Ljubomir D. Todorović

EKSITON-FONON INTERAKCIJA I BOZE KONDENZACIJA EKSITONA

- diplomski rad -

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
GRUPA : FIZIKA

LJUBOMIR D. TODOROVIĆ

EKSITON-FONON INTERAKCIJA I BOZE KONDENZACIJA EKSITONA

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD 1975.

Posebnu zahvalnost dugujem i izražavam je:

Prof Dr Bratislavu S. Mošiću za nesebično pruženu podršku i stručnu pomoć prilikom izrade Diplomskog rada, kao i za veoma instruktivno vodjenje i usmeravanje mog rada.

Mr Mariu Škrinjaru i
Mr Lubetu Ristovskom
za izuzetno korisne savete

Svojim roditeljima
za strpljenje

Novinskoj Ustanovi „Službeni List SFRJ", Dušanu Mitroviću, Milenki Jovanović, Savi Vižintini i svojim kolegama iz odeljenja za razmnožavanje koje su pokazali i Janošu Nemetu za korišćenje ovog rada.

Rad se posvećuje uspomeni na mog pokojnog prijatelja DR. Jovana Vujaklije

11. Sep 1975

[illegible]

PHYSICAL LAW SHOULD HAVE MATHEMATICAL BEAUTY

P.A.M. DIRAC

S A D R Ž A J

U V O D

Cilj ovg diplomskog rada je da se proces superfluidnosti eksitona osvetli sa jednog drugačijeg stanovišta nego što je do danas činjeno. Poznato je (Ref. 1) proces Boze kondenzacije i superfluidnosti eksitonskog gasa razmatran sa tačke gledišta eksiton - eksiton interakcije, koja nastaje usled visoke koncentracije eksitona ostvarene laserom.

Ovde će ista mogućnost biti razmatrana u granicama drugog fizičkog mehanizma, a to je efektivna eksiton - eksiton interakcija koja nastaje usled razmene virtuelnih fonona. Za ovaj proces nisu potrebne visoke koncentracije eksitona.

Analiza će biti izvršena po ugledu na radove Freliha (Ref. No 5) u teoriji superkonduktivnosti jer je po svojoj matematičkoj strukturi hamiltonijan eksiton - fonon interakcije sličan hamiltonijanu elektron - fonon interakcije.

Prilikom definisanja hamiltonijana eksiton - fonon interakcije po molekulskim pomacima biće razvijani i matrični elementi dipol - dipolne interakcije i eksitonski operatori Ovaj prilaz daje za eksiton - fononsku interakciju za red veličine veću vrednost od one koju daje standardni prilaz.

Kao što je poznato u standardnom prilazu razvijaju se samo matrični elementi operatora W_{nm}

I EKSITONI – VRSTE I OSNOVNE KARAKTERISTIKE

Eksitoni se pojavljuju u tzv. molekulskim kristalima,antracemu,naftalimu idrugima i te kao rezultat dipol-dipol interakcije za koju znamo da je

$$W_{\vec{n}\vec{m}} \sim \frac{1}{|\vec{n}-\vec{m}|^3} \qquad (I.1.1.)$$

Postoje dva tipa eksitona:

1. Eksitoni Vanije-Mota
2. Eksitoni Frenkela

1. Eksitoni Vanije-Mota se javljaju u poluprovodnicima.Ovaj tip eksitona predstavlja neutralni kompleks;elektron u provodnoj zoni i "šupljina" u valentnoj zoni.Povezani su kulonovskim silama e^2/r^2 tipa.U samom kristalu se ovakav kompleks kolektivizuje ("valja" se krez kristal),pri čemu oblast ekscitacije dostiže stotinak Å ,pa se ovi eksitoni nazivaju eksitonima v e l i k o g r a d i j u s a.Usled povišene temperature ili nekog drugog sličnog uzroka,dolazi do kidanja-dekuplovanja kompleksa elektron - šupljina pri čemu nastaje struja tj elektron i šupljina se dalje kreću nezavisno.

2. Eksiton Frenkela je takodje neutralan kompleks elektron - šupljina ali za razliku od eksitona Vanije - Mota ostaje lokalizovan na samom molekulu.Naravno to ne znači da efekat kolektivizacije ne postoji.Naime , ako se par elektron - šupljina pojavi na jednom molekulu menja se interakcija sa okolnim molekulima,usled čega dolazi do ekscitacije susednog molekula,itd,te ekscitacija zahvati oblast radijusa 3o - 5o Å.Ovo su eksitoni k r a t k o g r a d i j u s a,

jer kompleks elektron - šupljina ostaje na samom molekulu

Važno je napomenuti da se i eksitoni Frenkela i eksitoni Vanije - Mota indukuju svetlošću,a kod eksitona Frenkela razlikujemo dva tipa ekscitacije i to u zavisnosti od načina nastajanja, a to su :

a) Eksitoni koji nastaju kao rezultat pobudjenja elektronskog podsistema u molekulu i

b) Vibroni,eksitoni koji nastaju kao posledica promene stanja unutrašnjih molekulskih vibracija.

Prvi tip eksitona,koji se naziva još kulonovski eksitoni i ima energiju 3 - 5 eV, dok su energije vibrona niže i iznose oko o,5 eV.

U daljem ćemo analizirati samo kulonovske eksitone.

Kako se kod kulonovskih eksitona radi o pobudjenjima elektrona u molekulu,ceo kristal se može tretirati kao sistem FERMIONA sa dvočestičnim interakcijama.Pošto elektron ostaje lokalizovan u molekulu,talasne funkcije elektrona susednih molekula slabo se preklapaju što donosi bitnu matematičku olakšicu,a to je,da se pri izračunavanju matričnih elemenata,integracije po celom prostoru mogu zameniti integralima po elementarnej ćeliji u kojoj se molekul nalasi.

U opštem slučaju sistem fermiona sa dvočestičnim interakcijama sledeći hamiltonijan

$$H = H_n + \frac{1}{2}\sum W_{nm} \qquad (I.1.2)$$

H_n - Hamiltonijan izolovaneg molekula na čvoru n .

W_{nm} - Operatori dipol-dipolnih interakcija molekula na čvorovima n i m.

U reprezentaciji druge kvantizacije ovaj hamiltonijan ima oblik:

$$H=\sum_{n\lambda} E_{n\lambda}\, \overset{+}{a}_{n\lambda} + \frac{1}{2}\sum_{nm\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3\lambda_4} W_{nm}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)\, \overset{+}{a}_{n\lambda_1} \overset{+}{a}_{m\lambda_2} a_{m\lambda_3} a_{n\lambda_4}$$

$$E = \int \overset{*}{\varphi}{}_n^{\lambda} H_n \varphi_n^{\lambda}\, d\tau_{\vec{n}}$$

$$W_{\vec{n}\vec{m}} = \int \overset{*}{\varphi}{}_n^{\lambda_1} \overset{*}{\varphi}{}_m^{\lambda_2} W_{nm}\, \varphi_m^{\lambda_3} \varphi_n^{\lambda_4}\, d\tau_n\, d\tau_m \qquad (I.1.3.)$$

$$H_n \varphi_n^{\lambda} = E_{n\lambda} \varphi_n^{\lambda}$$

$\overset{+}{a}_n$ i a_n su fermionski operatori koji kreiraju odnosno anihiliraju elektron n u kvantnomehaničkom stanju λ.

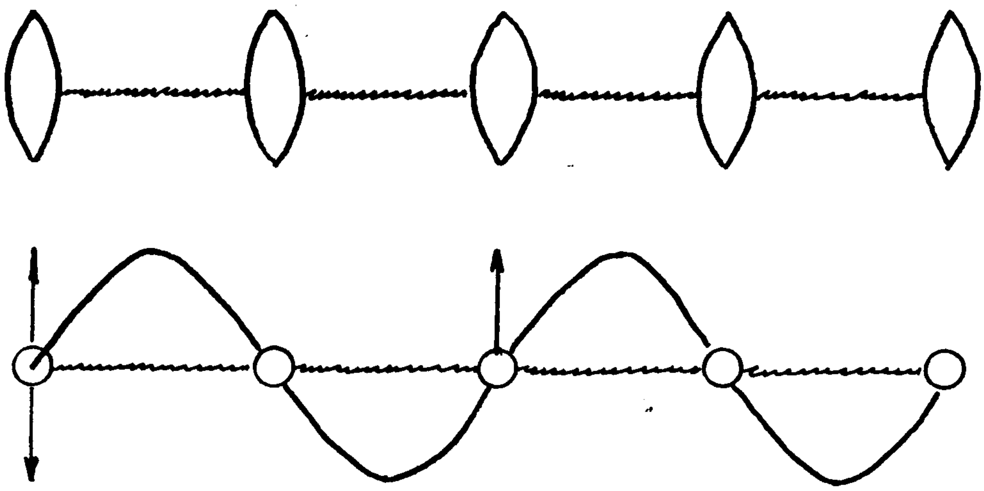
λ je simbol kojim je označen skup kvantnih brojeva u molekulu(Lit. 1)

F-je φ su svojstvene f-je hamiltonijana izolovanog molekula.

E_n je energija elektrona u stanju λ.

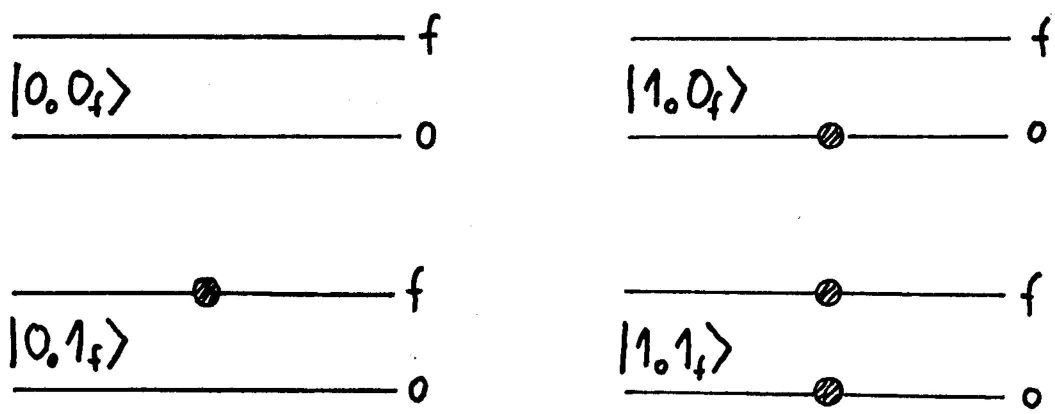
$\tau_{\vec{n}}$ je zapremina elementarne ćelije u kojoj se efektivno integrali.

Ograničićemo se na slučaj kada elektron može da se nadje pored osnovnog stanja, koje ćemo obeležiti sa nula (0) u samo jednom pobudjenom stanju koje ćemo obeležiti sa f. Ako elektrone pobudjuje monohromatska svetlost i ako je nivo f dosta udaljen od ostalih nivoa, ovakva predpostavka je plauzibilna. Osim toga predpostavićemo da je elementarna ćelija kristala prosta. U tom slučaju svi indeksi $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ λ_4 uzimaju samo dve vrednosti i to 0 i f. Eksiton nastaje tako što kvant svetlosti u nekom datom molekulu prebaci elektron iz stanja nula u stanje f, ali pošto su elektroni povezani poljem interakcije W_{nm}, ekscitacija se ne zadržava na jednom molekulu nego se prenosi i na ostale i taj talas pobudjenja se naziva E K S I T O N.



Sl. 1

Ako imamo dva dozvoljena stanja 0 i f onda tome odgovara četvorodimenzioni fermionski prostor.

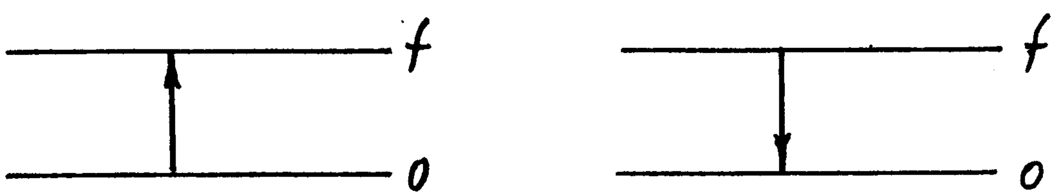


Znači, za svaki čvor rešetke imamo jedan četvorodimenzioni fermionski prostor

$$\mathcal{H}_1 = \{|0_0\, 0_f\rangle ; |1_0\, 1_f\rangle\} \qquad \mathcal{H}_2 = \{|1_0\, 0_f\rangle ; |0_0\, 1_f\rangle\}$$

Takodje je zgodno uvesi operatore

$$P_n^+ = a_{nf}^+ a_{no} \quad i \quad P_n = a_{no}^+ a_{nf}$$



čiji je fizički smisao očigledan.

