is a specific case, where a suitable value of damping parameter of the system, occurs and this might lead to a sudden decrease of the Fermi level, realizing in this way the conditions for the appearance of high-temperature superconducting state.

Mr. Jovan P. Šetrajskić

KRATKA BIOGRAFIJA

Rodjen 07.04.1951. godine u Novom Sadu, gde je završio osnovnu (1966.), srednju - elektrotehničku školu (1970.) i PMF - grupu fizika (1974.).

Poslediplomske studije na PMF u Beogradu, odsek za fizičke i meteorološke nauke, okončao je odbr^anom magistrarskog rada 1983. godine.

Zaposlen na PMF u Novom Sadu, OOUR Institut za fiziku, od 1975. godine, kao asistent za Teorijsku mehaniku.

Do sada ima 30 objavljenih naučnih radova, 10 naučnih saopštenja i 1 stručni rad, iz oblasti teorijskih istraživanja kolektivnih fenomena i nelinearnih i nestacionarnih efekata u kondenzovanim sredinama i biostrukturama.