U N I V E R Z I T E T U N O V O M S A D U

P R I R O D N O - M A T E M A T I Č K I F A K U L T E T

I N S T I T U T Z A F I Z I K U

NEODRŽANJE EKSITONA I KINEMATIČKI NIVOI

- d i p l o m s k i r a d -

k a n d i d a t :
Mena M. Macut

N O V I S A D
1985.

Najtoplije zahvaljujem prof. dr. Bratislavu S. Tošiću, mentoru ovog rada na ukazanoj pomoći pri izboru teme i literature kao i neocenjivo značajnim sugestijama prilikom izrade ovog rada.

S A D R Ž A J

U V O D

Cilj ovog diplomskog rada je da se ispita uticaj efekta simultane kreacije i anihilacije parova eksitona na karakter i broj kinematičkih eksitonskih nivoa. Kinematički nivoi nastaju u procesu fuzije i raspadanju normalnih eksitona, pa je je otuda jasno da procesi kreacije i anihilacije parova mogu da u ukazanim procesima fuzije i raspada odigraju značajnu ulogu. Dosadašnja analiza kinematičkih nivoa vršena su uz odbacivanje onog dela eksitonskog hamiltonijana koji sadrži procese kreacije i anihilacije parova. Motiv za ovakve aproksimacije bila je činjenica da pomenuti članovi, ako se uračunaju, neznatno menjaju eksitonske energije. Kao što se u daljem tekstu vidi, ovaj zaključak ostaje na snazi u slučaju normalnih eksitonskih nivoa. Medjutim, ako su u pitanju kinematički nivoi, procesi simultane kreacije i anihilacije parova se ne smeju zanemariti, jer upravo zahvaljujući ovim procesima broj vrsta kinematičkih pobudjenja u molekularnom kristalu raste. Drugim rečima, pojavljuju se i kinematički nivoi koji odgovaraju procesima fuzije tri eksitona i raspada jednog eksitona na tri.

GLAVA 1.

1.1. HAMILTONIJAN ELEKTRONSKOG PODSISTEMA I PRELAZ NA KVAZI-PAULI OPERATORE

Kristal predstavlja kolektiv čestica (atoma ili molekula) koji ima odredjenu geometrijsku strukturu u kojem čestice medjusobno interaguju i u kojem može da nastupi više vrsta pobudjivanja. Najčešće se pobudjuje jedna čestica (ili mali broj čestica u odnosu na njihov ukupan broj), tada se zbog sila kojima čestice izmedju sebe deluju, pobudjenje prenosi i na sve ostale čestice u kristalu. Ovaj talas pobudjenja bitno se razlikuje po svojim karakteristikama od pobudjenja individualne čestice u kristalu. Ustvari, pobudjenje kristala nosi u sebi žig celog kolektiva i to u prvom redu njegove unutrašnje dinamike i njegovih geometrijskih svojstava.

Najpoznatiji tip kolektivnih pobudjenja kristala su mehaničke ekscitacije, ili fononi koji nastaju tako što se jedan atom kristala izvede iz ravnotežnog položaja, pa se zatim njegovo oscilovanje prenese i na sve ostale atome. U teoriji fonona ne ulazi se u osobine individualne čestice i ona se tretira kao materijalna tačka. Što se tiče karakteristika čestica, u račun ulazi samo njena masa.

Drugi tipovi pobudjenja zahtevaju da se vodi računa o individualnim osobinama čestica, ali ni tada se ne vodi računa o svim individualnim karakretistikama, već samo o onim koje za date energije pobudjivanja mogu da budu aktuelne. Na primer, pobudjivanje spinskog podsistema ("prevrtanje" spinova 3d ljuske kod prelaznih metala) dovodi do kolektivnih ekscitacija sistema i ove se ekscitacije nazivaju magnonima. Za pobudjivanje spinskih ekscitacija potrebne su približno iste energije kao i u slučaju mehaničkih ekscitacija, pa su glavni "ekscitatori" za fonone i magnone toplotni kvanti.

Pobudjivanje unutrašnjih molekularnih oscilatornih (vibracionih) nivoa zahteva veće energije i to se postiže infracrvenim zračenjem, ili vidljivom svetlošću. Kolektivne ekscitacije ovog tipa nazivaju se vibronima, a ponekad i eksitonima.

Pobudjenja elektrona u atomima ili molekulima zahtevaju najveće energije. Pobudjenje se vrši vidljivom svetlošću. Elektronsko pobudjenje jednog molekula ili atoma prenosi se na ostale čestice kristala i tako nastaju kolektivna pobudjenja elektronskog podsistema koja se nazivaju eksitonima ili češće optičkim pobudjenjima sistema.

Jedna od dve grupe eksitona su eksitoni koji nastaju u poluprovodnicima i oni se nazivaju Wannier-Mottovim eksitonima. Eksiton Wannier-Motta predstavlja par elektron-šupljina, pri čemu se elektron nalazi u provodnoj zoni, a šupljina u popunjenoj. Elektron i šupljina se ne kreću nezavisno, jer su kao pozitivno i negativno naelektrisanje povezani Coulombovom silom. Dokle god ova veza postoji, kroz poluprovodnik ne teče električna struja, već se u njemu kreće električno neutralni kompleks-eksiton Wannier-Motta. Potrebno je da se istakne da pobudjeni elektron u poluprovodnicima ne ostaje u svom atomu u kojem ostaje šupljina, pa je razmak izmedju šupljine i elektrona relativno velik - nekoliko μm. Ovi se eksitoni, zbog toga, nazivaju još i eksitonima velikog radijusa.

U molekularnim kristalima (antracen, naftalin, naftacen, benzol i plemeniti gasovi u čvrstom stanju) usled dejstva svetlosti elektron se pobudjuje u više energetsko stanje, a na njegovom mestu ostaje šupljina. Ovde je karakteristično da par elektron-šupljina ostaje u samom molekulu, dok se na ostale molekule prenosi samo akt ovakvog pobudjenja, tj. i u njima dolazi do stvaranja parova elektron-šupljina. Ovakvi eksitoni, koji imaju mali radijus - reda 10^{-10} m, nazivaju se Frenkelovi eksitoni.

Dalja je analiza posvećena Frenkelovim eksitonima i njihovim osobinama. Osnovna interakcija u molekularnim kristalima je interakcija električnih dipola i ona ima oblik:

$$W_{\vec{n}\vec{m}} = \frac{e^2}{|\vec{n}-\vec{m}|}\left\{\xi_{\vec{n}}\xi_{\vec{m}} - 3\,\frac{[\xi_{\vec{n}}(\vec{n}-\vec{m})][\xi_{\vec{m}}(\vec{n}-\vec{m})]}{|\vec{n}-\vec{m}|^2}\right\} \qquad (1.1.1)$$

U ovoj formuli $\xi_{\vec{n}}$ i $\xi_{\vec{m}}$ predstavlja unutrašnje koordinate molekula u čvorovima rešetke $\vec{n}$ i $\vec{m}$, a e je elementarno naelektrisanje. Ukupni hamiltonijan sistema može se napisati kao:

$$H = \sum_{\vec{n}} H_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} W_{\vec{n}\vec{m}} \tag{1.1.2}$$

gde je $H_{\vec{n}}$ hamiltonijan individualnog molekula.

Ako se u hamiltonijanu (1.1.2) predje na reprezentaciju druge kvantizacije, uvodjenjem Fermi operatora $a_{\vec{n}f}$ i $a^{+}_{\vec{n}f}$ koji anihiliraju, odnosno kreiraju elektron na čvoru $\vec{n}$ u kvantnom stanju f, tada se hamiltonijan može napisati u obliku:

$$H = \sum_{\vec{n}f} E_f a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4)\, a^{+}_{\vec{n}f_1} a^{+}_{\vec{m}f_3} a_{\vec{m}f_4} a_{\vec{n}f_2} \tag{1.1.3}$$

$$f,\ f_1, f_2, f_3, f_4 \in (0,1,2,\ \ldots,\ w)$$

gde je $H_{\vec{n}}\varphi^{f}_{\vec{n}}(\xi_{\vec{n}}) = E_f \varphi^{f}_{\vec{n}}(\xi_{\vec{n}})$, odnosno

$$V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4) = \int d^3\vec{\xi}_{\vec{n}}\, d^3\vec{\xi}_{\vec{m}}\, \varphi^{*f_1}_{\vec{n}}(\vec{\xi}_{\vec{n}})\, \varphi^{*f_2}_{\vec{m}}(\vec{\xi}_{\vec{m}})\, W_{\vec{n}\vec{m}}(\vec{\xi}_{\vec{n}}, \vec{\xi}_{\vec{m}})\, \varphi^{f_4}_{\vec{m}}(\vec{\xi}_{\vec{m}})\, \varphi^{f_2}_{\vec{n}}(\vec{\xi}_{\vec{n}}) \tag{1.1.4}$$

Veličine E_f su energije elektrona u kvantnim stanjima f, a funkcije $\varphi^{f}_{\vec{n}}$ su svojstvene funkcije hamiltonijana izolovanog molekula.

Treba istaći da prelaz od (1.1.2) na (1.1.3) važi za slučaj pobudjivanja samo jednog elektrona u molekulu. Otuda se može napisati:

$$\sum_{f=0}^{w} a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} = 1 \tag{1.1.5}$$

Simbol 0 označava osnovno stanje molekula, a simbol w, najviše energetsko stanje koje elektron može da postigne prilikom pobudjivanja svetlošću.

Uslov (1.1.5) iz celokupnog prostora elektronskih stanja izdvaja aktuelni podprostor:

$$S_n = \{\, |1_0 0_1 0_2 \ldots 0_w\rangle;\ |0_0 1_1 0_2 \ldots 0_w\rangle;\ \ldots;\ |0_0 0_1 0_2 \ldots 1_w\rangle \,\} \tag{1.1.6}$$

Celokupni kristalni prostor je direktni produkt prostora $S_{\vec{n}}$ po svim čvorovima rešetke i sa hamiltonijanom (1.1.3) deluje samo u ovom prostoru. Fermi operatori $a^{+}_{\vec{n}f}$ i $a_{\vec{n}f}$ zadovoljavaju uobičajene fermionske komutacione relacije.

$$\left\{a_{\vec{n}f},\ a^{+}_{\vec{n}'f'}\right\} = \delta_{\vec{n}\vec{n}'}\ \delta_{ff'}$$

$$\left\{a^{+}_{\vec{n}f},\ a^{+}_{\vec{n}'f'}\right\} = \left\{a_{\vec{n}f},\ a_{\vec{n}'f'}\right\} = 0 \tag{1.1.7}$$

i pretpostavlja se da se talasne funkcije izolovanih molekula (de facto talasne funkcije elektrona u različitim molekulima) toliko slabo prekrivaju da se efekt prekrivanja u daljem računu zanemaruje.