Operator $\overset{+}{P}_n$ uništava elektron u osnovnom stanju i kreira ga u pobudjenom stanju f . Znači da P_n kreira kvant elektronske ekscitacije od osnovnog do pobudjenog stanja. Operator P_n uništava elektronske ekscitacije i to od pobudjeno stanja f do osnovnog stanja 0.

Može se pokazati da su operatori $\overset{+}{P}_n$ i P_n ravni nuli u podprostoru $\mathcal{H}_1$

$$\overset{+}{P}_n |0_0 0_f\rangle = \overset{+}{a}_{nf} a_{n0} |0_0 0_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{P}_n |1_0 1_f\rangle = \overset{+}{a}_{nf} a_{n0} |1_0 1_f\rangle = 0$$

$$P_n |0_0 0_f\rangle = \overset{+}{a}_{n0} a_{nf} |0_0 0_f\rangle = 0$$

$$P_n |1_0 1_f\rangle = \overset{+}{a}_{n0} a_{nf} |1_0 1_f\rangle = 0$$

Očigledno je bez dokaza da u podprostoru $\mathcal{H}_2$ važi:

$$\overset{+}{a}_{nf} a_{nf} + \overset{+}{a}_{n0} a_{n0} = 1$$

Na osnovu ovoga i na osnovu komutacionih relacija za fermi operatore

$$\{a_{nf}, \overset{+}{a}_{nf'}\} = \delta_{ff'}$$

$$\{a_{nf}, a_{nf'}\} = \{\overset{+}{a}_{nf}, \overset{+}{a}_{nf'}\} = 0$$

$$\overset{+}{a}{}^2_{nf} = a^2_{nf} = 0$$

Za operatore $\overset{+}{P}_n$ i P_n možemo izvesti komutacione relacije

1 čvor

$$P_n \overset{+}{P}_n + \overset{+}{P}_n P_n = \overset{+}{a}_{n0} \underbrace{a_{nf} \overset{+}{a}_{nf}}_{1 - \overset{+}{a}_{nf} a_{nf}} a_{n0} + \overset{+}{a}_{nf} \underbrace{a_{n0} \overset{+}{a}_{n0}}_{1 - \overset{+}{a}_{n0} a_{n0}} a_{nf} =$$

$$\overset{+}{a}_{n0} a_{n0} + \overset{+}{a}_{nf} a_{nf} - \overset{+}{a}_{n0} \overset{+}{a}_{nf} a_{nf} a_{n0} - \overset{+}{a}_{nf} \overset{+}{a}_{n0} a_{n0} a_{nf}$$

$$\overset{+}{a}_{no}\overset{+}{a}_{nf}a_{nf}a_{no}|1_o\,0_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{no}\overset{+}{a}_{nf}a_{nf}a_{no}|0_o\,1_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{no}a_{nf}|1_o\,0_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{no}a_{nf}|0_o\,1_f\rangle = 0$$

Prema tome u podprostoru $\mathcal{H}_2$ važi $\overset{+}{P}_n P_n + P_n \overset{+}{P}_n = 1$

b)

$$P_n^2 = P_n P_n = \overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}|1_o\,0_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}|0_o\,1_f\rangle = \overset{+}{a}_{no}a_{nf}|1_o\,0_f\rangle = 0$$

Pa je prema tome u podprostoru $\mathcal{H}_2$ $P_n^2 = 0$

$$\overset{+}{P}_n{}^2 = \overset{+}{P}_n\overset{+}{P}_n$$

$$\overset{+}{P}_n = \overset{+}{a}_{nf}a_{no}$$

$$\overset{+}{a}_{nf}a_{no}\overset{+}{a}_{nf}a_{no}|1_o\,0_f\rangle = \overset{+}{a}_{nf}a_{no}|0_o\,1_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{nf}a_{no}\overset{+}{a}_{nf}a_{no}|0_o\,1_f\rangle = 0$$

d) $$\overset{+}{P}_n P_n = \overset{+}{a}_{nf} \underbrace{a_{no}\overset{+}{a}_{no}}_{1-\overset{+}{a}_{no}a_{no}} a_{nf} = \overset{+}{a}_{nf}a_{nf} - \overset{+}{a}_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{no}a_{nf}$$

$$\overset{+}{a}_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{no}a_{nf}|1_o\, 0_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{nf}\overset{+}{a}_{no}a_{no}a_{nf}|0_o\, 1_f\rangle = 0$$

$$\overset{+}{a}_{nf}a_{nf} = \overset{+}{P}_n P_n$$

Za dva različita čvora

e) $$P_n\overset{+}{P}_m - \overset{+}{P}_m P_n = \overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo} - \overset{+}{a}_{mf}\underbrace{a_{mo}\overset{+}{a}_{no}}_{-\overset{+}{a}_{no}a_{mo}}a_{nf}$$

$$m\neq n$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo} + \overset{+}{a}_{mf}\overset{+}{a}_{no}a_{mo}a_{nf}$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo} - \overset{+}{a}_{no}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo}a_{nf}$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo} + \overset{+}{a}_{no}\overset{+}{a}_{mf}a_{nf}a_{mo}$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo} - \overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mf}a_{mo} = 0$$

$$[P_n, \overset{+}{P}_m] = 0 \qquad n\neq m$$

f) $$P_nP_m - P_mP_n = 0\ ;\ P_n = \overset{+}{a}_{no}a_{nf}$$

$$\overset{+}{a}_{no}a_{nf}\overset{+}{a}_{mo}a_{mf} - \overset{+}{a}_{mo}a_{mf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}$$

$$-\overset{+}{a}_{no}\overset{+}{a}_{mo}a_{nf}a_{mf} - \overset{+}{a}_{mo}a_{mf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}$$

$$+\overset{+}{a}_{mo}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}a_{mf} - \overset{+}{a}_{mo}a_{mf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}$$

$$-\overset{+}{a}_{mo}\overset{+}{a}_{no}a_{mf}a_{nf} - \overset{+}{a}_{mo}a_{mf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf}$$

$$+\overset{+}{a}_{mo}a_{mf}\overset{+}{a}_{no}a_{nf} - \overset{+}{a}_{mo}a_{mf}a_{no}a_{nf} = 0$$

$$\overset{+}{P}_n\overset{+}{P}_m - \overset{+}{P}_m\overset{+}{P}_n (=) 0$$
$$\overset{+}{P}_n = \overset{+}{a}_{nf} a_{no}$$

Pa je

$$\overset{+}{a}_{nf} a_{no} \overset{+}{a}_{mf} a_{mo} - \overset{+}{a}_{mf} a_{mo} \overset{+}{a}_{nf} a_{no} = 0$$

Da bi smo dokazali da je to jednako nuli potrebno je dovesti operatore u isti poredak u jednom od članova, pa ako i tada budu različiti znaci dokaz tu. Uzmimo član $\overset{+}{a}_{nf} a_{no} \overset{+}{a}_{mf} a_{mo}$

Operator a_{mf} na levo dolazi prvi po redosledu ako ga dva puta pomerimo i znak ostaje plus (+). Isto tako i operator a_{mo} će biti drugi u poretku ako dva puta pomerimo levo pa znak opet ostaje plus, a pošto je u drugom poredak sada isti a znak je minus članovi se potiru pa je

$$\overset{+}{P}_n\overset{+}{P}_m - \overset{+}{P}_m\overset{+}{P}_n = 0$$

Sve što smo izveli možemo sažeto napisati kraće:

$$[P_n, \overset{+}{P}_m] = (1 - 2\overset{+}{P}_n P_n)\delta_{nm} \qquad (I.1.4)$$
$$P_n^2 = \overset{+}{P}_n{}^2 = 0$$
$$\overset{+}{P}_n P_n = \overset{+}{a}_{nf} a_{nf} = 0 \quad 1$$
$$[P_n, P_m] = [\overset{+}{P}_n, \overset{+}{P}_m] = 0$$

I . 2 . METOD PRIBLIŽNE DRUGE KVANTIZACIJE (P D K)

Metod PDK se sastoji u tome što se hamiltonijan jako interagujućih čestica - elektrona (I.1.3.) , zameni ekvivalentnim hamiltonijanom slabo interagujućih čestica koje imaju paulionsku statistiku. Ovaj prilaz, koji je predložio Bogoljubov (Ref.), vrši se tako što se sume u hamiltonijanu (I.1.3.) razviju po sledećoj šemi:

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

Šema 1

Ako kristal ima centar inverzije, što smo mi i predpostavili i taj se centar poklapa sa centrom inverzije samog molekula onda su članovi u hamiltonijanu proporcionalni sa W(f000) i W(fff0) jednaki nuli.

Razlog je sledeći. Matrični elementi $W(f_1f_2f_3f_4)$ su proporcionalni $(e\vec{r})_{f_1}$ $(e\vec{r})_{f_2}$ $(e\vec{r})_{f_3}$ $(e\vec{r})_{f_4}$. Ovde su $(e\vec{r})_{f_i}$ i=1,2,3,4. dipolni mementi prelaza $0 - f_i$

$$W(f_1 000) \sim (e\vec{r})_{f_1}$$

$$W(f_1 f_2 f_3 0) \sim (e\vec{r})_{f_1} (e\vec{r})_{f_2} (e\vec{r})_{f_3}$$

Pošto je $H_n(r) = H_n(-r)$ .... (I.2.0.)

$$\left.\begin{aligned}
&[W(f_1 000)]_{\vec r} = \alpha \\
&[W(f_1 000)]_{-\vec r} = -\alpha \\
&[W(f_1 f_2 f_3 0)]_{\vec r} = \alpha\alpha\alpha \\
&[W(f_1 f_2 f_3 0)]_{-\vec r} = (-\alpha)(-\alpha)(-\alpha) = -\alpha
\end{aligned}\right\} (I.2.0.a)$$

Kao što vidimo (I.2.0.a.) u konterdikciji sa (I.2.0.) i zato su W(f000) i W(fff0) ravni nuli pa i u šemi 1 nema članova sa jednim i tri f.

Ovakvo razvijanje dovodi nas do hamiltonijana u sledećém vidu

$$H = H_o + H_2 + H_4 \qquad (I.2.1.)$$

gde su:

$$H_0 = N\left[E_0 + \frac{1}{2}\overline{W}(00\,00)\right] \qquad (I.2.2.)$$

$$\overline{W} = \sum_{\ell} W_{\ell}(0000)$$

$$H_2 = \sum_n \left\{\Delta_f + \sum_m W_{nm}(f00f)\right\}\overset{+}{P}_n P_n +$$

$$+ \sum_{nm} W_{nm}(f0f0)\overset{+}{P}_n\overset{+}{P}_m +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{nm}{}' W_{nm}(ff00)\overset{+}{P}_n\overset{+}{P}_m P_n P_m \qquad (I.2.3.)$$

$$H_4 = \frac{1}{2}\sum_{nm}\left[W_{nm}(ffff) - 2W_{nm}(f00f) +\right.$$

$$\left.+ W_{nm}(0000)\right]\overset{+}{P}_n\overset{+}{P}_m P_m P_n \qquad (I.2.4.)$$

Kao što vidimo ovaj hamiltonijan je različit od nule samo u podprostoru $\mathcal{H}_2$. Važno je napomenuti da zbog slabog prekrivanja talasnih funkcija, hamiltonijan ostaje zatvoren u podprostoru $\mathcal{H}_2$, kao i u podprostoru $\mathcal{H}_1$. I samo u ovim slučajevima može se preći na Paulione.

Napomena: Ostati u podprostoru znači da delujući na funkciju iz datog podprostora, dobijamo funkciju iz tog istog podprostora.

Osnovno preimućstvo ovog prilaza je u tome, da smo prelazeći na Pauli operatore, dobar deo interakcije čestica-elektrona ubacili u kvadratni deo hamiltonijana kvazičestice (Paulioni), što drugim rečima znači da smo sistem interagujućih čestica zamenuli gasom kvazičestica.