Činjenica da hamiltonijan (1.1.3) deluje u prostoru konstruisanom od podprostora $S_{\vec{n}}$ može se iskoristiti da se od hamiltonijana sistema jako interagujućih elektrona predje na hamiltonijan slabo neidealnog gasa kvazičestica. Ako se uvedu operatori:

$$P_{\vec{n}f} = a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f}\ ; \qquad P^{+}_{\vec{n}f} = a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}o} \qquad \text{za} \quad f \neq 0 \tag{1.1.8}$$

čiji je fizički smisao očigledan (operator $P^{+}_{\vec{n}f}$ kreira pobudjenje tipa f sa energijom $E_f - E_o$ na molekulu u čvoru $\vec{n}$), hamiltonijan (1.1.3) se može napisati u obliku hamiltonijana slabo neidealnog gasa po operatoru P.

Pre nego što se predje na prevodjenje čestičnog na kvazičestični hamiltonijan, razmotrimo komutacione relacije (kinematiku) operatora P i P^{+}, koji se u daljem tekstu nazivaju kvazi-Pauli operatorima.

Formirajmo najpre proizvod:

$$\begin{aligned} P^{+}_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f'} &= a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}o}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f'} \\ &= a^{+}_{\vec{n}f}(1 - a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}o})a_{\vec{n}f'} \\ &= a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}f'} - a^{+}_{\vec{n}f}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f'} \\ &= a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}f'} \end{aligned} \tag{1.1.9}$$

Poslednja jednakost u relaciji (1.1.9) posledica je činjenice da je proizvod $a^{+}_{\vec{n}f}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f'}$ jednak nuli u podprostoru $S_{\vec{n}}$.

Sledeći proizvod koji je bitan pri formiranju komucionih relacija je:

$$P_{\vec{n}f}P^{+}_{\vec{n}f'} = a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f}a^{+}_{\vec{n}f'}a_{\vec{n}o} = a^{+}_{\vec{n}o}(1 - a^{+}_{\vec{n}f'}a_{\vec{n}f})a_{\vec{n}o} =$$

$$= a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}o} - a^{+}_{\vec{n}o}a^{+}_{\vec{n}f}a_{\vec{n}f'}a_{\vec{n}o} = a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}o} =$$

$$= 1 - \sum_{f''=1}^{W} a^{+}_{\vec{n}f''}a_{\vec{n}f''} = 1 - \sum_{f''=1}^{W} P^{+}_{\vec{n}f''}P_{\vec{n}f''} \tag{1.1.10}$$

Ako je $f' \neq f$ i ako su oba različita od nule, sledi:

$$P^{+}_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f'} = a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f}a^{+}_{\vec{n}f'}a_{\vec{n}o} = -a^{+}_{\vec{n}o}a^{+}_{\vec{n}f'}a_{\vec{n}f}a_{\vec{n}o} = 0 \tag{1.1.11}$$

Relacije (1.1.9), (1.1.10) i (1.1.11) mogu se napisati kao:

$$[P_{\vec{n}f},P^{+}_{\vec{n}f'}] = [(1 - P^{+}_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f} - \sum_{f''=1}^{W} P^{+}_{\vec{n}f''}P_{\vec{n}f''})\delta_{ff'} - P^{+}_{\vec{n}f'}P_{\vec{n}f}]\delta_{\vec{n}\vec{n}'} \tag{1.1.12}$$

Potražimo sada vrednost proizvoda:

$$P_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f'} = a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f'} = -\underbrace{a^{+}_{\vec{n}o}a^{+}_{\vec{n}o}}_{0}a_{\vec{n}f}a_{\vec{n}f'} = 0 \tag{1.1.13}$$

Na osnovu poslednje relacije sledi da je i adjungovani proizvod $P^{+}_{\vec{n}f}P^{+}_{\vec{n}f'}$ jednak nuli.

Ovim su iscrpene komutacione relacije za kvazi-Pauli operatore koji važe za jedan čvor rešetke. Razmotrimo šta se dešava u slučaju različitih čvorova. Izvedimo relaciju samo za komutator $P_{\vec{n}f}P^{+}_{\vec{m}f'} - P^{+}_{\vec{m}f'}P_{\vec{n}f}$. Na osnovu komutacionih relacija za Fermi operatore (1.1.6) može se napisati:

$$\begin{aligned} P_{\vec{n}f}P^{+}_{\vec{m}f'} - P^{+}_{\vec{m}f'}P_{\vec{n}f} &= a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f}a^{+}_{\vec{m}f'}a_{\vec{m}o} - \\ - a^{+}_{\vec{m}f'}a_{\vec{m}o}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f} &= a^{+}_{\vec{m}f'}a_{\vec{m}o}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f} - \\ - a^{+}_{\vec{m}f'}a_{\vec{m}o}a^{+}_{\vec{n}o}a_{\vec{n}f} &= 0 \end{aligned} \tag{1.1.14}$$

Može se na isti način dokazati da su i sledeći komutatori:

$$P_{\vec{n}f}P_{\vec{n}'f'} - P_{\vec{n}'f'}P_{\vec{n}f} \quad \text{i} \quad P^{+}_{\vec{n}f}P^{+}_{\vec{n}'f'} - P^{+}_{\vec{n}'f'}P^{+}_{\vec{n}f}$$

takodje jednaki nuli, pa se konačno dolazi do sledeće kinematike za kvazi-Pauli operatore:

$$[P_{\vec{n}f},P^{+}_{\vec{n}'f'}] = [(1 - P^{+}_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f} - \sum_{f''=1}^{W} P^{+}_{\vec{n}f''}P_{\vec{n}f''})\delta_{ff'} - P^{+}_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f'}]\delta_{\vec{n}\vec{n}'}$$

$$P_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f'} = P^{+}_{\vec{n}f}P_{\vec{n}f'} = 0 \;; \quad P^{+}_{\vec{n}f}P^{+}_{\vec{n}f'} = 0 \quad \text{za} \quad f \neq f'$$

$$[P_{\vec{n}f'}, P_{\vec{n}'f'}] = [P_{\vec{n}f}, P_{\vec{n}'f'}] = 0$$

$$P_{\vec{n}f} P^{+}_{\vec{n}f} = 1 - \sum_{f''=1}^{w} P^{+}_{\vec{n}f''} P_{\vec{n}f''}$$

$$P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f'} = a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f'} \; ; \quad P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} = a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} \qquad (1.1.15)$$

S obzirom da su kvazi-Pauli operatori definisani i da su nadjene njihove komutacione relacije, sledi zaključak da oni nisu ni Bose ni Fermi tipa, pa može da se predje na reprezentaciju hamiltonijana (1.1.3) preko pomenutih operatora. Prvi član u formuli (1.1.3) može se transformisati na sledeći način:

$$\sum_{\vec{n}f=0}^{w} E_f a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} = \sum_{\vec{n}} \left\{ E_o a^{+}_{\vec{n}o} a_{\vec{n}o} + \sum_{f=1}^{w} E_f a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} \right\} =$$

$$= \sum_{\vec{n}} \left\{ E_o \left(1 - \sum_{f=1}^{w} a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f}\right) + \sum_{f=1}^{w} E_f a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} \right. =$$

$$= \sum_{\vec{n}} E_o + \sum_{\vec{n}} \sum_{f=0}^{w} (E_f - E_o) a^{+}_{\vec{n}f} a_{\vec{n}f} = NE_o + \sum_{\vec{n}f=1}^{w} (E_f - E_o) P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} \qquad (1.1.16)$$

N ovde predstavlja broj molekula u kristalu.

Drugi član u formuli (1.1.3) može se rastaviti po sledećoj shemi

R. Br.	f_1	f_2	f_3	f_4
I	0	0	0	0
II	$f_1 \neq 0$	0	0	0
III	0	$f_2 \neq 0$	0	0
IV	0	0	$f_3 \neq 0$	0
V	0	0	0	$f_4 \neq 0$
VI	$f_1 \neq 0$	$f_2 \neq 0$	0	0
VII	$f_1 \neq 0$	0	$f_3 \neq 0$	0
VIII	$f_1 \neq 0$	0	0	$f_4 \neq 0$
IX	0	$f_2 \neq 0$	$f_3 \neq 0$	0
X	0	$f_2 \neq 0$	0	$f_4 \neq 0$
XI	0	0	$f_3 \neq 0$	$f_4 \neq 0$
XII	$f_1 \neq 0$	$f_2 \neq 0$	$f_3 \neq 0$	0
XIII	$f_1 \neq 0$	$f_2 \neq 0$	0	$f_4 \neq 0$
XIV	$f_1 \neq 0$	0	$f_3 \neq 0$	$f_4 \neq 0$
XV	0	$f_2 \neq 0$	$f_3 \neq 0$	$f_4 \neq 0$
XVI	$f_1 \neq 0$	$f_2 \neq 0$	$f_3 \neq 0$	$f_4 \neq 0$

(1.1.17)

U daljoj analizi se ne koriste svi članovi sheme (1.1.17), budući da se razmatraju kristali koji imaju centar inverzije, pri čemu se pomenuti centar inverzije poklapa sa centrom inverzije svakog od molekula koji ulazi u sastav kristala. Činjenica da sistem ima centar inverzije znači da hamiltonijan sistema mora biti invarijantan u odnosu na zamenu:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}} \longrightarrow -\vec{\xi}_{\vec{n}} \tag{1.1.18}$$

Matrični elementi koji odgovaraju članovima II - V i XII - XV sheme (1.1.17), tj. $V(f_1000)$, $V(0f_200)$, $V(00f_30)$, $V(000f_4)$, $V(f_1f_2f_30)$, $V(f_1f_20f_4)$, $V(f_10f_3f_4)$, $V(0f_2f_3f_4)$ proprocionalni su jednom dipolnom momentu prelaza $(e\vec{\xi}_{\vec{n}})_{of}$, ili proizvodu tri dipolna momenta prelaza $(e\vec{\xi}_{\vec{n}})_{of}(e\vec{\xi}_{\vec{n}})_{of'}(e\vec{\xi}_{\vec{n}})_{of''}$, a ovi članovi menjaju znak prilikom prelaza (1.1.18). Iz zahteva da hamiltonijan bude invarijantan u odnosu na prelaz (1.1.18) sledi da članovi sheme II - V i XII - XV identički moraju biti jednaki nuli.

Prema tome, za kristale sa centrom inverzije od cele sheme (1.1.18) u hamiltonijanu ostaju članovi I, VI - XI i XVI. Ovi se delovi mogu izraziti u kvazipaulionskoj reprezentaciji na sledeći način:

$$I = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\, a^+_{\vec{n}o} a^+_{\vec{m}o} a_{\vec{m}o} a_{\vec{n}o} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\, a^+_{\vec{n}o} a_{\vec{n}o} a^+_{\vec{m}o} a_{\vec{m}o} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\left(1 - \sum_{f=1}^{w} P^+_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f}\right)\left(1 - \sum_{f'=1}^{w} P^+_{\vec{m}f'} P_{\vec{m}f'}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\sum_{f=1}^{w} P^+_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} -$$

$$- \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\sum_{f=1}^{w} P^+_{\vec{m}f} P_{\vec{m}f} +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\sum_{f,f'=1}^{w} P^+_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} P^+_{\vec{m}f'} P_{\vec{m}f'} \,.$$

Kako matrični elementi $V_{\vec{n}\vec{m}}$ zavise od razlike $\vec{n}-\vec{m}$ i simetrični su u odnosu na zamenu $\vec{n}\rightleftarrows\vec{m}$ i očigledno važi sledeće:

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000) = \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}-\vec{m}}(0000) = \sum_{\vec{e}}^{\vec{n}-\vec{m}=\vec{e}} V_{\vec{e}}(0000) \sum_{\vec{m}} 1 =$$

$$= N \sum_{\vec{e}} V_{\vec{e}}(0000) \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000) \sum_{f=1}^{W} P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} =$$

$$= \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}-\vec{m}}(0000) \sum_{f=1}^{W} P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} = \sum_{\vec{e}} V_{\vec{e}}(0000) \sum_{\vec{m}} \sum_{f=1}^{W} P^{+}_{\vec{m}f} P_{\vec{m}f}$$

Ako se uvede oznaka:

$$F(f_1 f_2 f_3 f_4) = \sum_{\vec{e}} V_{\vec{e}}(f_1 f_2 f_3 f_4) \tag{1.1.19}$$

konačno se može napisati:

$$I = \frac{1}{2} N F(0000) - \sum_{\vec{n}f=1}^{W} F(0000) P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f,f'=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(0000) P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} P^{+}_{\vec{m}f'} P_{\vec{m}f} \tag{1.1.20}$$

Dalje transformacije članova sheme (1.1.17) su sledeće:

$$VI = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_1 f_2=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 00) a^{+}_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}f_2} a^{+}_{\vec{m}o} a_{\vec{m}o} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_1 f_2=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 00) P^{+}_{\vec{n}f_1} P_{\vec{n}f_2} \Big(1 - \sum_{f_3=1}^{W} P^{+}_{\vec{m}f_3} P_{\vec{m}f_3}\Big) =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}ff'=1}^{W} F(ff'00) P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f} -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'f''=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(ff'00) P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f'} P^{+}_{\vec{m}f''} P_{\vec{m}f''} \tag{1.1.21}$$

$$XI = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_3 f_4=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(00f_3 f_4) a^{+}_{\vec{n}o} a_{\vec{n}o} a^{+}_{\vec{m}f_3} a_{\vec{m}f_4} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_3 f_4=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(00f_3 f_4) P^{+}_{\vec{n}f_3} P_{\vec{n}f_4} \Big(1 - \sum_{f_1=1}^{W} P^{+}_{\vec{m}f_1} P_{\vec{m}f_1}\Big) =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}ff'=1}^{W} F(00ff') P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f'} -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'f''=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(00ff') P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f'} P^{+}_{\vec{m}f''} P_{\vec{m}f''} \qquad (1.1.22)$$

$$VIII = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_1f_4=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 00 f_4) a^{+}_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}o} a^{+}_{\vec{m}o} a_{\vec{m}f_4} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f00f') P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{m}f'} \qquad (1.1.23)$$

$$IX = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_2f_3=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(0f_2f_3 0) a^{+}_{\vec{n}o} a_{\vec{n}f_2} a^{+}_{\vec{m}f_3} a_{\vec{m}o} = \qquad (\vec{n} \leftrightarrows \vec{m})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(0f'f\ 0) P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{m}f'} \qquad (1.1.24)$$

$$VII = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_1f_3=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 0 f_3 0) a^{+}_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}o} a^{+}_{\vec{m}f_3} a_{\vec{m}o} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f0f'0) P^{+}_{\vec{n}f} P^{+}_{\vec{m}f'} \qquad (1.1.25)$$

$$X = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_2f_4=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(0f_2 0 f_4) a^{+}_{\vec{n}o} a_{\vec{n}f_2} a^{+}_{\vec{m}o} a_{\vec{m}f_4} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(0f'0f) P_{\vec{m}f'} P_{\vec{n}f} \qquad (1.1.26)$$

$$XVI = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}f_1f_2f_3f_4=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1f_2f_3f_4) a^{+}_{\vec{n}f_1} a_{\vec{n}f_2} a^{+}_{\vec{m}f_3} a_{\vec{m}f_4} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}ff'f''f'''=1}^{W} V_{\vec{n}\vec{m}}(ff'f''f''') P^{+}_{\vec{n}f} P_{\vec{n}f'} P^{+}_{\vec{m}f''} P_{\vec{m}f'''} \qquad (1.1.27)$$

Sumiranjem svih dobijenih rezultata hamiltonijan (1.1.3) u kvazipaulionskoj reprezentaciji se može izraziti na sledeći način:

$$H = H_o + H_2 + H_4 \tag{1.1.28}$$

gde je

$$H_o = N[E_o + \frac{1}{2} F(0000)] \tag{1.1.29}$$

$$H_2 = \sum_{\vec{n}} \sum_{\mu\nu=1}^{w} \Delta_{\mu\nu} P^+_{\mu\vec{n}} P_{\nu\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu\nu=1}^{w} S_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) P^+_{\mu\vec{n}} P_{\nu\vec{m}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu\nu=1}^{w} [\tilde{R}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) P^+_{\mu\vec{n}} P^+_{\nu\vec{m}} + \overset{*}{\tilde{R}}_{\nu\mu}(\vec{n}\vec{m}) P_{\nu\vec{m}} P_{\mu\vec{n}}] \tag{1.1.30}$$

$$H_4 = \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'=1}^{w} T_{\mu\nu\mu'\nu'}(\vec{n}\vec{m}) P^+_{\mu\vec{n}} P_{\nu\vec{n}} P^+_{\mu'\vec{m}} P_{\nu'\vec{m}} \tag{1.1.31}$$

$$\Delta_{\mu\nu} = [E_\mu - E_o - F(0000)]\delta_{\mu\nu} + \frac{1}{2}[F(\mu\nu 00) + F(00\mu\nu)]$$

$$\tilde{S}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) = \frac{1}{2} V_{\vec{n}\vec{m}}(\mu 00\nu) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0\nu\mu 0)$$

$$\tilde{R}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) = V_{\vec{n}\vec{m}}(\mu 0\nu 0)$$

$$\tilde{R}_{\nu\mu}(\vec{n}\vec{m}) = V_{\vec{n}\vec{m}}(0\nu 0\mu)$$

$$\tilde{R}_{\nu\mu} = \overset{*}{\tilde{R}}_{\mu\nu}$$

$$T_{\mu\nu\mu'\nu'}(\vec{n}\vec{m}) = \frac{1}{2}[V_{\vec{n}\vec{m}}(\mu\nu\mu'\nu') - V_{\vec{n}\vec{m}}(\mu\nu 00)\delta_{\mu'\nu'} -$$

$$- V_{\vec{n}\vec{m}}(00\mu\nu)\delta_{\mu'\nu'} + V_{\vec{n}\vec{m}}(0000)\delta_{\mu\nu}\delta_{\mu'\nu'}] \tag{1.1.32}$$

Prelaz sa elektronskih operatora a^+ i a na kvazi-Pauli operatore P^+ i P doveo je do hamiltonijana (1.1.28), koji predstavlja tipičan hamiltonijan slabo neidealnog gasa. Deo H_2 iz jednačine (1.1.28) može da se dijagonalizuje, pa prema tome, predstavlja hamiltonijan slobodnih kvazičestica (idealan kvazičestični gas), dok deo H_4 opisuje interakciju u kvazičestičnom gasu i čini da gas bude slabo neidealan. Neophodno je da se istakne činjenica da je u hamiltonijanu H_2, tj. u hamiltonijanu neinteragujućih kvazičestica, preko funkcija $\Delta_{\mu\nu}$, $\tilde{S}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m})$ i $\tilde{R}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m})$, uključen dobar deo čestičnih interakcija iz hamiltonijana (1.1.3). Ovakva procedura smanjuje znatan broj koraka, ukoliko se sistem analizira teorijom perturbacija. Ona ipak dovodi do operatora P^+ i P čije su komutacione relacije nestandardne i otežavaju matematičku analizu, pa se može reći da postupak pogodnije grupisane dinamike sistema uključuje nepodesnu kinematiku.

1.2. KINEMATIČKI NIVOI KOD DVONIVOSKE SHEME

Ako se pretpostavi da kvanti svetlosti dovode molekul u samo jedno pobudjeno stanje - dvonivoska shema molekularnih pobudjenja u kojoj pored osnovnog postoji samo jedno pobudjeno stanje - tada u formulama (1.1.28) do (1.1.32) indeksi μ i ν uzimaju samo jednu vrednost s. Kvazi-Pauli operatori prelaze u Pauli operatore koji zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[P_{\vec n}, P^+_{\vec m}] = (1 - 2P^+_{\vec n}P_{\vec n})\delta_{\vec n\vec m}$$

$$[P_{\vec n}, P_{\vec m}] = [P^+_{\vec n}, P^+_{\vec m}] = 0 \qquad \text{i} \qquad P^2_{\vec n} = P^{+2}_{\vec n} = 0$$

$$|P^+_{\vec n}\, P_{\vec n}| = (a^+_{\vec n s}\, a_{\vec n s}) < 0 \quad \text{i} \quad 1 \tag{1.2.1}$$

a hamiltonijan dobija sledeći oblik:

$$\hat{H} = H_0 + \sum_{\vec n} \Delta P^+_{\vec n}P_{\vec n} + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} C_{\vec n\vec m}P^+_{\vec n}P_{\vec m} + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} D_{\vec n\vec m}P^+_{\vec n}P_{\vec n}P^+_{\vec m}P_{\vec m} +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} (F^*_{(\vec n\vec m)}P^+_{\vec n}P^+_{\vec m} + F_{\vec n\vec m}P_{\vec m}P_{\vec n}) \tag{1.2.2}$$

U ovom se odeljku analiza vrši sa uprošćenim hamiltonijanom:

$$H = H_0 + \sum_{\vec n} \Delta P^+_{\vec n}P_{\vec n} + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} C_{\vec n\vec m}P^+_{\vec n}P_{\vec m} + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} D_{\vec n\vec m}P^+_{\vec n}P_{\vec n}P^+_{\vec m}P_{\vec m}. \tag{1.2.3}$$

u odnosu na (1.2.2) u (1.2.3) ispušten je član koji sadrži dva kreaciona, odnosno dva anihilaciona operatora i koji dovodi do neodržanja eksitona.