Pauli operatori se dalje mogu zamenuti Bozonima po sledećim formulama

$$P=\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B^{+\nu}B^{\nu}\right]^{1/2}\cong B-B^{+}BB$$

$$P^{+}=B^{+}\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B^{+\nu}B^{\nu}\right]^{1/2}\cong B^{+}-B^{+}B^{+}B$$

$$P^{+}P=\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)}{(1+\nu)!}B^{+\nu+1}B^{\nu+1}\cong B^{+}B-B^{+}B^{+}BB$$

U metodu P D K pauli operatori se zamenjuju bozonima $P\to B$ $P^{+}=B^{+}$, $P^{+}P=B^{+}B$ i istovremeno se odbacuju svi članovi četvrtog reda i dalje.

$$H_{PYK}=\sum_{n}\lambda B^{+}_{n}B_{n}+\sum_{nm}\alpha_{nm}B^{+}_{n}B_{m}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nm}\beta_{nm}\left(B^{+}_{n}B^{+}_{m}+B_{m}B_{n}\right)$$

$$\lambda=\Delta+\overline{W}(foof)$$

$$\alpha_{nm}=W_{nm}(fofo)$$

$$\beta_{nm}=W_{nm}(ffoo)$$

I . 3 . SPEKTAR EKSITONA U HARMONIJSKOJ APROKSIMACIJI

Spektar eksitona u harmonijskoj aproksimaciji se može dobiti dijagonalizacijom hamiltonijana (I.2.5.)

$$H_{PDK}=\sum_n \lambda B_n^+ B_n + \sum_{nm} \alpha_{nm} B_n^+ B_m + \frac{1}{2}\sum_{nm} \beta_{nm}\left(B_n^+ B_m^+ + B_m B_n\right)$$

Prvo se izvrši Furije transformacija Boze pperatora (I.3.1.)

$$B_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_1} B_{k_1}^+ e^{ik_1 n}$$

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k} B_{k} e^{ikn} \qquad (I.3.1.)$$

posle čega hamiltonijan (I.2.5.) postaje

$$H_{PDK}=\sum_k \gamma_k B_k^+ B_k + \frac{1}{2}\sum_k \beta_k\left(B_k^+ B_{-k}^+ + B_{-k} B_k\right) \ldots (I.3.2)$$

gde je

$$\gamma_k = \Delta + \sum_l \alpha_l e^{i\vec{k}\vec{l}}$$

$$\beta_k = \sum_l \beta_l e^{ikl}$$

Sada se od operatora B_k predje na operatore b_k sledećim transformacijama

$$B_k = u_k b_k + v_k b_{-k}^+$$

$$B_k^+ = u_k b_k^+ + v_k b_{-k} \qquad (I.3.3.)$$

Funkcije u i v su realne i parne i parne fje i ako zadovoljavaju uslov

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \qquad (I.3.4.)$$

onda su b_k takodje Boze operatori.

Posle zamene (I.3.3,) u hamiltonijan (I.3.2.) postaje

$$H=\sum_{k}\left(\gamma_k v_k^2+u_k v_k\beta_k\right)+$$
$$+\sum_{k}\left\{\gamma_k\left(u_k^2+v_k^2\right)+2\beta_k u_k v_k\right\}b_k^+ b_k+$$
$$+\sum_{k}\underbrace{\left\{\frac{1}{2}\beta_k\left(u_k^2+v_k^2\right)+\gamma_k u_k v_k\right\}}_{=0}\left(b^+_{k}b^+_{-k}+b_{-k}b_k\right)$$

Funkcije u i v odredićemo tako da izraz (I.3.5.) postane dijagonalan, a to znači da izjednačujemo sa nulom koeficijente ispred $(b^+ b^+ + b\, b)$

Ovo vodi na sistem jednačina

$$\gamma_k u_k v_k=-\frac{1}{2}\beta_k\left(u_k^2-v_k^2\right)$$
$$u_k^2-v_k^2=1$$

iz koga se odredjuju u i v .

Rešenja ovog sistema su data sa

$$u_k^2=\frac{1}{2}\left\{\frac{\gamma_k}{\sqrt{\gamma_k^2-\beta_k^2}}+1\right\};\qquad u_k v_k=-\frac{1}{2}\frac{\beta_k}{\sqrt{\gamma_k^2-\beta_k^2}}$$
$$v_k^2=\frac{1}{2}\left\{\frac{\gamma_k}{\sqrt{\gamma_k^2-\beta_k^2}}-1\right\};\qquad (I.3.7.)$$

Nakon ovoga hamiltonijan (I.3.5.) postaje:

$$H=\frac{1}{2}\sum_{k}\left(E_k-\gamma_k\right)+\sum_{k}E_k b_k^+ b_k$$
$$E_k=\sqrt{\gamma_k^2-\beta_k^2}\qquad (I.3.8.)$$
$$E_k=\sqrt{(\lambda+\alpha_k)^2-\beta_k^2}$$

Zakon disperzije za eksitone

$$E_K = \frac{\partial H}{\partial(b_K^+ b_K)} = \sqrt{\gamma_K^2 - \beta_K^2}$$

$$\lambda \sim 3\text{-}5\, eV \sim E_f - E_0$$

$$\alpha, \beta \sim 0{,}1 - 0{,}01\, eV \sim W$$

$$\lambda \gg \alpha, \beta$$

$$E_K = \sqrt{(\lambda + \alpha_K)^2 - \beta_K^2}$$

$$= (\lambda + \alpha_K)\sqrt{1 + \frac{\beta_K}{(\lambda + \alpha_K)^2}} =$$

$$= (\lambda + \alpha_K)\left[1 - \frac{1}{2}\frac{\beta_K^2}{(\lambda + \alpha_K)^2}\right]$$

$$= \lambda + \alpha_K - \frac{1}{2}\frac{\beta_K^2}{\lambda + \alpha_K \to 0}$$

$$E_K \cong \lambda + \alpha_K - \frac{1}{2} \cdot \frac{\beta_K^2}{\lambda} \qquad (I.3.9.)$$

Poslednji član je došao od onih delova koji ne održavaju broj kvazi čestica, tj delova koji sadrže $P_K^+ P_{-K}^+$ i $P_K P_{-K}$

Očigledno ova popravka je mala jer je $\lambda \gg \beta_K$

Ako se ovaj efekat zanemari možemo uzeti približno:

$$\varepsilon_k = \lambda + \alpha_k$$

$$\alpha_k = \sum_m \alpha_{nm} e^{ik(m-n)} = \sum_m \alpha_{0m} e^{ikm} \quad \text{pri } n=0$$

Za prostu kubnu strukturu postoji 6 najbližih suseda

$$\alpha_k = \alpha\left(e^{iak_x} + e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{-iak_y} + e^{iak_z} + e^{-iak_z}\right)$$

gde je vrednost interakcije za najbliže susede

pa je dalje

$$\alpha_k = 2\alpha\left(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\right)$$

Za male talasne vektore kada je $k_i a \ll 1$

$$\cos k_i a \cong 1 - \frac{1}{2} k_i^2 a^2$$

$$\alpha_k = 6\alpha - \alpha a^2\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$$

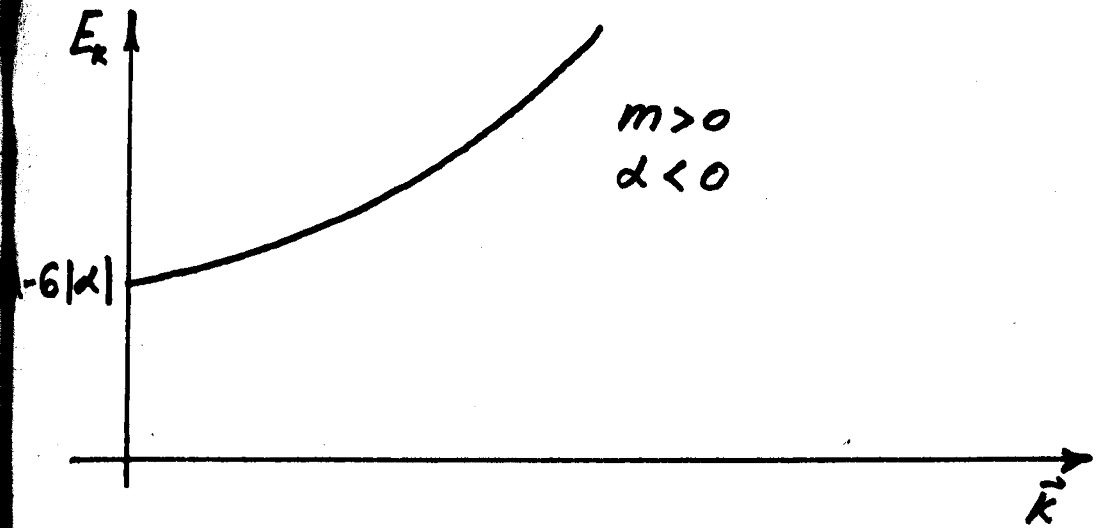
$$= 6\alpha - \alpha a^2 k^2$$

$$= 6\alpha - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{\hbar^2}}{\alpha a^2}$$

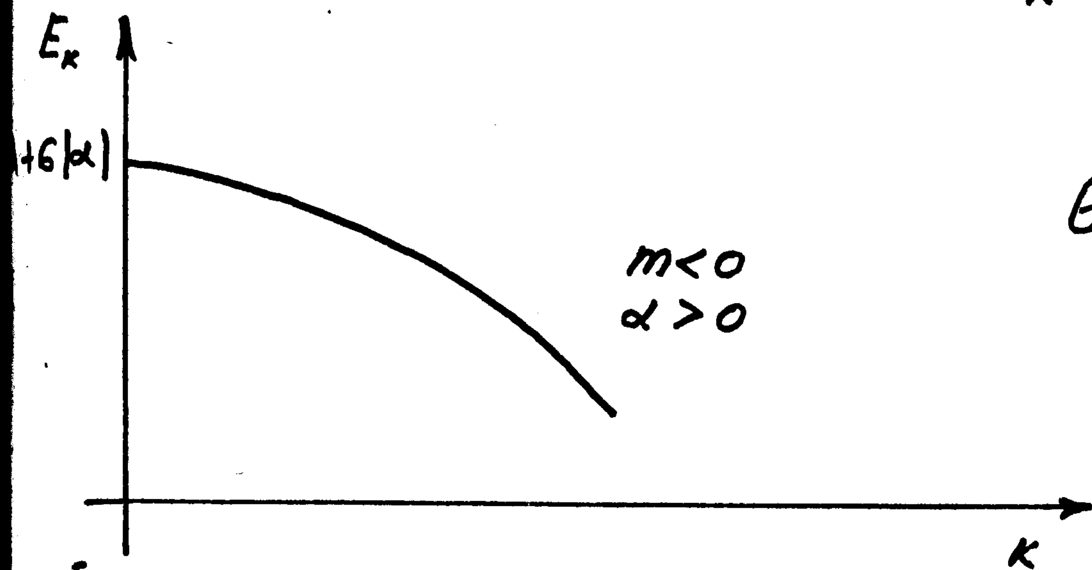
$$\left.\begin{aligned} \varepsilon_k &= \lambda + 6\alpha + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ 2m &= -\frac{\hbar^2}{\alpha a^2} \\ m &= -\frac{\hbar^2}{2a^2\alpha} \end{aligned}\right\} \quad I.3.10.$$

m - efektivna masa eksitona

$$m > 0, \quad \alpha < 0 \quad i \quad m < 0, \quad \alpha > 0$$



Grafik 1



Grafik2.

Na grafiku 1. prikaza je slučaj kada eksiton ima pozitivnu efektivnu masuili kako se to kaže ,svetlost ima pozitivnu disperziju (za kraće talasne dužine energija veća)

Na grafiku 2. prikazan je slučaj kada svetlost ima negativnu disperziju (za negativnu efektivnu masu),što znači što znači da joj sa porastom talasne dužine i energija raste.