Osobine eksitonskog sistema ispituju se pomoću Greenove funkcije:

$$\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle P_{\vec{a}}(t)\,|\,P^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle \tag{1.2.4}$$

Analiza rešenja funkcije Γ u različitim aproksimacijama može da pruži informaciju i o osobinama neinteragujućih eksitona i o efektima do kojih dovode kinematička i dinamička interakcija. Krajnji cilj ove analize je ispitivanje mogućnosti nastanka novih tipova pobudjenja u sistemu. Ova nova pobudjenja, bar u principu, mogu da se pojave usled uzajamne interakcije eksitona. Kako su eksitonske energije 5 eV, a eksitonske koncentracije proporcionalne veličini $e^{-E_{exc}/\theta}$ koja ni pri najvišim temperaturama ne prelazi vrednost 10^{-3}, račun za funkciju Γ izvodi se u linearnoj aproksimaciji po eksitonskim koncentracijama.

Na osnovu opšte teorije Greenovih funkcija, komutacionih relacija (1.2.1) i forme hamiltonijana (1.2.3), za Greenovu funkciju Γ se dobija sledeća jednačina.

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}(t) &= i\,\delta(t)\,\delta_{\vec{a}\vec{b}}(1-2\langle P^{+}_{\vec{a}}P_{\vec{a}}\rangle) + \\ &+ \Delta\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}(t) + \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}} C_{\vec{a}\vec{m}}\Gamma_{\vec{m}\vec{b}}(t) - \\ &- \sum_{\vec{m}} C_{\vec{a}\vec{m}}\langle\langle P^{+}_{\vec{a}}(t)P_{\vec{a}}(t)P_{\vec{m}}(t)\,|\,P^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle + \\ &+ \sum_{\vec{m}} D_{\vec{a}\vec{m}}\langle\langle P^{+}_{\vec{m}}(t)P_{\vec{m}}(t)P_{\vec{a}}(t)\,|\,P^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle \end{aligned} \tag{1.2.5}$$

Paulionske Greenove funkcije iz ove jednačine mogu se izraziti preko odgovarajućih bozonskih Greenovih funkcija na osnovu aproksimativnih izraza:

$$P \approx B - B^{+}BB; \qquad P^{+} \approx B^{+} - B^{+}B^{+}B; \qquad P^{+}P \approx B^{+}B - B^{+}B^{+}BB \tag{1.2.6}$$

koji slede iz opštih formula:

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

$$P = [\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!}B^{+\nu}B^{\nu}]^{1/2}B \tag{1.2.7}$$

Ova aproksimacija u potpunosti zadovoljava, ukoliko se račun vrši sa tačnošću do prvog stepena eksitonske koncentracije, zaključno. Prilikom izračunavanja paulionskih Greenovih funkcija koristi se Vikova teorema, operatori se, za razliku od ranije učinjenog, sparuju i po istim i po različitim vremenima. U skladu sa ovim, posle zamene (1.2.6) u (1.2.4) i dekuplovanja:

$$\langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)|B^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle = (1-2N_{o})G_{\vec{a}\vec{b}}(t)$$

$$\langle\langle B_{\vec{a}}(t)|B^{+}_{\vec{b}}(0)B^{+}_{\vec{b}}(0)B_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle = (1-2N_{o})G_{\vec{a}\vec{b}}(t)$$

$$\langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)|B^{+}_{\vec{b}}(0)B^{+}_{\vec{b}}(0)B^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle = 2R_{\vec{a}\vec{b}}(t)G^{2}_{\vec{a}\vec{b}}(t) \tag{1.2.8}$$

$$G_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t)|B^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle$$

$$R_{\vec{a}\vec{b}}(t) = \langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t)|B_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle$$

$$N_{o} = \langle B^{+}_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)\rangle_{o} = \langle B^{+}_{\vec{b}}(0)B_{\vec{b}}(0)\rangle_{o} =$$

$$= N^{-1}\sum_{k}(e^{E_{o}(\vec{k})/\theta}-1)^{-1}$$

gde $E_{o}(\vec{k})$ označava energiju eksitona u nultoj aproksimaciji, koja se odredjuje kasnije, dobija se:

$$\Gamma_{\vec{a}\vec{b}}(t) = (1-4N_{o})G_{\vec{a}\vec{b}}(t) + 2R_{\vec{a}\vec{b}}(t)G^{2}_{\vec{a}\vec{b}}(t) + 0(N_{o})^{2} \tag{1.2.9}$$

U granicama iste ovakve aproksimacije, Pauli operatore u višim paulionskim funkcijama Greena iz (1.2.5) treba jednostavno zameniti Bose operatorima na levoj strani Greenovih funkcija, dok operator na desnoj strani treba izraziti u aproksimaciji (1.2.6). Znači:

$$\langle\langle P^{+}_{\vec{a}}(t)P_{\vec{a}}(t)P_{\vec{m}}(t)|P^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle = \langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)B_{\vec{m}}(t)|$$

$$|B^{+}_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle - \langle\langle B^{+}_{\vec{a}}(t)B_{\vec{a}}(t)B_{\vec{m}}(t)|B^{+}_{\vec{b}}(0)B^{+}_{\vec{b}}(0)B_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle =$$

$$= N_{o}G_{\vec{m}\vec{b}}(t) + N_{\vec{m}\vec{a}}G_{\vec{a}\vec{b}}(t) - 2R_{\vec{a}\vec{b}}(t)G_{\vec{m}\vec{b}}(t)G_{\vec{a}\vec{b}}(t) + 0(N_{o})^{2}$$

$$\langle\langle P^+_{\vec{m}}(t)P_{\vec{m}}(t)P_{\vec{a}}(t)|P^+_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle = \langle\langle B^+_{\vec{m}}(t)B_{\vec{m}}(t)B_{\vec{a}}(t)|B^+_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle -$$

$$- \langle\langle B^+_{\vec{m}}(t)B_{\vec{m}}(t)B_{\vec{a}}(t)|B^+_{\vec{b}}(0)B^+_{\vec{b}}(0)B_{\vec{b}}(0)\rangle\rangle =$$

$$= N_0 G_{\vec{a}\vec{b}}(t) + N_{\vec{a}\vec{m}}G_{\vec{m}\vec{b}}(t) - 2R_{\vec{m}\vec{b}}(t)G_{\vec{a}\vec{b}}(t)G_{\vec{m}\vec{b}}(t) + O(N_0^2)$$

$$N_{\vec{a}\vec{b}} = N^{-1}\sum_{\vec{k}}(e^{E_0(\vec{k})/\theta} - 1)^{-1}e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} \tag{1.2.10}$$

Treba napomenuti da ostaci koji su proporcionalni kvadratu eksitonske koncentracije N_0 nastaju sparivanjem operatora koji deluju u istim trenucima vremena u Greenovim funkcijama tipa: $\langle\langle B^+BB|B^+B^+B\rangle\rangle$. Posle zamene (1.2.9) i (1.2.10) u (1.2.5) dobija se sledeća jednačina za Bozonsku Greenovu funkciju $G_{\vec{a}\vec{b}}(t)$:

$$i\frac{d}{dt}[(1-4N_0)G_{\vec{a}\vec{b}}(t) + 2R_{\vec{a}\vec{b}}(t)G^2_{\vec{a}\vec{b}}(t)] =$$

$$= i\delta(t)\delta_{\vec{a}\vec{b}}(1-2\langle P^+_{\vec{a}}P_{\vec{a}}\rangle) + \Delta[(1-4N_0)G_{\vec{a}\vec{b}}(t) +$$

$$+ 2R_{\vec{a}\vec{b}}(t)G^2_{\vec{a}\vec{b}}(t)] + \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}} C_{\vec{a}\vec{m}}[(1-4N_0)G_{\vec{m}\vec{a}}(t) +$$

$$+ 2R_{\vec{m}\vec{a}}(t)G^2_{\vec{m}\vec{a}}(t)] - \sum_{\vec{m}}[(C_{\vec{a}\vec{m}}N_0 G_{\vec{m}\vec{b}}(t) +$$

$$+ C_{\vec{a}\vec{m}}N_{\vec{m}\vec{a}}G_{\vec{a}\vec{b}}(t) - D_{\vec{a}\vec{m}}N_0 G_{\vec{a}\vec{b}}(t) - D_{\vec{a}\vec{m}}N_{\vec{a}\vec{m}}G_{\vec{m}\vec{b}}(t)] +$$

$$+\sum_{\vec{m}} 2[C_{\vec{a}\vec{m}}R_{\vec{a}\vec{b}}(t) - D_{\vec{a}\vec{m}}R_{\vec{m}\vec{b}}(t)]G_{\vec{a}\vec{b}}(t)G_{\vec{m}\vec{b}}(t) \tag{1.2.11}$$

Ako se u jednačini izvrši Furije-transformacija tipa:

$$f_{\vec{a}\vec{b}}(t) = N^{-1}\sum_{\vec{k}}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\ f_{\vec{k}}(E)\ e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})-iEt}$$

$$\delta(t) = (2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\ e^{-iEt}\ ; \quad \varphi_{\vec{a}\vec{b}} = N^{-1}\sum_{k}\varphi_{\vec{k}}e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$$

$$\delta_{\vec{a}\vec{b}} = N^{-1}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} \tag{1.2.12}$$

i iskoristi relacija $R_{\vec{k}}(E) = G_{\vec{k}}(-E)$, koja se lako ilustruje hamiltonijanom tipa:

$$\hat{H} = \lambda\, B^{+}B \ ,$$

kada je:

$$E \langle\langle B | B^{+} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} + \langle\langle [B, \hat{H}] | B^{+} \rangle\rangle_E \ ;$$

$$E \langle\langle B^{+} | B \rangle\rangle_E = -\frac{i}{2\pi} + \langle\langle [B^{+}, \hat{H}] | B \rangle\rangle_E \ ;$$

$$G(E) \equiv \langle\langle B | B^{+} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\,\frac{1}{E-\lambda} \ ;$$

$$R(E) \equiv \langle\langle B^{+} | B \rangle\rangle_E = -\frac{i}{2\pi}\,\frac{1}{E+\lambda} = G(-E)$$

Za Greenovu funkciju $G_{\vec{k}}(E)$ se dobija sledeći izraz:

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{1+2N_0}{E - E_1(\vec{k})}\,\frac{1}{1 - W_{\vec{k}}(E)} \cdot \frac{i}{2\pi} \tag{1.2.13}$$

gde je

$$E_1(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + M(\vec{k}) ; \qquad E_0(\vec{k}) = \Delta + \frac{1}{2} C_{\vec{k}}$$

$$M(\vec{k}) = N^{-1} \sum_{\vec{q}} (D_0 + D_{\vec{k}-\vec{q}} - C_{\vec{k}} - C_{\vec{q}}) \langle B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0 \ ; \quad \langle B^{+}_{\vec{q}} B_{\vec{q}} \rangle_0 = (e^{E_0(\vec{k})/\theta} - 1)^{-1}$$

$$W_{\vec{k}}(E) = \frac{4\pi i}{N^2} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 [E - E_0(\vec{k}) - C_{\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2} + D_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}] G_{\vec{q}_1}(E_1) G_{\vec{q}_2}(E_2) G_{\vec{q}_3}(E_3)$$

$$E_3 = E - E_1 + E_2 \ ; \qquad \vec{q}_3 = \vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2 \tag{1.2.14}$$

Treba napomenuti da su prilikom dobijanja izraza (1.2.13) odbačeni svi članovi proporcionalni N_0^2 i $N_0 G^3$, srednja vrednost $\langle P^{+}P \rangle$ zamenjena sa N_0 i izvršena uobičajena aproksimacija teorije perturbacije $1 + W \approx (1 - W)^{-1}$.

Na osnovu relacije (1.2.13) može se izvršiti analiza eksitonskih osobina. U nultoj aproksimaciji, koja odgovara kvadratnom delu hamiltonijana (1.2.13) izraženom preko Bose operatora, treba odbaciti iz (1.2.13) sve članove koji su proporcionalni eksitonskoj koncentraciji N_0 i uzeti $W = 0$. Tako se dobija Greenova funkcija nulte aproksimacije:

$$G^{(0)}_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{1}{E - E_0(\vec{k})} \tag{1.2.15}$$

Pol Greenove funkcije u E-ravni predstavlja energiju eksitona u harmonijskoj aproksimaciji:

$$E_o(\vec{k}) = \Lambda + \frac{1}{2} C_{\vec{k}} \; ; \qquad C_{\vec{k}} = \sum_{\vec{\ell}} C_{\vec{\ell}} \, e^{i\vec{k}\vec{\ell}} \tag{1.2.16}$$

Za prostu kubnu rešetku, u aproksimaciji najbližih suseda i u oblasti malih talasnih vektora se može pisati:

$$E_o(\vec{k}) = \tilde{\Lambda} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \; ; \qquad m^* = \frac{\hbar^2}{Ca^2} \; . \qquad \tilde{\Lambda} = \Lambda + 3C \tag{1.2.17}$$

gde je a konstanta rešetke i C matrični element rezonantne interakcije uzet izmedju najbližih suseda. Kao što se vidi, u eksitonskom spektru postoji prag energije $\tilde{\Lambda}$ koja ustvari predstavlja energiju pobudjenja izolovanog molekula i popravku koja dolazi od disperzije pobudjenja (tj. od kolektivizacije pobudjenja izolovanog molekula). Ova popravka ima oblik kinetičke energije čestice samo što je realna masa m zamenjena efektivnom masom $m^* = \hbar/Ca^2$. Iz izraza za m^* vidi se da zavisno od znaka C eksitoni mogu da imaju i pozitivnu i negativnu masu. Ako je rezonantna interakcija privlačna, tj. $C < 0$, tada je efektivna masa eksitona pozitivna. U protivnom slučaju imaju negativnu efektivnu masu. S tim u vezi govori se o pozitivnoj i negativnoj disperziji eksitona. Pozitivnoj efektivnoj masi odgovara pozitivna disperzija. Na osnovu izraza (1.2.15) i opšteg pravila:

$$\langle \hat{B}(x')\hat{A}(x)\rangle_o = \int dk \, \frac{C(k) \; e^{ik(x-x')}}{e^{\hbar\Omega(k)/\theta} - 1}$$

$$\langle \hat{A}(x)\hat{B}(x')\rangle_o = \int dk \, \frac{C(k) \; e^{ik(x-x')}}{1 - e^{\hbar\Omega(k)/\theta}} \quad ,$$

za koncentraciju eksitona se dobija izraz:

$$N_o = \langle B^+_{\vec{a}} B_{\vec{a}} \rangle_o = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \left(e^{E_o(\vec{k})/\theta} - 1\right)^{-1} \tag{1.2.18}$$

Kako je $E_o(k)$ reda 5 eV, očigledno je da su eksitonske koncentracije veoma male, čak i pri najvišim temperaturama. Treba naglasiti da velike eksitonske energije dolaze od energije pobudjenja izolovanog molekula, tj. od veličine Λ; disperziona popravka $(\hbar^2k^2/2m^*) = Ca^2k^2$ proporcionalna je veličini dipol-dipolne interakcije i manja je za dva reda veličine od Λ. Otuda disperzija ne igra bitnu ulogu u eksitonskom sistemu, kao što je to slučaj u sistemu spinskih talasa.

Greenova funkcija prve aproksimacije dobija se iz (1.2.13) ako se zadrže svi delovi proporcionalni eksitonskoj koncentraciji, ali se i dalje uzima $W=0$. Kao što je poznato, ovaj račun daje korektan razvoj za magnetizaciju na niskim temperaturama. Znači:

$$C^{(1)}_{\vec{k}}(E) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{1+2N_0}{E-E_1(\vec{k})} \qquad (1.2.19)$$

Pol Greenove funkcije u E-ravni:

$$E_1(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + M(\vec{k});$$

$$M(\vec{k}) = N^{-1}\sum_{\vec{q}} (D_0 + D_{\vec{k}-\vec{q}} - C_{\vec{k}} - C_{\vec{q}})\langle B^{+}_{\vec{q}}B_{\vec{q}}\rangle_0 \qquad (1.2.20)$$

predstavlja energiju u prvoj aproksimaciji. Popravka $M(\vec{k})$ dolazi i od dinamičke interakcije eksitona, jer je proporcionalna i veličinama $C_{\vec{k}}$, preko kojih se u račun uključuje kinematička interakcija, i veličinama $D_{\vec{k}}$ koje karakterišu dinamičku interakciju eksitona. Srednja koncentracija bozona u prvoj aproksimaciji iznosi:

$$N_1 = \langle B^{+}_{\vec{a}}B_{\vec{a}}\rangle_{(1)} = \frac{1+2N_0}{N}\sum_{\vec{k}} (e^{E_1(\vec{k})/\theta}-1)^{-1} \qquad (1.2.21)$$

dok se srednja paulionska koncentracija računa po obrascu:

$$\begin{aligned}
\langle P^{+}_{\vec{a}}P_{\vec{a}}\rangle &= \langle B^{+}_{\vec{a}}B_{\vec{a}}\rangle_{(1)} - \langle B^{+}_{\vec{a}}B^{+}_{\vec{a}}B_{\vec{a}}B_{\vec{a}}\rangle_{(0)} = \\
&= \langle B^{+}_{\vec{a}}B_{\vec{a}}\rangle_{(1)} - 2\langle B^{+}_{\vec{a}}B_{\vec{a}}\rangle^2_{(0)} = \\
&= N^{-1}\sum_{\vec{k}} (e^{E_1(\vec{k})/\theta}-1)^{-1} + 2N_0N^{-1}(e^{E_1(\vec{k})/\theta}-1)^{-1} - 2N_0^2 \simeq \\
&\simeq N^{-1}\sum_{\vec{k}} (e^{E_1(\vec{k})/\theta}-1)^{-1} + 2N_0N^{-1}\sum_{\vec{k}} (e^{E_0(\vec{k})/\theta}-1)^{-1} - 2N_0^2 = \\
&= N^{-1}\sum_{\vec{k}} (e^{E_k(\vec{k})/\theta}-1)^{-1}
\end{aligned} \qquad (1.2.22)$$

Lako je zaključiti da popravke neznatno menjaju koncentraciju dobijenu u nultoj aproksimaciji, tako da i dalje ostaje na snazi zaključak o veoma niskim eksitonskim koncentracijama.

Konačno se može preći na analizu kompletnog izraza (1.2.13). Iz strukture izraza se vidi da Greenova funkcija $G_{\vec{k}}(E)$ pored već analiziranog pola $E = E_1(\vec{k})$ može da ima i dopunske polove u E-ravni, ukoliko jednačina:

$$W_{\vec{k}}(E) = 1 \tag{1.2.23}$$

ima bilo kakva rešenja po E. Ukoliko bi ova rešenja bila realna i pozitivna ili u krajnjem slučaju kompleksna sa pozitivnim realnim delom, ona bi se mogla interpretirati kao energija nekih novih pobudjenja u molekularnim kristalima, koja nastaju kao rezultat eksiton-eksiton interkacije. Eksplicitni izraz $W_{\vec{k}}(E)$ dobija se iz (1.2.13) iteracionim postupkom. Strogo govoreći, iteraciju bi trebalo vršiti sa $G_{\vec{k}}^{(1)}(E)$ kao polaznim rešenjem. Kako je već ranije rečeno da su N_0 i $M_1(\vec{k}) \approx N_0$ veoma mali, dovoljno je da se u izrazu za $W_{\vec{k}}(E)$ uzmu Greenove funkcije $G_{\vec{k}}^{(0)}(E)$, koje odgovaraju nultoj aproksimaciji. Posle zamene:

$$G_{\vec{k}}^{(0)}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - E_0(\vec{k}) + i\delta} = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - E_0(\vec{k})} + \frac{1}{2}\delta[E - E_0(\vec{k})] \tag{1.2.24}$$
$$\delta \to +0$$

i integracije po energijama za funkciju $W_{\vec{k}}(E)$ dobija se sledeći izraz:

$$W_{\vec{k}}(E) = -\frac{1}{2N^2} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} [f(E,\vec{k},\vec{q}_1,\vec{q}_2) - i\pi\varphi(E,\vec{k},\vec{q}_1,\vec{q}_2)]$$

$$f(E,\vec{k},\vec{q}_1,\vec{q}_2) = \frac{E - E_0(\vec{k}) - C\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2 + D\vec{q}_1 - \vec{q}_2}{E - E_0(\vec{q}_1) + E_0(\vec{q}_2) - E_0(\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2)} \tag{1.2.25}$$

$$\varphi(E,\vec{k},\vec{q}_1,\vec{q}_2) = [E - E_0(\vec{k}) - C\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2 + D\vec{q}_1 - \vec{q}_2]\delta[E - E_0(\vec{q}_1) + E_0(\vec{q}_2) - E_0(\vec{k}-\vec{q}_1+\vec{q}_2)]$$