II GLAVA , EKSITON - FONON INTERAKCIJA

II. 1. F O N O N I

Ako su u kristalu dominantne dvočestične interakcije izmedju njegovih sastavnih delova (molekula ili atoma), onda se ukupna potencijalna energija kristala može napisati kao

$$U=\frac{1}{2}\sum_{nm} V(\vec{n}-\vec{m}) \tag{II.1.1.}$$

$\vec{n}$ i $\vec{m}$ su vektori čvorova rešetke na apsolutnoj nuli. Pri povišenju temperature atomi počinju da osciluju i svaki od čvorova rešetke dobija neki priraštaj $\vec{U}_{\vec{n}}$ tj

$$\vec{n}\to\vec{n}+\vec{U}_{\vec{n}} \quad i \quad \vec{m}\to\vec{m}+\vec{U}_{\vec{m}} \tag{II.1.2.}$$

S obzirom na (II.1.2.) i činjenicu da su pomaci U_{nm} mali, potencijalnu energiju kristala možemo posle razvijanja funkcije u red napisati kao

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

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

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

$$+\frac{1}{4}\sum_{nm\alpha\beta}(U^{\alpha}_{\vec{n}}-U^{\alpha}_{\vec{m}})(U^{\beta}_{\vec{n}}-U^{\beta}_{\vec{m}})\frac{\partial^2}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\alpha}\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\beta}}V(\vec{n}-\vec{m})$$

$$\alpha,\beta=x,y,z \tag{II.1.3.}$$

$U_{\vec{n}}^{\alpha}$ je projekcija vektora U_n na osu α. Pošto funkcija $V(\vec{n}-\vec{m})$ mora imati ekstremume izmedju čvorova to je

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

za sve n , m i α

Druge izvode koji figurišu u formuli (II.1.3.) označićemo sa:

$$\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})=\frac{\partial^2 V(\vec{n}-\vec{m})}{\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\alpha}\partial(\vec{n}-\vec{m})_{\beta}} \qquad \text{(II.1.4.)}$$

Ove funkcije, očigledno, imaju sledeća svojstva simetrije

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

Ako odbacimo prvi član iz formule (II.1.3.), jer on predstavlja potencijalnu energiju zamrznutog kristala, onda nam, kao potencijalna energija nastala usled povišenja temperature ostaje izraz:

$$U_{fm}=\frac{1}{4}\sum_{nm\alpha\beta}\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})(U_{\vec{n}}^{\alpha}-U_{\vec{m}}^{\alpha})(U_{\vec{n}}^{\beta}-U_{\vec{m}}^{\beta}) \qquad (II.1.6)$$

Sila na n-ti čvor (tj njena α -komponenta), data je kao negativni izvod potencijalne energije po projekciji tj.

$$F_{\vec{n}}^{\alpha}=\frac{\partial U_{fm}}{\partial U_{\vec{n}}^{\alpha}}=-\sum_{\vec{m}\beta}\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{m})(U_{\vec{n}}^{\beta}-U_{\vec{m}}^{\beta}) \qquad (II.1.7)$$

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

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

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

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

Ako sa M označimo masu atoma onda na osnovu II Njutnovog zakona možemo pisati:

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

$$(II.1.9)$$

Ako predpostavimo da su komponente pomaka $U^{\alpha}_{\vec{n}}$ periodične funkcije prostora i vremena, tj $U^{\alpha}_{\vec{n}} = A^{\alpha} e^{i\vec{k}\vec{n} - i\omega_{\vec{k}} t}$ (II.1.10)

onda zamenom (II.1.lo.) u (II.1.9.) dobijamo sledeći homogeni sistem jednačina za odredjivanje komponenti atomskih pomeraja.

$$\left.\begin{array}{l} \left[\Lambda_{xx} - \frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega^2_{\vec{k}}\right] U^x_{\vec{n}} + \Lambda_{xy} U^y_{\vec{n}} + \Lambda_{xz} U^z_{\vec{n}} = 0 \\ \Lambda_{yx} U^x_{\vec{n}} + \left[\Lambda_{yy} - \frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega^2_{\vec{k}}\right] U^y_{\vec{n}} + \Lambda_{yz} U^z_{\vec{n}} = 0 \\ \Lambda_{zx} U^x_{\vec{n}} + \Lambda_{zy} U^y_{\vec{n}} + \left[\Lambda_{yy} - \frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega^2_{k}\right] U^z_{\vec{n}} = 0 \end{array}\right\} \quad (II.1.11)$$

gde je

$$f_{\vec{k}} = \sum_{\vec{\nu}} \left(1 - e^{i\vec{k}\vec{\nu}}\right) \qquad II.1.12.$$

Da bi ovaj sistem imao netrivijalna rešenja ,determinanta sistema mora biti jednaka nuli.Tj determinanta

$$\begin{vmatrix} \Lambda_{xx} - \frac{M}{f_{\vec{k}}}\omega^2_{\vec{k}} & \Lambda_{xy} & \Lambda_{xz} \\ \Lambda_{yx} & \Lambda_{yy} - \frac{M}{f_{k}}\omega^2_{k} & \Lambda_{yz} \\ \Lambda_{zx} & \Lambda_{zy} & \Lambda_{zz} - \frac{M}{f_{k}}\omega^2_{k} \end{vmatrix} = 0 \qquad (II.1.13)$$

Ova jednačina daje tri dozvoljene frekvance fonona.

U daljem mi ćemo se ograničiti na prostu jednodimenzionu rešetku.Tada je

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

f-ja se svodi na

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

i dobijamo

$$\omega_{\vec{k}} = 2\sqrt{\frac{\Lambda}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| ; \quad \Lambda \equiv \Lambda_{xx}$$

$$(II.1.14)$$

Za slučaj malih talasnih vektora formula (II.1.14.) postaje

$$\omega_k = ck \quad ; \quad c = a\sqrt{\frac{\Lambda}{M}} \quad c\text{-brz. zvuka} \qquad (\mathrm{II}.1.15.)$$

Za jednodimenzionu rešetku kinetička energija ima oblik

$$T = \frac{M}{2}\sum_n \dot{u}_n^2 \qquad (\mathrm{II}.1.16)$$

a potencijalna, na osnovu formule (II.1.6.), za najbliže susede:

$$U_{fon} = \frac{\Lambda}{2}\sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 \qquad (\mathrm{II}.1.17.)$$

tako da je totalni hamiltonijan sistema

$$H = T + U_{fon} = \frac{M}{2}\sum_n \dot{u}_n^2 + \frac{\Lambda}{2}\sum_n (u_{n+1} - u_n) \qquad (\mathrm{II}.1.18)$$

Umesto rešenja tipa (II.1.1o.) uzmimo linearnu kombinaciju

$$u_n = \sum_k D_k \left(c_k e^{ikna - i\omega_k t} + c_k^+ e^{-ikna + i\omega_k t} \right) \qquad (\mathrm{II}.1.19)$$

koja takodje zadovoljava jednačinu

$$M\ddot{u}_n = \Lambda (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

pri $\qquad (\mathrm{II}.1.20.)$

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\Lambda}{M}}\sin\frac{ka}{2}$$

Zamenom (II.1.19.) u (II.1.18.), hamiltonijan kuplovanih oscilatora, (II.1.18.) u prostoru rešetke svodimo na hamiltonijan sume nezavisnih oscilatora u prostoru inverzne rešetke (Impulsni prostor)

$$H = \sum_k \left(c_k^+ c_k + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_k \qquad (\mathrm{II}.1.21.)$$

Pošto ima oblik

$$u_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \left(c_k e^{ikna - i\omega_k t} + c_k^+ e^{-ikna - i\omega_k t} \right) \qquad (\mathrm{II}.1.22.)$$

Boze operatori c_k i c_k^+ anihiliraju i kreiraju fonone sa talasnim vektorom k.

Na ovaj način smenom (II.1.22.) se sistem vezanih oscilatora opisan hamiltonijanom (II.1.18.), svodi na sumu hamiltonijana nezavisnih oscilatora (II.1.21.). Zakon disperzije za fonone, tj zavisnost frekvence ω od talasnog vektora k, data je formulom (II.1.14.).

Za male talasne vektore imamo linearni zakon disperzije $\omega_k = ck$ gde je brzina zvuka

$$c = a\sqrt{\frac{\Lambda}{M}}$$

Za slučaj tri dimenzije dozvoljene frekvence su odredjene izrazom (II.1.13.) /determinanta/. Ova jednačina bi-kubna i daje tri pozitivna rešenja za frekvence ω. U slučaju složene rešetke sa δ molekula-atoma u elementarnoj ćeliji jednačina tipa (II.1.13.) bila bi složenija i davala bi 3δ rešenja za dozvoljene frekvence fonona.

U slučaju proste ćelije sve tri frekvence dobijene iz (II.1.13.) teže nuli kada $k \to 0$ i takvi fononi nazivaju se a k u s t i č n i .

Kod složene rešetke za tri frekvencije važi isto pravilo $k \to 0, \omega_k \to 0$ a za preostale $3\delta - 3$ frekvencije, frekvencije ne postaju ravne nuli kada k teži nuli i takvi fononi se nazivaju O P T I Č K I fononi.

Za slučaj proste prostorne rešetke svakoj od tri akustičke frekvencije odgovara jedan polarizacioni vektor $\vec{l}_j(\vec{k})$, j=1,2,3 i ovi vektori zadovoljavaju uslov

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

Ova tri vektora odgovaraju trima komponentama zvuka; jednoj longitudinalnoj i dvema transverzalnima.

Hamiltonijan sistema i operator pomaka imaju sledeći izgled

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}j} \left(C^{+}_{\vec{k}j} C_{\vec{k}j} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\vec{k}j}$$

$$j = 1, 2, 3$$

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

II.2. STANDARDNI TRETMAN EKSITON - FONON INTERAKCIJE

Startovaćemo od eksitonskog hamiltonijana u harmonijskoj aproksimaciji i zanemarićemo efekte neodržanja

$$H=\sum_n \Delta_f B_n^+ B_n + \sum_{nm} \overbrace{W_{nm}(f00f)}^{D_{nm}} B_n^+ B_n +$$

$$+ \sum_{nm} \underbrace{W_{nm}(f0f0)}_{M_{nm}} B_n^+ B_m$$

$$H=\sum_n \Delta B_n^+ B_n + \sum_{nm} D_{nm} B_n^+ B_n +$$

$$+ \sum_{nm} M_{nm} B_n^+ B_m \qquad (II.2.1.)$$

Ovaj hamiltonijan važi za slučaj kada se svi molekuli nalaze u svojim ravnotežnim položajima. Čim je kristal zagrejan, molekuli počinju da osciluju oko svojih ravnotežnih položaja što se da izraziti na sledeći način

$$n \to n + u_n \quad ; \quad m \to m + u_m$$

gde su u_n i u_m pomeraji atoma iz ravnotežnih položaja i predstavljaju vektore koji su funkcije čvora rešetke i vremena i za niske temperature intenzitet im je manji od konstante rešetke.

$$H=\Delta \sum_n B_n^+ B_n + \sum_{nm} D_{nm} B_n^+ B_n + \sum_{nm} M_{nm} B_n^+ B_m$$

$$D_{n-m+u_n-u_m} = \frac{1}{N} \sum_{k_3} D_{k_3} e^{ik_3(n-m+u_n-u_m)}$$

$$M_{n-m} = \frac{1}{N} \sum_{k_3} D_{k_3} e^{ik_3(n-m+u_n-u_m)} \qquad (II.2.2.)$$

$$B_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} B_{k_1}^+ e^{ik_1 n} \quad i \quad B_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} B_{k_1} e^{ik_1 n}$$

Toda

$$\Delta \sum_n B_n^+ B_n = \frac{\Delta}{N} \sum_{kq} B_q^+ B_k \sum_k e^{in(k-q)}$$

$$= \frac{\Delta}{N} \sum_{kq} B_q^+ B_k \, N \delta_{kq} = \Delta \sum_k B_k^+ B_k$$

Dalje je

$$\sum_{nm} D_{nm} B_n^+ B_n = \frac{1}{N^3} \sum_{k_1 k_2 k_3} D_{k_3} B_{k_1}^+ B_{k_2} \sum_{nm} e^{in(k_2+k_3-k_1) + iU_n k_3} \times$$
$$\times e^{-imk_3 - iU_m k_3}$$

$$\cong \frac{1}{N^3} \sum_{k_1 k_2 k_3} D_{k_3} B_{k_1}^+ B_{k_2} \sum_n e^{in(k_2+k_3-k_1)} \sum_m e^{-imk_3} +$$

$$+ \frac{1}{N^3} \sum_{k_1 k_2 k_3} D_{k_3} B_{k_1}^+ B_{k_2} k_3 \sum_{nm} (U_n - U_m) e^{in(k_2+k_3-k_1) - imk_3}$$

Prvi član postoje

$$\sum_k D_0 B_k^+ B_k$$

U drugom članu uzimamo

$$U_n = \sum_{qj} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{qj}}} \, \vec{l}_{qj} \, (C_{-qj} + C_{qj}^+) e^{-iqn}$$

$$U_m = \sum_{qj} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{qj}}} \, \vec{l}_{qj} \, (C_{-qj} + C_{qj}^+) e^{-iqm}$$

Pa se dobija

$$\frac{1}{N^2}\sum_{k_1k_2k_3} D_{k_3} B^+_{k_1} B_{k_3}\, k_3 \sum_{nm} (U_n - U_m) e^{in(k_2+k_3-k_1) - imk_3}$$

$$= \frac{1}{N^{5/2}} \sum_{k_1k_2k_3qj} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{qj}}} (\vec{k}_3 \vec{l}_{qj}) D_{k_3} B^+_{k_1} B_{k_2} (C_{-qj} + C^+_{qj}) \times$$

$$\times \left\{ \sum_n e^{in(k_2+k_3-q-k_1)} \sum_m e^{imk_3} - \sum e^{in(k_2+k_3-k_1)} \sum_m e^{-im(k_3+q)} \right\} =$$

$$= i \sum_{kqj} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{qj}N}}\, D_q (\vec{q}\vec{l}_{qj}) B^+_{k-q} B_k (C_{-qj} + C^+_{qj})$$

Na analogan način dobijamo

- $\sum_{nm} M_{nm} B^+_n B_m$ prelazi u

$$\sum_k M_k B^+_k B_k + i \sum_{kqj} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{qj}}} \left\{ (k l_{qj}) M + [(k-q) l_{qj}] M_{k-q} \right\} \times$$

$$\times B_{k-q} B_k (C_{-qj} + C^+_{qj})$$

Na osnovu ovoga možemo napisati

$$H = H_{eks} + H_{int} \qquad (II.2.3)$$

gde je $H_{eks} = \sum_k (\Delta + D_0 + M_k) B^+_k B_k \qquad (II.2.4)$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kqj} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{qj}}} \left\{ D_q (q l_j) + M_k (k l_{qj}) + M_{k-q} [(k-q) \vec{l}_{qj}] \right\} \times$$

$$\times B^+_{k-q} B_k (C_{-qj} + C^+_{qj}) \qquad (II.2.5)$$

Izraz (II.2.5.) predstavlja standardni izraz za hamiltonijan eksiton-fonon interakcije u linearnoj aproksimaciji po malim pomacima molekula.

II. 3. NOVI PRILAZ EKSITON - FONON INTERAKCIJI

Dok smo u standardnom prilazu razvijali po malim pomacima samo matrične elemente D_{nm} i M_{nm}, u novom prilazu razvijaćemo po malim pomacima i operatore B_n^+ i B_n pošto su i oni takodje funkcije položaja u rešeci. To znači da imamo hamiltonijan (II.2.1)

$$H=\sum_n \Delta B_n^+ B_n + \sum_{nm} D_{nm} B_n^+ B_n + \\ + \sum_{nm} M_{nm} B_n^+ B_m \qquad (II.3.1)$$

Potrebno je izvršiti sledeće transformacije (razvoje) u njemu

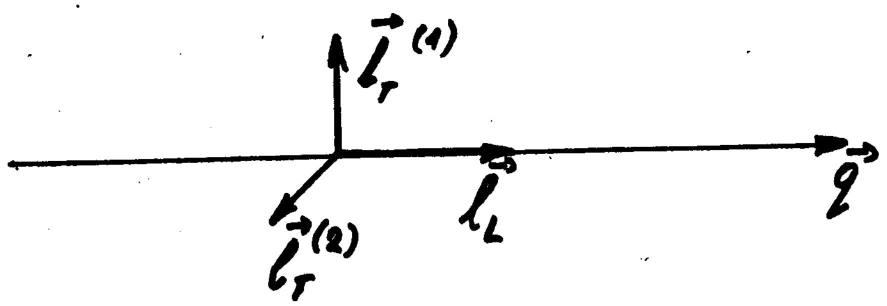
$$\left.\begin{aligned} &D_{nm} \equiv D_{n-m} \to D_{n-m+(u_n-u_m)} = \\ &= \frac{1}{N}\sum_{k_3} D_{k_3} e^{ik_3(n-m+ik_3(u_n-u_m)} \\ &M_{nm} \equiv M_{n-m} \to M_{n-m+(u_n-u_m)} = \\ &= \frac{1}{N}\sum_{k_3} M_{k_3} e^{ik_3(n-m)+ik_3(u_n-u_m)} \\ &B_n^+ \to B_{n+u_n}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_1} B_{k_1}^+ e^{-ik_1n-ik_1u_n} \\ &B_m \to B_{m+u_m} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k} B_k e^{-ikm-iku_m} \end{aligned}\right\} (II.3.1.)$$

Sa analognim izvodjenjem kao i ranije mi dolazimo do novog hamiltonijana interakcije.

$$H_{int}^{eff} = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{kqj} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{qj}}} \left(\vec{q}\cdot\vec{e}_{qj}\right) \times \qquad (\text{II}.3.2)$$

$$\times \left(\Delta + D_0 + D_q + M_k + M_{k-q}\right) B^{+}_{k-q} B_k \left(C_{-qj} + C^{+}_{qj}\right)$$

Treba napomenuti da su i operatori i matrični elementi razvijeni do linearnih članova po pomacima. Kao što se vidi iz rezultata (II.3.2.) novi prilaz daje daleko jaču eksiton - fonon interakciju, jer u njemu figuriše energija pobudjenja izolovanih molekula Δ, koja je daleko veća od $\mathcal{D}$ i , Osim toga interakcija postoji samo sa longitudinalnom granom što se vidi iz faktora $(\vec{q} \cdot \vec{l}_{q_j})$



Potrebno je napomenuti da u standardnom prilazu postoji i interakcija sa transverzalnim granama mada je ona slaba.

III GLAVA

BOZE KONDENZACIJA U SISTEMU KULONOVIH EKSITONA

III . 1. OPŠTE O BOZE KONDENZACIJI.SPEKTAR He^4

Godine 1939. Kapica je eksperimentalno ustanovio da se prilikom protioanja kroz kapilare $_2He^4$ u tečnom stanju kreće bez trenja.

Pre nego što predjemo na objašnjenje samog fenomena, analiziraćemo uslov kretanja bez trenja

Ako uočimo količinu tečnosti mase M koja se kreće brzinom $\vec{v}$, onda je njena energija

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2} M v^2 \qquad (III.1.1.)$$

U slučaju da postoji trenje sa zidovima suda tečnost će imati neku energiju E koja mora biti manja od E_0 ($E < E_0$),jer se deo E_0 pretvara u toplotu usled trenja na zidovima.Činjenicu da trenje postoji predstavićemo sebi tako da se usled trenja u tečnosti pojavljuju elementarne ekscitacije sa impulsom $\vec{p}$ i energijom $\mathcal{E}_p$. Da uprostimo posmatranja uzmimo slučaj kada se pojavi samo jedna elementarna ekscitacija. Pošto se u sistemu pojavio dodatni impuls $\vec{p}$; ukupni impuls tečnosti je

$$\vec{Q} = M\vec{v} + \vec{p} \qquad (III.1.2)$$

a kinetička energija je .

$$\mathcal{E} = \frac{Q^2}{2M} + \mathcal{E}_{\vec{p}} = \frac{(M\vec{v}+\vec{p})^2}{2M} + \mathcal{E}_{\vec{p}} =$$

$$= \frac{1}{2} M v^2 + pv + \cancel{\frac{p^2}{2M}}^{\,0} + \mathcal{E}_p \cong \mathcal{E}_0 + pv + \mathcal{E}_{\vec{p}} \qquad (III.1.3)$$

pošto je $\mathcal{E} < \mathcal{E}_0$ to sledi da je

$$\vec{p}\vec{v} + \mathcal{E}_p < 0 \qquad (III.1.5)$$

Ovaj uslov (uslov da se tečnost kreće sa trenjem) u ovom optimalnom obliku u korist trenja glasi:

$$\varepsilon_{\vec{p}} - pv < 0$$

što znači da su impulsi elemnetarnih ekscitacija suprotnog smera od kretanja tečnosti.

Očigledno je da ako je ispunjen suprotan zahtev tj

$$\varepsilon_{\vec{p}} - pv > 0$$

onda se tečnost kreće bez trenja. Ovaj uslov može se napisati kao

$$\frac{\varepsilon_p}{p} > v$$

Pošto je $v > 0$ to znači da je uslov za kretanje bez trenja (uslov da tečnost pri kretanju dobija, a ne da gubi energiju) da fazna brzina elementarne ekscitacije bude pozitivna

$$\frac{\varepsilon_p}{p} > 0$$

Kako fazna brzina zavisi od impulsa, evako napisan uslov mogao bi za neke impulse da bude ispunjen a za neke ne. Da bi smo se obezbedili da efekat imamoza sve moguće impulse mi postavljamo strožiji uslov

$$Min\left(\frac{\varepsilon_p}{p}\right) > 0$$

i ovo je uslov za proticanje tečnosti bez trenja.

Pelufenomenološku teoriju fenomena koji je otkrio Kapica, dao je Landau. On je predpostavio da se u oblasti malih impulsa u tečnom heliju pojavljuju zvučni talasi (fononi) sa zakomom disperzije:

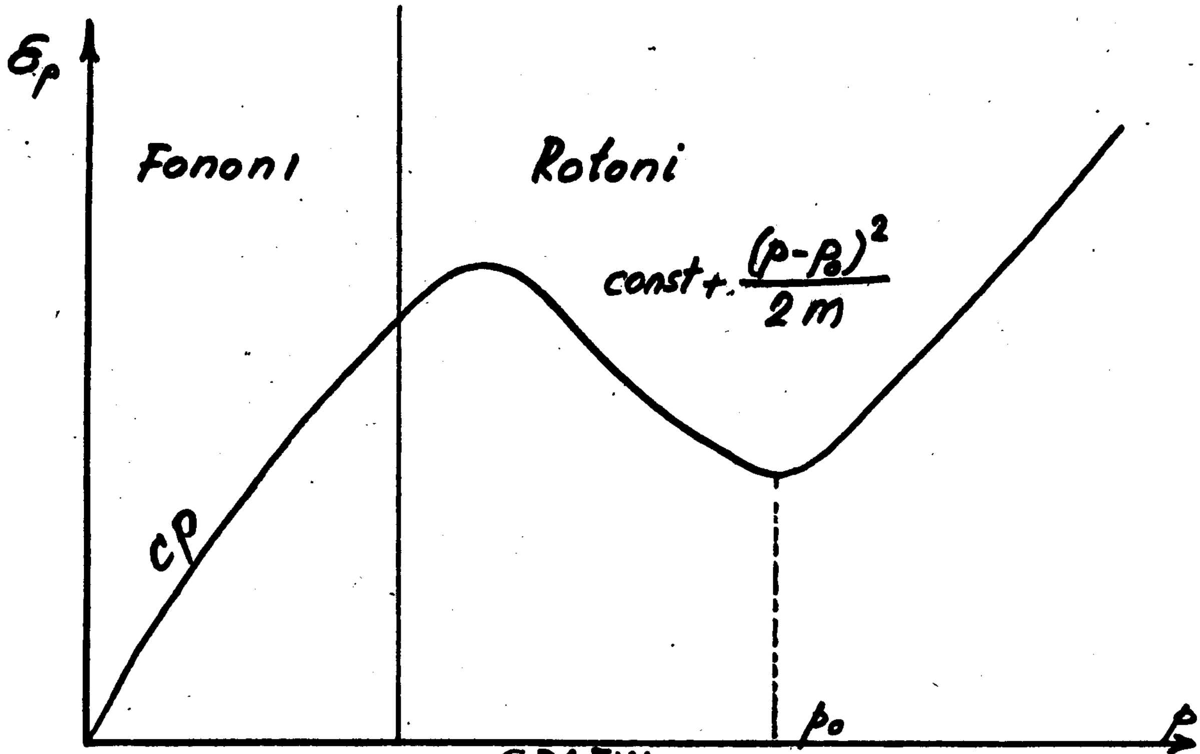
$$\varepsilon_p = cp$$

gde je c - brzina zvuka

U oblasti velikih impulsa po njemu preovladjuju ekscitacije rotacionog tipa (rotiranje atoma He^4) a ove imaju kvadratni zakon disperzije oblika

$$\varepsilon_p = const + \frac{(p-p_0)^2}{2m}$$

Ove elemntarne ekscitacije on je nazvao r o t o n i .



GRAFIK

Kriva koju je dobio Landau ima pozitivan minimum fazne brzine i zbog toga je ispunjen uslov superfluidnosti.

Strogo mikroskopsku teoriju dao je Bogoljubov. On je pre svega uočio da pojavu superfluidnosti imamo kod He^4 dok je kod He^3 nemamo. Jedina razlika izmedju ova dva izotopa je ta što je ukupan spin kod He^4 ravan nuli, pa je on Boze čestica, dok je spin He^3 jednak 1/2, pa je on Fermi čestica. S druge strane u prirodi postoji težnja da se zauzima minimum energije, a pošto se radi o kinetičkoj energiji to znači da čestice teže da se nadju u stanju p=o ; što se tiče atoma He^3 Paulijev princip dozvoljava da ovo stanje zauzme samo jedan atom, dok u slučaju He^4 koji je Boze čestica ovakva zabrana ne postoji tako da se najveći deo atoma nalazi u stanju sa impulsom p=o i obrazuje tzv kondenzat. Sama pojava taloženja na impulsu p=o naziva se BOZE KONDENZACIJA.