Eksplicitna zavisnost funkcije W od energije se na osnovu prethodnog izraza teško nalazi. Ako se predje od sumiranja na integraciju, tada se u (1.2.25) pojavljuje četvorostruki singularni integral, pa se postavlja pitanje da li bi i numeričko rešavanje moglo da dâ tabelarnu vrednost funkcije W od energije. Neophodno je, zbog toga, da se izraz (1.2.25) zameni nekim aproksimativnim izrazom. Da bi se dobio bar kvalitativan zaključak o zavisnosti $W = W(E)$, ovde je izvršena sledeća aproksimacija:

$$C\vec{k},\vec{q}_1,\vec{q}_2 \simeq \overline{C} = [N^{-1} \sum_{\vec{k}} C\,\frac{2}{k}]^{1/2}$$

$$D\vec{k},\vec{q}_1,\vec{q}_2 \simeq \overline{D} = [N^{-1} \sum_{\vec{k}} D\,\frac{2}{k}]^{1/2} \qquad (1.2.26)$$

koja se sastoji u zameni funkcija $C\vec{k}$ i $D\vec{k}$ njihovim kvadratnim srednjim vrednostima po celokupnom impulsnom prostoru. Za prostu kubnu rešetku u aproksimaciji najbližih suseda je:

$$C_{\vec{k}} = 2C \sum_{\alpha} \cos ak_{\alpha} \; ; \qquad D_{k} = 2D \sum_{\alpha} \cos ak_{\alpha} \; ;$$
$$\alpha \in (x,y,z)$$
$$\overline{C} = C\sqrt{6} \; ; \qquad \overline{D} = D\sqrt{6} \qquad (1.2.27)$$

U ovoj, veoma gruboj aproksimaciji, otuda sumiranje po impulsima u izrazu (1.2.25), funkcija $W(E)$ se lako nalazi, pa uslov (1.2.23) za odredjivanje dopunskih polova postaje:

$$\frac{E - \Delta - \frac{3}{2}\overline{C} + \overline{D}}{E - \Delta - \frac{1}{2}\overline{C}} - i\pi(E - \Delta - \frac{3}{2}\overline{C} + \overline{D})\delta(E - \Delta - \frac{1}{2}\overline{C}) = -2 \qquad (1.2.28)$$

Ako se iz razmatranja isključi tačka $E = E_0(\vec{k}) = \Delta + \frac{1}{2}\overline{C} = -2$, koja, kao što je poznato, predstavlja eksitonsku energiju u aproksimaciji koja je upotrebljena, tada delta funkcija postaje jednaka nuli, a uslov (1.2.28) prelazi u:

$$\frac{E - \Delta - \frac{3}{2}\overline{C} + \overline{D}}{E - \Delta - \frac{1}{2}\overline{C}} = -2 \qquad (1.2.29)$$

tako da se za energiju dobija rešenje:

$$E_c = \Delta + \frac{1}{6}(5\overline{C} - 2\overline{D}) = \Delta + \frac{5C - 2D}{\sqrt{6}} \qquad (1.2.30)$$

U istoj aproksimaciji hamronijska eksitonska energija ima oblik:

$$\overline{E_0(\vec{k})} = \Delta + C\sqrt{\frac{3}{2}} \qquad (1.2.31)$$

pa je jasno da rešenje E_c ne predstavlja energiju eksitona, nego energije nekih novih pobudjenja nastalih usled eksiton-eksiton interakcije.

Ovi dopunski nivoi energije s razlogom se mogu nazvati kinematički nivoi, a sama pobudjenja kinematičkim ekscitacijama, jer je očigledno da svoj nastanak duguju kinematičkoj interakciji eksitona. Radi se o tome da se uslov (1.2.23), koji daje ove nivoe energije, pojavio zbog prisustva funkcije $\langle\langle B_t^+ B_t B_t | B_o^+ B_o^+ B_o \rangle\rangle$ u proračunima za energije sistema, a ove funkcije su kinematičkog porekla, jer dolaze usled razlike u komutacionim relacijama za Bose i Pauli operatore. S obzirom na oblik funkcije $\langle\langle B_t^+ B_t B_t | B_o^+ B_o^+ B_o \rangle\rangle$ jasno je i fizičko poreklo kinematičkih nivoa. Oni očigledno nastaju pri tročestičnim eksitonskim procesima i takvim gde se dva eksitona fuzionišu u jedan novi nestabilni eksiton sa približno dva puta većom energijom, a koji se posle izvesnog vremena raspada na dva obična eksitona. Kvant energije koji se oslobadja u ovom procesu fuzija-raspad predstavlja kinematičko pobudjenje sistema.

Ako se Greenova funkcija (1.2.13) izračuna u aproksimaciji koja je korišćena prilikom nalaženja kinematičkih nivoa dobija se rezultat:

$$G(E) = \frac{i}{3\pi}\,\frac{1}{E - E_c} \tag{1.2.32}$$

Kao što se vidi, funkcija više nema pol za $E = \overline{E_o(\vec{k})}$, koji bi odgovarao običnim eksitonima, već samo pol koji daje energiju kinematičkih nivoa. Ovo znači da se eksitoni i kinematičke ekscitacije uzajamno isključuju, tj. kada se pojavi kinematički nivo, obični eksitonski nivo se gubi. Očigledno je da važi i obrnuti zaključak: pojava eksitona dovodi do iščezavanja kinematičkog nivoa, jer je iz prethodne analize jasno da pri $E = \overline{E_o(\vec{k})}$ uslov (1.2.28) za odredjivanje energija kinematičkih nivoa gubi svaki smisao. Ovo je u neku ruku i razumljivo s obzirom na napred navedenu fizičku sliku nastanka kinematičkih nivoa, prema kojoj oni nastaju u procesima vezanim za iščezavanje para eksitona usled njihovog fuzionisanja u novu kvazičesticu. Ipak, ova analiza predstavlja samo grubu procenu realne situacije. Tačniji proračun energija kinematičkih nivoa [4] pokazuje da i eksitoni i kinematičke ekscitacije mogu istovremeno da egzistiraju, pri čemu je vreme života kinematičkih ekscitacija mnogo kraće od vremena života eksitona. Na osnovu ovako kratkog vremena života kinematičkih eksitacija u [4] je zaključeno da su one odgovorne za veoma veliko širenje linija u optičkim spektrima kristala. Ovo širenje, koje je reda $5\times10^4 m^{-1}$, teorijski nije moglo da se objasni kao posledica eksiton-fonon interakcije.

1.3. KINEMATIČKI NIVOI KOD MULTINIVOSKE SHEME

Hamiltonijan eksitonskog sistema u kvazi-Pauli operatorima ima oblik (odeljak 1.1., formule (1.1.28 - 1.1.32)):

$$H = H_0 + H_2 + H_4$$

$$H_0 = N\,[E_0 + \frac{1}{2}F(0000)]$$

$$H_2 = \sum_{\vec n}\sum_{\mu\nu=1}^{W}\Delta_{\mu\nu}P^+_{\mu\vec n}P_{\nu\vec n} + \sum_{\vec n\vec m}\sum_{\mu\nu=1}^{W}S_{\mu\nu}(\vec n\vec m)P^+_{\mu\vec n}P_{\nu\vec m} +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}\sum_{\mu\nu=1}^{W}[\tilde R_{\mu\nu}(\vec n\vec m)P^+_{\mu\vec n}P^+_{\nu\vec m} + \tilde R_{\nu\mu}(\vec n\vec m)P_{\nu\vec m}P_{\mu\vec n}]$$

$$H_4 = \sum_{\vec n\vec m}\sum_{\mu\nu\mu'\nu'=1}^{W}T_{\mu\nu\mu'\nu'}(\vec n\vec m)P^+_{\mu\vec n}P_{\nu\vec n}P^+_{\mu'\vec m}P_{\nu'\vec m} \qquad (1.3.1)$$

Kvazi-Pauli operatori ne zadovoljavaju ni Fermi ni Bose komutacione relacije, pa se najčešće izražavaju preko Bose operatora. Kvazi-Pauli operatori izraženi preko Bose operatora dati su u obliku beskonačnih bozonskih redova. Formule za prelaz su sledeće:

$$P_{\mu\vec n} = (1 - \sum_{\mu'\neq 0,\mu}^{W}\hat Z_{\mu'\vec n})\hat Y^{1/2}_{\mu\vec n}B_{\mu\vec n}$$

$$P^+_{\mu\vec n} = (1 - \sum_{\mu'\neq 0,\mu}^{W}\hat Z_{\mu'\vec n})B^+_{\mu\vec n}\hat Y^{1/2}_{\mu\vec n}$$

$$P^+_{\mu\vec n}P_{\mu\vec n} = (1 - \sum_{\mu'\neq 0,\mu}^{W}\hat Z_{\mu'\vec n})\hat Z_{\mu\vec n}$$

$$\hat Z_{\mu\vec n} = \sum_{\rho=0}^{\infty}\frac{(-2)^\rho}{(1+\rho)!}B^{+\,\rho+1}_{\mu\vec n}B^{\rho+1}_{\mu\vec n}$$

$$\hat Y_{\mu\vec n} = \sum_{\rho=0}^{\infty}\frac{(-2)^\rho}{(1+\rho)!}B^{+\,\rho}_{\mu\vec n}B^{\rho}_{\mu\vec n} \qquad (1.3.2)$$

Ako se kvazi-Pauli operatori prosto zamene bozonima $P = B$ i $P^+ = B^+$, što predstavlja najgrublju aproksimaciju, tada se dobija iz (1.3.1) harmonijski eksitonski hamiltonijan:

$$H_{harm.} = \sum_{\vec{n}} \sum_{\mu,\nu=1}^{w} \Lambda_{\mu\nu} B^+_{\mu\vec{n}} B_{\nu\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu,\nu=1}^{w} S_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) B^+_{\mu\vec{n}} B_{\nu\vec{m}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu,\nu=1}^{w} [\tilde{R}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) B^+_{\mu\vec{m}} B_{\nu\vec{n}} + \tilde{R}_{\nu\mu}(\vec{n}\vec{m}) B_{\nu\vec{m}} B_{\mu\vec{n}}] \qquad (1.3.3)$$

Iskoristi li se veći broj članova harmonijskih redova (1.3.2) pojavljuju se tada dopunski članovi koji predstavljaju kinematičku i dinamičku interpretaciju eksitona.