Na osnovu ovakvih fizičkih predstava Bogoljubov je izgradio mikro teoriju fenomena superfluidnosti u tečnom He^4. On je tečni He^4 razmatrao kao sistem bozona sa dvočestičnim interakcijama. U reprezentaciji P D K hamiltonijan ovog sistema može se napisati kao

$$H=\sum_n \beta_n^+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_n\right)\beta_n+\frac{1}{2}\sum_{nm}\Phi_{nm}\beta_n^+\beta_m^+\beta_m\beta_n$$

gde su operatori β_n^+ i β_m, operatori kreacije i anihilacije atoma heliju-ma na pojedinim mestima u prostoru. Ako se izvrši Furije transformacije operatora β_n^+ i β_m imamo

$$\beta_n=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \beta_k e^{ikn}$$

$$\beta_n^+=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \beta_k^+ e^{-ikn}$$

$$\sum_n \beta_n^+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_n\right)\beta_n=$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{k_1,k,n}\beta_{k_1}^+ e^{-ik_1 n}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\Delta_n\beta_k e^{ikn}=$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{k_1,k}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\beta_{k_1}^+\beta_k\boxed{\sum_n e^{in(k-k_1)}}\to N\delta_{k_1,k}$$

$$=\sum_k\frac{\hbar^2k^2}{2m}\beta_k^+\beta_k$$

$$\frac{1}{2}\sum_{nm}\Phi_{n-m}\beta_n^+\beta_m^+\beta_m\beta_n=$$

$$=\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\beta_{k_1}^+\beta_{k_2}^+\beta_{k_3}\beta_{k_4}\sum_{nm}\Phi_{\underbrace{n-m}_{l}}e^{in(k_4-k_2)+im(k_3-k_1)}$$

$$=\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\beta_{k_1}^+\beta_{k_2}^+\beta_{k_3}\beta_{k_4}\sum_{ln}\Phi_l e^{il(k_3-k_1)}e^{in(k_4+k_3-k_2-k_1)}$$

$$=\frac{1}{2N^2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\beta^+_{k_1}\beta^+_{k_2}\beta_{k_3}\beta_{k_4}\underbrace{\sum_l \Phi_l e^{il(k_3-k_1)}\sum_n e^{in(k_1+k_2-k_3-k_4)}}_{N\,\delta_{k_1+k_2,\,k_3+k_4}}$$

$$\Phi_{k_3-k_1}=\Phi_{k_1-k_3}$$

$$=\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\Phi_{k_1-k_3}\beta^+_{k_1}\beta^+_{k_2}\beta_{k_3}\beta_{k_4}\delta_{k_1+k_2,\,k_3+k_4}$$

Konačno, u impulsnom prostoru

$$H=\sum_k\frac{\hbar^2k^2}{2m}\beta^+\beta_k+$$

$$+\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\Phi_{k_1-k_3}\beta^+_{k_1}\beta^+_{k_2}\beta_{k_3}\beta_{k_4}\delta_{k_1+k_2,\,k_3+k_4}$$

gde je Φ_K realna i parna f-ja.

Pošto se osnovni deo atoma helijuma nalazi u kondezatu to ima smisla izdvojiti ove delove hamiltonijana koji odgovaraju impulsu nula i onaj deo koji odgovara impulsima p $\neq$ o.

Prema osnovnoj predpostavci broj bozona u kondenzatu $N_0=\beta^+_0\beta_0$ veoma je blizak ukupnom broju atoma N .

Strogo govoreći

$$N=N_0+N_p\quad;\quad N_p=\sum_{p\neq 0}\beta^+_p\beta_p$$

$$N_p\ll N_0$$

Osim ovoga operatori kondenzatnih bozona β_0^+ i β_0 poseduju još jedno svojstvo, a to je da medjusobno praktično komutiraju u svim odnosima pa se oni mogu praktično zameniti brojevima.

$$\beta_0^+\beta_0 = N_0 \sim 10^{24}; \quad \beta_0\beta_0^+ = N_0 + 1 \approx N_0$$

$$\beta_0\beta_0^+ - \beta_0^+\beta_0 = 0 \quad ; \quad \beta_0 = \beta_0^+ = \sqrt{N_0}$$

Sada ćemo izvršiti razdvajanje u hamiltonijanu pri čemu ćemo uzimati one delove gde je paran broj impulsa jednak nuli, jer oni daju popravke u prvoj aproksimaciji teorije perturbacija. Doprinosi od članova gde je neparan brij impulsa ravan nuli dobijaju se tek u drugom redu teorije perturbacija i nećemo ih uzimati u obzir.

$$H = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\beta_k^+\beta_k = \sum_{k\neq 0} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\beta_k^+\beta_k$$

$$H = \frac{1}{2}\sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \Phi_{k_1 - k_3}\beta_{k_1}^+\beta_{k_2}^+\beta_{k_3}\beta_{k_4}\,\delta_{k_1+k_2,\,k_3+k_4}$$

Rastavljanje vršimo po sledećoj šemi

k_1	k_2	k_3	k_4	
0	0	0	0	I
k_1	k_2	0	0	II
k_1	0	k_3	0	III
k_1	0	0	k_4	IV
0	k_2	k_3	0	V
0	k_2	0	k_4	VI
0	0	k_3	k_4	VII
k_1	k_2	k_3	k_4	VIII

$$I \quad \frac{1}{2N}\Phi_0\beta_0^+\beta_0^+\beta_0\beta_0\,\delta_{0,0} = \frac{1}{2N}\Phi_0 N_0^2$$

$\overline{II}$ $\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2}\phi_{k_1}\beta^+_{k_1}\beta^+_{k_2}\overbrace{\boxed{\beta_0\beta_0}}^{N_0}\delta_{k_2,-k_1} =$

$= \frac{N_0}{2N}\sum_{k_1}\phi_{k_1}\beta^+_{k_1}\beta_{-k_1} = \frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\phi_k\beta^+_k\beta^+_{-k}$

$\overline{III}$ $\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_3}\phi_{k_1-k_3}\beta^+_{k_1}\beta^+_0\beta_{k_3}\beta_0\,\delta_{k_3,k_1}$

$\frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\phi_0\beta^+_k\beta_k$

$\overline{IV}$ $\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_4}\phi_{k_1}\beta^+_{k_1}\beta^+_0\beta_0\beta_{k_4}\,\delta_{k_4,k_1} =$

$= \frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\phi_k\beta^+_k\beta_k$

$\overline{V}$ $\frac{1}{2N}\sum_{k_2k_3}\phi_{k_3}\beta^+_0\beta^+_{k_2}\beta_{k_3}\beta_0\,\delta_{k_3,k_2}$

$\frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\phi_k\beta^+_k\beta_k$

$\overline{VI}$ $\frac{1}{2N}\sum_{k_2k_4}\phi_0\beta^+_0\beta^+_{k_2}\beta_0\beta_{k_4}\,\delta_{k_4,k_2}$

$\frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\phi_0\beta^+_k\beta_k$

$$\frac{1}{2N}\sum_{k_3k_4}\Phi_{k_3}\beta_0^+\beta_0^+\beta_{k_3}\beta_{k_4}\delta_{k_4,-k_3}$$

$$\frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\Phi_k\beta_{-k}\beta_k$$

$$\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2k_3\neq 0}\Phi_{k_1-k_3}\beta_{k_1}^+\beta_{k_2}^+\beta_{k_3}\beta_{k_1+k_2-k_3}$$

Znači,

$$H=\frac{N_0^2}{2N}\Phi_0+\sum_{k\neq 0}\left\{\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\frac{N_0}{N}\Phi_k\right\}\beta_k^+\beta_k+$$

$$+\frac{N_0}{N}\Phi_0\sum_{k\neq 0}\beta_k^+\beta_k+\frac{N_0}{2N}\sum_{k\neq 0}\Phi_k(\beta_k^+\beta_{-k}^++\beta_{-k}\beta_k)+$$

$$+\frac{1}{2N}\sum_{k_1k_2k_3\neq 0}\Phi_{k_1-k_3}\beta_{k_1}^+\beta_{k_2}^+\beta_{k_3}\beta_{k_1+k_2-k_3}$$

Dalje posmatramo samo kvadratni deo hamiltonijana

$$H=\frac{N_0^2}{2N}\Phi_0+\frac{N_0}{N}\Phi_0N_p+\sum_{k\neq 0}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\frac{N_0}{N}\Phi_k\right)\beta_k^+\beta_k+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_k\frac{N_0}{N}\Phi_k\left(\beta_k^+\beta_{-k}^++\beta_{-k}\beta_k\right)$$

$$N_0 = N - N_p$$

$$N_0^2 = N^2 - 2NN_p + \cancel{N_p^2} \cong N^2 - 2NN_p$$

Onda

$$\frac{N_0^2}{2N}\Phi_0 + \frac{N_0}{N}\Phi_0 N_p = \frac{1}{2}N\Phi_0 - N_p\Phi_0 + \frac{N_0}{N}\Phi_0 N_p$$

$$= \frac{1}{2}N\Phi_0 - N_p\Phi_0 + N_p\Phi_0 - \cancel{\Phi_0 N_p^2} = \frac{1}{2}N\Phi_0$$

Imaćemo $\quad N_0 \approx N$

$$H = \frac{1}{2}N\Phi_0 + \sum_{k\neq 0} \mathcal{L}_k \beta_k^+\beta_k + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}\varphi_k\left(\beta_k^+\beta_{-k}^+ - \beta_{-k}\beta_k\right)$$

$$\mathcal{L}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Phi_k$$

$$\varphi_k = \Phi_k$$

Od Boze operatora β_k^+ i β_k predjemo na nove Boze operatore θ_k^+ i θ_k preko kanonične transformacije

$$\beta_k = \tilde{u}_k\theta_k + \tilde{v}_k\theta_{-k}^+$$

$$\beta_k^+ = \tilde{u}_k\theta_k^+ + v_k\theta_{-k}$$

$$\tilde{u}_k^2 - \tilde{v}_k^2 = 1$$

Odredjivanje $\tilde{u}_k$ i, $\tilde{v}_k$ tako da otpadnu nedijagonalni delovi po operatorima θ_k^+ i θ_k pa imamo

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{L}_k}{\sqrt{\mathcal{L}_k^2 - \varphi_k^2}} + 1\right); \quad \tilde{v}_k = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{L}_k}{\sqrt{\mathcal{L}_k^2 - \varphi_k^2}} - 1\right)$$

$$\tilde{u}_k^2 + \tilde{v}_k^2 = \frac{\mathcal{L}_k}{\sqrt{\mathcal{L}_k^2 - \varphi_k^2}}; \quad u_k v_k = -\frac{1}{2}\frac{\varphi_k}{\sqrt{\mathcal{L}_k^2 - \varphi_k^2}}$$

$$H = H_0 + H_2$$

$$H_0 = \frac{1}{2}N\phi_k + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}(E_k - \mathcal{L}_k) + \sum_{k\neq 0} E_k \theta_k^+ \theta_k$$

$$E_k = \sqrt{\mathcal{L}_k^2 - \varphi_k^2}$$

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 + \phi_k \frac{\hbar^2 k^2}{m}}$$

E_k predstavlja spektar elementarnih ekscitacija u tečnom helijumu. U teoriji Bogoljubova predpostavlja se da je ϕ_k slabo zavisnao od impulsa, pa se zamenjuje konstantom ϕ