Dinamičku interpretaciju eksitona predstavlja deo H_4 hamiltonijana (1.3.1) u kojem su kvazi-Pauli operatori zamenjeni Bose operatorima, tj.:

$$H_{din.} = \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu,\nu,\mu',\nu'=1}^{w} T_{\mu\nu\mu'\nu'}(\vec{n}\vec{m}) B^+_{\mu\vec{n}} B_{\nu\vec{n}} B^+_{\mu'\vec{m}} B_{\nu'\vec{m}} \qquad (1.3.4)$$

Kinematička interpretacija nastaje usled razlike u komutacionim relacijama za Bose i kvazi-Pauli operatore. Ako se kvazi-Pauli operatori zamene beskonačnim bozonskim redovima:

$$P_{f\vec{n}} = B_{f\vec{n}} \; ; \quad P^+_{\vec{n}f} = B^+_{\vec{n}f} \; ; \quad P^+_{f\vec{n}} P_{f\vec{n}} = B^+_{f\vec{n}} B_{f\vec{n}} \qquad (1.3.5)$$

tada forma H_2 izražena u Bose operatorima sadrži kvadratnu formu $H_{harm.}$ (1.3.3) i osim toga forme četvrtog, šestog itd. reda po Bose operatorima. Sve ove forme višeg reda od drugog po Bose operatorima čine kinematičku interakciju eksitona.

Na osnovu ovoga jasno je da se može uvesti i pojam kinematičko-dinamičke interakcije i to bi bili svi oni delovi šestog, osmog itd. reda po Bose operatorima kada se u H_4 kvazi-Pauli operatori zamene beskonačnim bozonskim redovima (1.3.2).

Na kraju ovog paragrafa dat je eksplicitni oblik hamiltonijana kinematičke interakcije četvrtog reda. Da bi se ovaj izraz dobio potrebno je da se uzme i drugi član beskonačnih bozonskih redova (1.3.2). Tada se dobija:

$$
\begin{aligned}
P_{\vec{n}f} &= B_{f\vec{n}} - \sum_{f'=1}^{W} B^{+}_{f'\vec{n}} B_{f'\vec{n}} B_{f\vec{n}} \\
P^{+}_{f\vec{n}} &= B^{+}_{f\vec{n}} - \sum_{f'=1}^{W} B^{+}_{f\vec{n}} B^{+}_{f'\vec{n}} B_{f'\vec{n}} \\
P^{+}_{f\vec{n}} P_{f\vec{n}} &= B^{+}_{f\vec{n}} B_{f\vec{n}} - \sum_{f'=1}^{W} B^{+}_{f\vec{n}} B^{+}_{f'\vec{n}} B_{f'\vec{n}} B_{f\vec{n}}
\end{aligned}
\tag{1.3.6}
$$

Ako se (1.3.6) zameni u H_2 i zadrži forma četvrtog reda, tada ona predstavlja kinematičku interpretaciju eksitona. Eksplicitni oblik ova interakcije je sledeći:

$$
\begin{aligned}
-H_{kin} = &\sum_{\vec{n}} \sum_{\mu,\nu=1}^{W} \Delta_{\mu\nu} \sum_{f=1}^{W} B^{+}_{\mu\vec{n}} B^{+}_{f\vec{n}} B_{f\vec{n}} B_{\mu\vec{n}} + \\
&+ \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu,\nu=1}^{W} S_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) \sum_{f=1}^{W} \left(B^{+}_{\mu\vec{n}} B^{+}_{f\vec{m}} B_{f\vec{m}} B_{\nu\vec{m}} + B^{+}_{\mu\vec{m}} B^{+}_{f\vec{n}} B_{f\vec{n}} B_{\nu\vec{m}}\right) + \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu,\nu=1}^{W} \tilde{R}_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) \sum_{f=1}^{W} \left(B^{+}_{\mu\vec{n}} B^{+}_{\nu\vec{m}} B^{+}_{f\vec{m}} B_{f\vec{m}} + B^{+}_{\nu\vec{m}} B^{+}_{\mu\vec{m}} B^{+}_{f\vec{n}} B_{f\vec{n}}\right) + \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{\mu,\nu=1}^{W} \tilde{R}_{\nu\mu}(\vec{n}\vec{m}) \sum_{f=1}^{W} \left(B^{+}_{f\vec{m}} B_{f\vec{m}} B_{\nu\vec{m}} B_{\mu\vec{n}} + B^{+}_{f\vec{n}} B_{f\vec{n}} B_{\mu\vec{n}} B_{\nu\vec{m}}\right)
\end{aligned}
\tag{1.3.7}
$$

Kinematičke i dinamičke interakcije eksitona unose popravke u harmonijski spektar eksitona:

$$
\begin{aligned}
E_{1,2}(\vec{k}) = &\frac{1}{2}\left\{E_1 + E_2 + \frac{1}{2}[F(1100) + F(2200) + F(0011) + F(0022)]\right\} + \\
&+ \frac{1}{2}[S_{11}(\vec{k}) + S_{22}(\vec{k})] - E_0 - F(0000) \pm \\
&\pm \frac{1}{2}\sqrt{\left\{E_1 - E_2 - \frac{1}{2}[F(1100) + F(0011) - F(2200) - F(0022) + S_{11}(\vec{k}) - S_{22}(\vec{k})]\right\}^2 + \ldots} \\
&\overline{\ldots + [F(1200) + F(0012) + S_{12}(\vec{k})]\cdot[F(2100) + F(0021) + S_{21}(\vec{k})]}
\end{aligned}
\tag{1.3.8}
$$

ali mogu da dovedu i do drugih efekata od kojih je svakako najinteresantnija pojava dopunskih ekscitacija koje imaju prirodu optičkih pobudjenja, ali nisu eksitoni. Ovi dopunski nivoi nastaju kao rezultat kinematičke interakcije eksitona i u daljem tekstu se nazivaju kinematičkim ekscitacijama ili kinematičkim nivoima.

Analiza eksitonskih i kinematičkih nivoa vrši se hamiltonijanom (1.1.28) u kojem se deo proporcionalan sa $\tilde{R}$ zanemaruje, jer, kao što je ranije rečeno, ovaj deo daje male popravke. Znači, hamiltonijan sistema ima oblik:

$$H = \sum_{\vec{n}\mu\nu} \Delta_{\mu\nu} P^{+}_{\mu\vec{n}} P_{\nu\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}\mu\nu} S_{\mu\nu}(\vec{n}\vec{m}) P^{+}_{\mu\vec{n}} P_{\nu\vec{m}} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}\vec{m}\mu\nu\mu'\nu'} T_{\mu\nu\mu'\nu'}(\vec{n}\vec{m}) P^{+}_{\mu\vec{n}} P_{\nu\vec{n}} P^{+}_{\mu'\vec{m}} P_{\nu'\vec{m}} \tag{1.3.9}$$

Eksitonski i kinematički nivoi traže se kao polovi kvazipaulionske Greenove funkcije:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) = \langle\langle P_{\alpha\vec{a}}(t) \,|\, P^{+}_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle \tag{1.3.10}$$

Korišćenjem standardne tehnike za dvovremenske temperaturske funkcije Greena, može se napisati:

$$i \frac{d}{dt} \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) = i\delta(t) \langle [P_{\alpha\vec{a}}, P^{+}_{\beta\vec{b}}] \rangle + \langle\langle [P_{\alpha\vec{a}}(t), \hat{H}] \,|\, P^{+}_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle \tag{1.3.11}$$

što primenom komutacionih relacija (1.3.5) prelazi u:

$$i \frac{d}{dt} \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) = i\delta(t) [(1 - \sum_{\mu} \langle P^{+}_{\mu\vec{a}} P_{\mu\vec{a}} \rangle) \delta_{\alpha\beta} - \langle P^{+}_{\beta\vec{a}} P_{\alpha\vec{a}} \rangle] \delta_{\vec{a}\vec{b}} +$$

$$+ \sum_{\vec{m}\nu} R_{\alpha\nu}(\vec{a}\vec{m}) \Gamma_{\nu\beta}(\vec{m}\vec{b}t) - \sum_{\vec{m}} \Big\{ \sum_{\mu\nu} S_{\mu\nu}(\vec{a}\vec{m}) \langle\langle P^{+}_{\mu\vec{a}}(t) P_{\alpha\vec{a}}(t) P_{\nu\vec{m}}(t) \,|\, P^{+}_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_{\mu\nu} S_{\alpha\nu}(\vec{a}\vec{m}) \langle\langle P^{+}_{\mu\vec{a}}(t) P_{\mu\vec{a}}(t) P^{+}_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle -$$

$$- \sum_{\mu'\nu'\nu} [T_{\alpha\nu\mu'\nu'}(\vec{a}\vec{m}) + T_{\mu'\nu'\alpha\nu}(\vec{m}\vec{a})] \langle\langle P^{+}_{\mu'\vec{m}}(t) P_{\nu'\vec{m}}(t) P_{\nu\vec{a}}(t) \,|\, P^{+}_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle \Big\} \tag{1.3.12}$$

gde je

$$R_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}) = \Delta_{\alpha\beta} \delta_{\vec{a}\vec{b}} + S_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}) \; .$$

Da bi se Vikova teorema mogla primeniti prilikom dekuplovanja viših funkcija Greena u formuli (1.3.12) vrši se prelaz sa kvazi-Pauli operatora na Bose operatore prema formulama (1.3.6), tj. :

$$P_{\alpha\vec{a}} = B_{\alpha\vec{a}} - \sum_{\mu} B^{+}_{\mu\vec{a}} B_{\mu\vec{a}} B_{\alpha\vec{a}}$$

i

$$P^{+}_{\beta\vec{b}} = B^{+}_{\beta\vec{b}} - \sum_{\mu} B^{+}_{\beta\vec{b}} B^{+}_{\mu\vec{b}} B_{\mu\vec{b}} \tag{1.3.12'}$$

Dekuplovanje viših bozonskih funkcija Greena izvodi se tako što se sparivanje po Vikovoj teoremi vrši za ista i za različita vremena, pri čemu se kvadrati eksitonskih koncentracija $\langle B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \rangle$ zanemaruju. Pomenuta procedura omogućuje da se, pored eksitonskih, u račun uvedu i kinematički nivoi, a oni se javljaju kao rezultat sparivanja po različitim vremenima.