U oblasti malih impulsa dominantan je član proporcionalan k^2, pa je:

$$(E_k)_{k\simeq 0} \cong \hbar k\sqrt{\frac{\Phi}{m}} = \hbar c k = cp$$

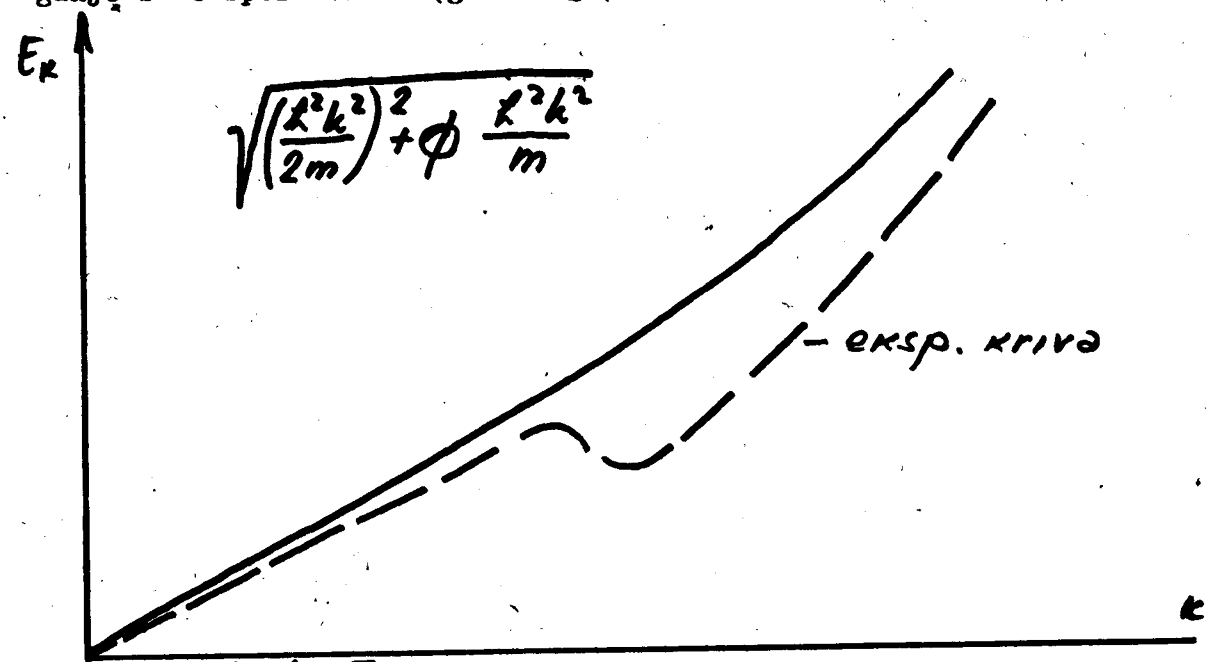
$$c = \sqrt{\frac{\Phi}{m}} = 240\,\frac{m}{sec} \quad (\text{eksperimentalno})$$

U oblasti velikih impulsa dominantan je član proporcionalan sa k^4, pa je

$$(E_k)_{k\simeq 10^7 - 10^8} \cong \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

tj kvazi čestice imaju kvadratni zakon disperzije.

Ovi rezultati odgovaraju fenonsko - rotonskoj slici Landaua. Treba napomenuti da kriva koju je dobio Bogoljubov pokazuje samo kvalitativno slaganje sa eksperimentom (grafik 3).



grafik 3

Ovo može da bude posledica zamene ϕ_k sa konstantom ϕ. Spektar Bogoljubova odražava osnovni eksperimentalni fakt, a to je superfluidnost tečnog He^4, jer zakon disperzije za elementarne ekscitacije u tečnom He^4, pokazuje da je minimum fazne brzine ovih ekscitacija pozitivan

$$E_p=\sqrt{\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)^2+\phi\,\frac{\hbar^2k^2}{m}}=\sqrt{\frac{p^4}{4m^2}+\phi\frac{p^2}{m}}=p\sqrt{\frac{p^2}{4m^2}+\frac{\phi}{m}}$$

$$\frac{E_p}{p}=\sqrt{\frac{p^2}{4m^2}+\frac{\phi}{m}}\;;\quad \frac{d}{dp}\left(\frac{E_p}{p}\right)=\frac{1}{2}\frac{p}{2m}\frac{1}{\sqrt{\frac{p^2}{4m^2}+\frac{\phi}{m}}}$$

$$\frac{d}{dp}\left(\frac{E_p}{p}\right)=0 \quad \text{za} \quad p=0$$

$$\min\frac{E_p}{p}=\sqrt{\frac{\phi}{m}}=c=240\,\frac{m}{sec}>0$$

III . 2. BOZE KONDENZACIJA KAO REZULTAT EKSITON - EKSITON INTERAKCIJE

Pre nego što pređemo na boze kondenzaciju koju izaziva eksiton - fonon interakcija, ukratko ćemo se osvrnuti na boze kondenzaciju koja dolazi kao rezultat eksiton - eksiton interakcije. Ovaj problem je detaljno opisan u knjizi V. M. Agranoviča (lit. 1. X glava) i mi ćemo ovde navesti samo osnovne elemente teorije koja je tamo izložena.

Eksitonski hamiltonijan ima oblik:

$$H=\Delta\sum_{\vec n}P_n^+P_n+\sum_{nm}{}'\alpha_{nm}P_n^+P_n+\frac{1}{2}\sum{}'\beta_{nm}\left(P_n^+P_m^+ + P_mP_n\right)+$$
$$+\sum_{nm}{}'\gamma_{nm}P_n^+P_m^+P_mP_n \qquad (III.2.1.)$$

gde je $\Delta\sim 5eV$, a α,β i $\gamma\sim 0{,}1-0{,}01\,eV$

Zbog toga se prilikom uračunavanja anharmonijskih efekata uzima u obzir samo onaj anharmonijski deo koji je proporcionalan Δ

Pošto je, prilikom prelaska na boze operatore

$$P_n^+P_n\cong B_n^+B_n-B_n^{+2}B_n^2 \qquad (III.2.2.)$$

za efektivni eksitonski hamiltonijan se uzima

$$H=\sum_k\frac{\hbar^2k^2}{2m}B_k^+B_k-\frac{1}{2}\sum_{nm}2\Delta\,\delta_{nm}\,B_n^+B_m^+B_mB_n \qquad (III.2.3)$$

gde je $m=\dfrac{\hbar^2}{2|\alpha|a^2}$ - efektivna masa eksitona.

Drugi član u formuli (III.2.3.) predstavlja rasejanje eksitona na tzv delta potencijalu $2\Delta\delta_{nm}$. Pokazano je (Ref. 10) da na ovakvim potencijalima dolazi do odbijanja eksitona pa je na osnovu toga moguć proces rasejanja na delta potencijalu. Ovo opet dovodi do boze kondenzacije i superfluidnosti eksitonskog gasa.S

Spektar eksitona u uslovima kondenzacije dat je u (Ref 1.) i ima oblik

$$\mathcal{E}(\vec k)=\sqrt{\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)^2+\frac{4\pi N_0\hbar^2 a}{m}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)} \qquad (III.2.4)$$

gde je $N_0 \sim 10^{18}-10^{20}$ broj molekula u jedinici zapremine ekscitiranih laserskim zracima i a konstanta kristalne rešetke. $N_0 = \frac{1}{a^3}$

Ako su impulsi t_k mali onda je:

$$\mathcal{E}(k)\underset{k\approx 0}{=} ck \quad ; \; c = \frac{\hbar^2}{m}\sqrt{2\pi N_0 a} \qquad (III.2.5.)$$

Tj. imamo tzv eksitonski zvuk sa brzinom c. U slučaju velikih k eksitoni imaju kvadratni zakon disperzije

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (III.2.6.)$$

Spektar (III.2.4.) ispunjava kriterijum superfluidnosti jer mu je minimum fazne brzine pozitivan. Ovo je posledica odbojnih sila na datom potencijalu.

III . 3 . FRELIHOVA TRANSFORMACIJA EKSITON - FONONSKOG POLJA I EFEKTIVNA EKSITON - EKSITON INTERAKCIJA

Kompletan hamiltonijan sistema eksitoni plus polje mehaničkih oscilacija može se napisati u obliku

$$H = \sum_k \alpha(k) B_k^+ B_k + \sum_k \beta(k) b_k^+ b_k + \frac{1}{N}\sum_{kq} \gamma(k,q) B_{k-q}^+ B_k \left(b_{-q} + b_q^+\right) \qquad (III.3.1.)$$

$$\alpha(k) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \; ; \; \beta(k) = \hbar c k$$

$$\gamma(k,q) = i\sqrt{\frac{\hbar}{2Mcq}}\,(q\,l_q)\left[\Delta + D_0 + D_q + M_k + M_{k-q}\right]$$

M - masa jona ; c - brzina zvuka

$m = \frac{\hbar^2}{2\bar{M}a^2}$; $\bar{M}$ = interakc. M_k za najbliže susede

a - konst. rešetke

B i b su eksitonski i fononski operatori, respektivno

Po svojoj strukturi ovaj hamiltonijan je sličan hamiltonijanu sistema elektron plus polje mehaničkih oscilacija. Kao što je poznato, unitarnom transformacijom ovog hamiltonijana Frelih je pokazao da elektron - fonon interakcija dovodi do efektivne elektron - elektron interakcije koja je privlačna. Kao rezultat ovog privlačenja obrazuju se Kuperovi parovi koji opet mogu da se kreću bez trenja kroz kristal. Ovo kretanje bez trenja naelektrisanih čestica poznato je pod imenom superprovodljivost.

Koristeći ideje Freliha mi ćemo izvršiti unitarnu transformaciju hamiltonijana (III.3.1.) tj od H preći ćemo na H_{eq}

$$H_{eq} = e^{iS} H e^{-iS} \cong H - i[S,H] - \frac{1}{2}[S,[S,H]] \qquad \text{III.3.2}$$

gde je

$$S = \sum_{p_1 p_2} W(p_1,p_2) B^+_{p_1-p_2} B_{p_1} b_{-p_2} + k\,k \qquad (\text{III.3.3.})$$

Posle ove transformacije nepoznatu f-ju W odredjujemo tako da iz formule (III.3.2.) nestanu članovi linearni po eksiton - fonon interakciji. Ova eliminacija daje za f-ju W sledeću vrednost

$$W(k,q) = \frac{i}{\sqrt{N}} \frac{\gamma(k,q)}{\alpha(k) - \alpha(k-q) - \beta(q)} \qquad (\text{III.3.4})$$

a H_{eq} postaje

$$H = \sum_k \left\{ \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_q \frac{|\gamma_{kq}|^2}{\alpha_k - \alpha_{k-q} - \beta_q} \right\} B^+_k B_k +$$

$$+ \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \frac{\beta_{k_1-k_3} \gamma_{k_1, k_1-k_3} \gamma_{k_2, k_3-k_1}}{(\alpha_{k_1} - \alpha_{k_3})^2 - \beta^2_{k_1-k_3}} B^+_{k_1} B^+_{k_2} B_{k_3} B_{k_1+k_2-k_3}\, \delta_{k_1+k_2,\, k_3+k_4}$$

$$(\text{III.3.5.})$$

Kao što se vidi iz poslednjeg izraza eksiton - fononska interakcija koriguje harmonijski spektar eksitona za član

$$\sum_q \frac{|\gamma_{kq}|^2}{\alpha_k - \alpha_{k-q} - \beta_q} B^+_k B_k \qquad (\text{III.3.6.})$$

a takodje dovodi do efektivne eksiton - eksiton interakcije definisane izrazom

$$\sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \frac{\beta_{k_1-k_3} \gamma_{k_1, k_1-k_3} \gamma_{k_2, k_3-k_1}}{(\alpha_{k_1} - \alpha_{k_3})^2 - \beta^2_{k_1-k_3}} B^+_{k_1} B^+_{k_2} B_{k_3} B_{k_1+k_2-k_3}\, \delta_{k_1+k_2,\, k_3+k_4}$$

$$(\text{III.3.7.})$$

Treba napomenuti da su rezultati / III.3.4 ,III.3.5.,III.3.6. i III.3.7. / dobijeni usrednjavanjem po fononskom vakuumu pa su prema tome sve korekcije eksitonskog spektra koje su ovde dobijene rezultat spontane emisije fonona. Spontana emisija fonona je rezultat rasejanja eksitona na molekulima rešetke. U ovim procesima eksiton može da izgubi energiju i ovaj gubitak se manifestuje kao stvaranje jednog kolektivnog kvanta mehaničkih oscilacija tj. fonona.

III . 4 . ULOGA SPONTANE EMISIJE FONONA U PROCESU BOZE KONDENZACIJE EKSITONA

Pre nego što predjemo na analizu spektra (III.3.5.) u uslovima kondenzacije, zadržaćemo se nešto detaljnije na procesu spontane emisije fonona. Ona nastaje kada u inicijalnom stanju imamo samo jedan eksiton sa impulsom $\vec{k}$, dok u finalnom stanju imamo jedan fonon sa impulsom $\vec{q}$ i jedan eksiton sa impulsom $\vec{k}-\vec{q}$. Poznato je da je ovakav prelaz moguć samo ako je energija inicijalnog stanja jednaka energiji finalnog stanja, što se svodi na

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}-\vec{q})^2 + \hbar c q$$

tj

$$q = 2k\cos\theta - \frac{2mc}{\hbar} \qquad (III.4.1)$$

Ako uvedemo brzinu eksitona

$$v = \frac{\hbar k}{m}$$

onda se uslov (III.4.1.) za spontanu emisiju fonona svodi na

$$q = \frac{2m}{\hbar}(v\cos\theta - c) \qquad (III.4.2)$$

Pošto je $q \geq 0$ to je na osnovu (III.4.2.) jasno da su procesi spontane emisije fonona mogući samo ako je

$$v\cos\theta - c \geq 0 \qquad (III.4.2.a)$$

a to znači da ugao θ izmedju pravca kretanja eksitona i pravca kretanja fonona, mora da se kreće u intervalu

$$\theta = 0 \quad do \quad \theta = \arccos\frac{c}{v}$$

što opet znači da su procesi spontane emisije mogući samo dok je brzina eksitona v veća od brzine zvuka c.

Ako hamiltonijan (III.3.5.) rastavimo na delove koji odgovaraju impulsima nula i impulsima različitim od nule, po šemi

K_1	K_2	K_3	K_4	
0	0	0	0	$\underline{I}$
K_1	K_2	0	0	$\underline{II}$
K_1	0	K_3	0	$\underline{III}$
K_1	0	0	K_4	$\underline{IV}$
0	K_2	K_3	0	$\underline{V}$
0	K_2	0	K_4	$\underline{VI}$
0	0	K_3	K_4	$\underline{VII}$
K_1	K_2	K_3	K_4	$\underline{VIII}$

(III.4.4.)

i primenimo istu proceduru kao u paragrafu (III.3.1.) dolazimo do sledećeg spektra eksitona u uslovima boze kondenzacije

$$E_k = \sqrt{S_k^2 - T_k^2} \qquad (III.4.5.)$$

gde su

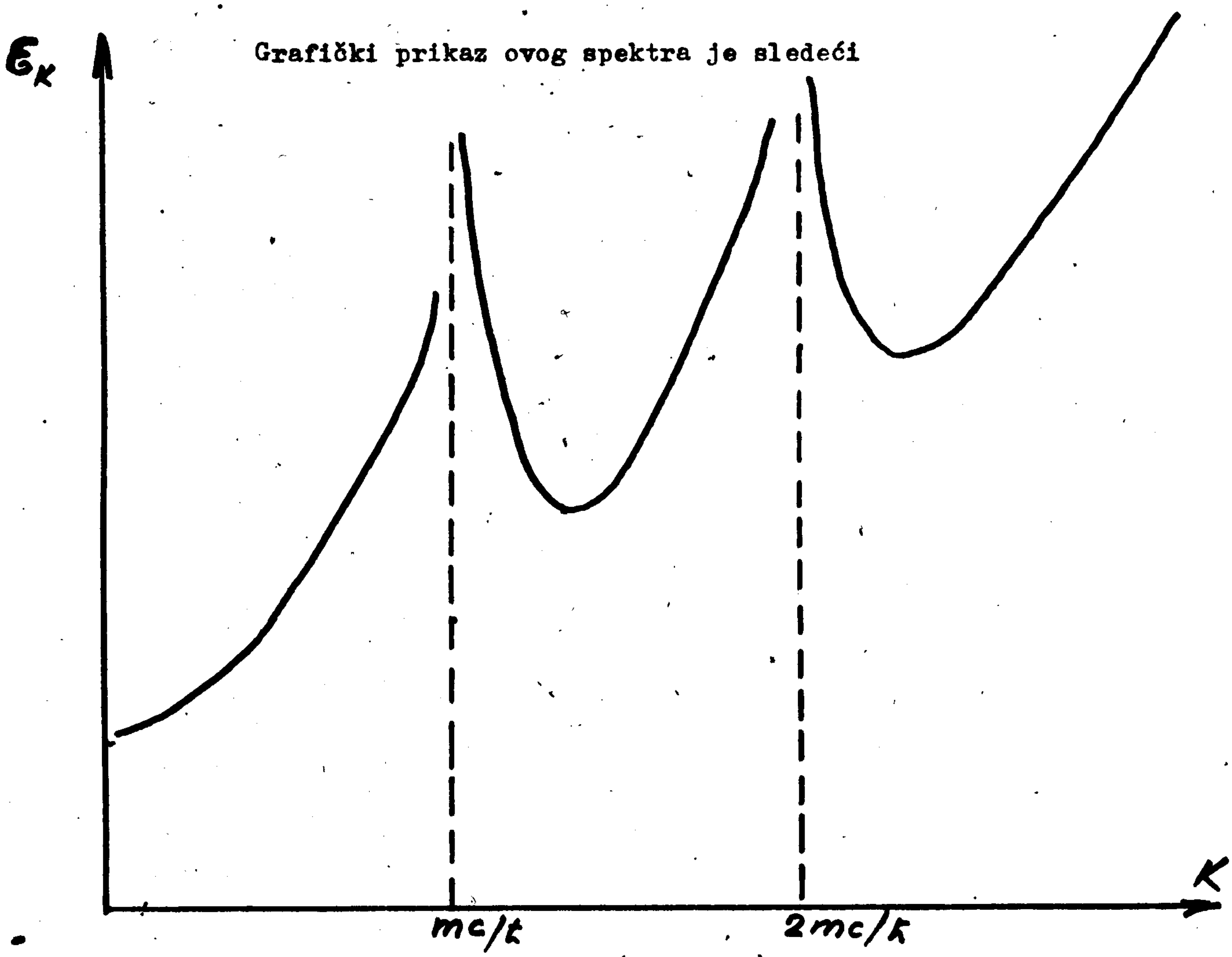
$$S_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{N}\sum_q \frac{m}{M\hbar c}\frac{(\Delta + D_0 + D_q + M_k + M_{k-q})^2}{q - 2k\left(\cos\theta - \frac{c}{\frac{E_k}{\hbar}}\right)} +$$

$$+ \frac{N_0}{N}\frac{4m^2}{M\hbar^2}\frac{(\Delta + D_0 + D_k + M_0 + M_k)^2}{k^2 - \left(\frac{2mc}{\hbar}\right)^2} + \qquad (III.4.5.a.)$$

$$+ \frac{N_0}{N}\left\{\frac{(\Delta + 2D_0 + 2M_0)^2}{Mc^2} - \frac{(\Delta + 2D_0 + 2M_0)(\Delta + 2D_0 + 2M_k)}{Mc^2}\left[\frac{1}{2} + \frac{mc^2}{2\hbar}\frac{1}{\frac{m^2c^2}{\hbar^2} - k^2}\right]\right\}$$

$$T_k = \frac{N_0}{N}\frac{4m^2}{M\hbar^2}\frac{(\Delta + D_0 + D_k + M_0 + M_k)^2}{k^2 - \left(\frac{2mc}{\hbar}\right)^2} \qquad (III.4.5.b.)$$

Grafički prikaz ovog spektra je sledeći



Kao što vidimo spektar (III.4.5.) ima singularitete u okolini impulsa

$$p_1 = mc \qquad i \qquad p_2 = 2mc$$

što znači da se u okolini ovih impulsa eksitoni ne kondenzuju već da dolazi do nekakvog drugog procesa. Eventualni konkurentni proces biće ispitan u sledećem paragrafu.

III . 5 . OBRAZOVANJE "EKSITONSKIH KAPLJI"

Kao što smo videli u predhodnom paragrafu u okolini impulsa p_1 i dvostrukog impulsa p_2 kondenzacioni spektar ima singularitete pa prema tome u ovim oblastima eksitoni se ne rasejavaju na efektivnom potencijalu do koga dovodi eksiton - fonon interakcija, već se očigledno vrši neki drugi proces.

Ideju o tome koji konkurentni proces može da se dogodi dao V.M. Agranovič (Ref. 1, glava X). On je predpostavio da se eksitoni sa suprotnim impulsima toliko približe jedan drugom da ostaju vezani u tzv " eksitonske kaplje ".

Da bi smo ispitali spektar eksitonskih kaplji poći ćemo od hamiltonijana (III.4.5.) u nešto uprošćenoj formi

$$H=\sum_k\left\{\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{m\Delta^2}{\hbar^2Mc}\frac{1}{N}\sum_q\frac{1}{q-2\left(k\cos\theta-\frac{mc}{\hbar}\right)}\right\}B_k^+B_k$$
$$+\frac{2m^2}{\hbar^2M}\frac{1}{N}\sum_{k_1k_2k_3}\frac{1}{(k_1+k_3)^2+\left(\frac{2mc}{\hbar}\right)^2}B_{k_1}^+B_{k_2}^+B_{k_3}B_{k_1+k_2-k_3} \qquad (III.5.1.)$$

Pošto, kao što je rečeno, eksitonske kaplje obrazuju eksitoni sa suprotno usmerenim impulsima iz hamiltonijana (III.5.1.), izdvojićemo onaj njegov deo koji odgovara interakciji eksitona sa suprotnim impulsima, tj. u daljem ćemo ispitati efektivni hamiltonijan oblika

$$\left.\begin{aligned}
H_{eff}&=\sum_k X_kB_k^+B_k+\frac{1}{N}\sum_{kq}Y_{k-q}B_k^+B_k^+B_{-q}B_q\\
X_k&=\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{m\Delta^2}{\hbar Mc}\frac{1}{N}\sum_k\frac{1}{q-2\left(k\cos\theta-\frac{mc}{\hbar}\right)}\\
Y_{k-q}&=\frac{2m\Delta^2}{\hbar^2M}\frac{1}{(k-q)^2-\left(\frac{2mc}{\hbar}\right)^2}
\end{aligned}\right\} \qquad (III.5.2)$$

Prelazeći od B_k na na nove boze operatore b_k kanoničnom transformacijom

$$B_k=u_kb_k+v_kb_{-k}^+ \quad i \quad u_k^2-v_k^2=1 \qquad (III.5.3)$$

i izdvajajući sve kvadratne članove po operatorima b dobijamo sledeći spektar za nove ekscitacije koje možemo smatrati za "eksitonske kaplje"

$$\mathcal{E}_{kap}=\sqrt{X_k^2-\Phi_k^2} \qquad (III.5.4.)$$

gde se veličina Φ_k odredjuje iz sledeće singularne neintegralne jednačine

$$\Phi_k = -\frac{1}{N}\sum_q \frac{\Phi_q Y_{k-q}}{\sqrt{X_q^2 - \Phi_q^2}} \qquad (III.5.5.)$$

Gruba analiza jednačine (III.5.5.) $(X_q \approx \Delta$ i $\Delta \gg \Phi_q)$ pokazuje da spektar (III.5.4.) ima sigurno konačne realne vrednosti u okolini impulsa mc i $2mc$ tj upravo tamo gde spektar eksitona u uslovima kondenzacije ima singularitete.

Z A K L J U Č A K

Rezultati analize boze kondenzacije eksitonskog gasa koja se javlja kao rezultat efektivne eksiton-eksiton interakcije, nastale kao rezultat virtuelne razmene fotona, pokazali su da je ova kondenzacija moguća i da eksitonski gas biva superfluidan. Ispostavilo se takodje da je ova pojava moguća samo u odredjenom intervalu eksitonskih impulsa. U okolini impulsa mc i 2mc, gde su

m - efektivna masa eksitona i

c - brzina zvuka ,

kondenzacioni spektar ima singularitete. To znači da u okolini ovih impulsa nisu dominantni procesi eksiton-eksiton rasejanja koji dovode do pojave superfluidnosti već procesi obrazovanja multieksitonskih kompleksa, koji su ovde nazvani "EKSITONSKE KAPLJE". Nadjen je spektar ovih kaplji i ocenjeno je da je u oklini impulsa mc i 2mc on konačan i realan.

L I T E R A T U R A

1. V.M. Agranovič: TEORIJA EKSITONOV, Moskva 1968

2. A.S. Davidov: KVANTOVAJA MEHANIKA, Moskva 1973

3. L.D.Landau i E.M. Lifšic: KVANTNA MEHANIKA, prevod Beograd 1966

4. N.N.Bogoljubov: J. Phys. 9, 23 , (1947)

5. Frolich: Phys. Rev. 79 , 854 , (195o)

6. V.M.Agranovič,B.S.Tošič: ŽETF 53,149 ,(1967)

7. V.M.Agranovič: ŽETF 37, 43o , (1959)

8. J.J.Hopfield: Phys.Rev. 112 , 1555 ,(1958)

9. J.J.Hopfield,D.G.Thomas:J.Phys.Chem.Solids 12 ,276 , (196o)

1o. U.Fano: Phys.Rev. 1o3 , 12o2 , (1956)