Ako se uvedu sledeće oznake:

$$\langle\langle B_{\alpha\vec{a}}(t) | B^+_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle \equiv G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) \ ;$$

$$\langle\langle B^+_{\beta\vec{b}}(t) | B_{\alpha\vec{a}}(0) \rangle\rangle \equiv D_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) \ ;$$

$$\langle B^+_{\alpha\vec{a}}(t) B_{\beta\vec{b}}(t) \rangle \equiv N_{\beta\alpha}(\vec{b}\vec{a}) \ ;$$

$$\langle B^+_{\alpha\vec{a}}(t) B_{\beta\vec{a}}(t) \rangle \equiv N_{\beta\alpha} \qquad (1.3.13)$$

tada se, nakon primene Vikove teoreme za kvazipaulionsku Greenovu funkciju, dobija:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) = G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) - \sum_{\mu}[\langle\langle B_{\alpha\vec{a}}(t) | B^+_{\beta\vec{b}}(0) B^+_{\mu\vec{b}}(0) B_{\mu\vec{b}}(0) \rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle B^+_{\mu\vec{a}}(t) B_{\mu\vec{a}}(t) B_{\alpha\vec{a}}(t) | B^+_{\beta\vec{b}}(0) \rangle\rangle] + \sum_{\mu\nu} \langle\langle B^+_{\mu\vec{a}}(t) B_{\mu\vec{a}}(t) B_{\alpha\vec{a}}(t) | B^+_{\mu\vec{b}}(0) B^+_{\nu\vec{b}}(0) B_{\nu\vec{b}}(0) \rangle\rangle =$$

$$= G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) - \sum_{\mu}[N_{\mu\mu} G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) + N_{\mu\beta} G_{\alpha\mu}(\vec{a}\vec{b}t) + N_{\mu\mu} G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) + N_{\alpha\beta} G_{\mu\beta}(\vec{a}\vec{b}t)] +$$

$$+ \sum_{\mu\nu} D_{\nu\mu}(\vec{b}\vec{a}t)[G_{\mu\beta}(\vec{a}\vec{b}t) G_{\alpha\nu}(\vec{a}\vec{b}t) + G_{\mu\nu}(\vec{a}\vec{b}t) G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t)] + O(N^2) \ .$$

Za dalji račun pogodno je da se uvedu matrice:

$$\hat{\Gamma}(\vec{a}\vec{b}t) = \| \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) \| \ ;$$

$$\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) = \| G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) \| \ ;$$

$$\hat{D}(\vec{a}\vec{b}t) = \| D_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) \| \ ;$$

$$\hat{N}(\vec{a}\vec{b}) = \| N_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}) \| \ ; \qquad \hat{1} = \| \delta_{\alpha\beta} \| \ ;$$

$$\sum_{\mu} N_{\mu\mu} = S_p \hat{N} \qquad (1.3.14)$$

i tada se, na osnovu pravila za množenje matrica, za matricu dobija sledeći izraz:

$$\hat{\Gamma}(\vec{a}\vec{b}t) = \hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)[\hat{1} - \hat{L}(\vec{a}\vec{b}t) + \hat{M}(\vec{a}\vec{b}t)$$

$$\hat{L}(\vec{a}\vec{b}t) = \hat{1} \ 2S_p\hat{N} + \hat{N} + \hat{G}^{-1}(\vec{a}\vec{b}t)\hat{N}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)$$

$$\hat{M}(\vec{a}\vec{b}t) = \hat{1}\ S_p[\hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)] + \hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) \qquad (1.3.15)$$

Korelator funkcije $\hat{\Gamma}$ približno se može izraziti kao:

$$\left(1 - \sum_{\mu}\langle P^{+}_{\mu\vec{a}}P_{\mu\vec{a}}\rangle\right)\delta_{\alpha\beta} - \langle P^{+}_{\beta\vec{a}}P_{\alpha\vec{a}}\rangle \simeq$$

$$\simeq \left(1 - \sum_{\mu}\langle B^{+}_{\mu\vec{a}}B_{\mu\vec{a}}\rangle\right)\delta_{\alpha\beta} - \langle B^{+}_{\beta\vec{a}}B_{\alpha\vec{a}}\rangle = \hat{1} - \hat{\varphi}$$

$$\hat{\varphi} = \hat{1}\ S_p\hat{N} + \hat{N} \qquad (1.3.16)$$

Dalja dekuplovanja i matrične korespondencije za jednačinu (1.3.12) su sledeća:

$$\langle\langle P^{+}_{\mu\vec{a}}(t)P_{\alpha\vec{a}}(t)P_{\nu\vec{m}}(t)\,|\,P^{+}_{\beta\vec{b}}(0)\rangle\rangle \simeq$$

$$\simeq \langle\langle B^{+}_{\mu\vec{a}}(t)B_{\alpha\vec{a}}(t)B_{\nu\vec{m}}(t)\,|\,B^{+}_{\beta\vec{b}}(0)\rangle\rangle -$$

$$- \sum_{\gamma}\langle\langle B^{+}_{\mu\vec{a}}(t)B_{\alpha\vec{a}}(t)B_{\nu\vec{m}}(t)\,|\,B^{+}_{\beta\vec{b}}(0)B^{+}_{\gamma\vec{b}}(0)B_{\gamma\vec{b}}(0)\rangle\rangle =$$

$$= N_{\alpha\mu}G_{\nu\beta}(\vec{m}\vec{b}t) + N_{\nu\mu}(\vec{m}\vec{a})G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t) -$$

$$- \sum_{\gamma} D_{\gamma\mu}(\vec{b}\vec{a}t)[G_{\alpha\beta}(\vec{a}\vec{b}t)G_{\nu\gamma}(\vec{m}\vec{b}t) + G_{\alpha\gamma}(\vec{a}\vec{b}t)G_{\nu\beta}(\vec{m}\vec{b}t)] \quad ;$$

$$\langle\langle P^{+}_{\mu\vec{a}}(t)P_{\mu\vec{a}}(t)P_{\nu\vec{m}}(t)\,|\,P^{+}_{\beta\vec{b}}(0)\rangle\rangle \simeq$$

$$\simeq \langle\langle B^{+}_{\mu\vec{a}}(t)B_{\mu\vec{a}}(t)B_{\nu\vec{m}}(t)\,|\,B^{+}_{\beta\vec{b}}(0)\rangle\rangle -$$

$$- \sum_{\gamma}\langle\langle B^{+}_{\mu\vec{a}}(t)B_{\mu\vec{a}}(t)B_{\nu\vec{m}}(t)\,|\,B^{+}_{\beta\vec{b}}(0)B^{+}_{\gamma\vec{b}}(0)B_{\gamma\vec{b}}(0)\rangle\rangle =$$

$$= N_{\mu\mu}G_{\nu\beta}(\vec{m}\vec{b}t) + N_{\nu\mu}(\vec{m}\vec{a})G_{\mu\beta}(\vec{a}\vec{b}t) -$$

$$- \sum_{\gamma} D_{\gamma\mu}(\vec{b}\vec{a}t)[G_{\mu\beta}(\vec{a}\vec{b}t)G_{\nu\gamma}(\vec{m}\vec{b}t) + G_{\mu\gamma}(\vec{a}\vec{b}t)G_{\nu\beta}(\vec{a}\vec{b}t)] \quad ;$$

$$\langle\langle P^{+}_{\mu'\vec{m}}(t)P_{\nu\vec{a}}(t)\,|\,P^{+}_{\beta\vec{b}}(0)\rangle\rangle \simeq$$

$$\simeq \langle\langle B^{+}_{\mu'\vec{m}}(t)B_{\nu'\vec{m}}(t)B_{\nu\vec{a}}(t)\,|\,B^{+}_{\beta\vec{b}}(0)\rangle\rangle -$$

$$- \sum_{\gamma}\langle\langle B^{+}_{\mu'\vec{m}}(t)B_{\mu'\vec{m}}(t)B_{\nu\vec{a}}(t)\,|\,B^{+}_{\beta\vec{b}}(0)B^{+}_{\gamma\vec{b}}(0)B_{\gamma\vec{b}}(0)\rangle\rangle =$$

$$= N_{\nu'\mu'}G_{\nu\beta}(\vec{a}\vec{b}t) + N_{\nu\mu'}(\vec{a}\vec{m})G_{\nu'\beta}(\vec{m}\vec{b}t) -$$

$$- \sum_{\gamma} D_{\nu\mu'}(\vec{b}\vec{m}t)[G_{\nu'\beta}(\vec{m}\vec{b}t)G_{\nu\gamma}(\vec{a}\vec{b}t) + G_{\nu'\gamma}(\vec{m}\vec{b}t)G_{\nu\beta}(\vec{a}\vec{b}t)] \quad ;$$

$$\sum_{\nu} R_{\alpha\nu}\Gamma_{\nu\beta} \longrightarrow \hat{R}(\overrightarrow{am})\hat{\Gamma}(\overrightarrow{mbt})$$

$$\sum_{\mu\nu} S_{\mu\nu}N_{\alpha\mu}G_{\nu\beta} = \sum_{\mu\nu} N_{\alpha\mu}S_{\mu\nu}G_{\nu\beta} \longrightarrow \hat{N}\hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{G}(\overrightarrow{mbt})$$

$$\sum_{\mu\nu} S_{\mu\nu}N_{\nu\mu}G_{\alpha\beta} \longrightarrow \hat{G}(\overrightarrow{abt})S_p[\hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{N}(\overrightarrow{ma})]$$

$$\sum_{\mu\nu} S_{\alpha\nu}N_{\mu\mu}G_{\nu\beta} \longrightarrow \hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{G}(\overrightarrow{mbt})S_p\hat{N}$$

$$\sum_{\mu\nu} S_{\alpha\nu}N_{\nu\mu}G_{\mu\beta} \longrightarrow \hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{N}(\overrightarrow{ma})\hat{G}(\overrightarrow{abt})$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu} T_{\alpha\nu\mu'\nu'}N_{\nu'\mu'}G_{\nu\beta} = \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\alpha\nu\mu'\nu'}N_{\nu'\mu'}\Big)G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\overrightarrow{am})\hat{N}\big)^{12}\hat{G}(\overrightarrow{abt})$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu} T_{\alpha\nu\mu'\nu'}N_{\nu\mu'}G_{\nu'\beta} = \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\alpha\nu'\mu'\nu}N_{\nu'\mu'}\Big)G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\overrightarrow{am})\hat{N}(\overrightarrow{am})\big)^{14}\hat{G}(\overrightarrow{mbt})$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu} T_{\mu'\nu'\alpha\nu}N_{\nu'\mu'}G_{\nu\beta} = \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\mu'\nu'\alpha\nu}N_{\nu'\mu'}\Big)G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\overrightarrow{ma})\hat{N}\big)^{34}\hat{G}(\overrightarrow{abt})$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu} T_{\mu'\nu'\alpha\nu}N_{\nu\mu'}G_{\nu'\beta} \quad \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\mu'\nu\alpha\nu'}N_{\nu'\mu'}\Big)G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\overrightarrow{ma})\hat{N}(\overrightarrow{am})\big)^{32}\hat{G}(\overrightarrow{mbt})$$

$$\sum_{\mu\nu\gamma} S_{\mu\nu}D_{\gamma\mu}G_{\alpha\beta}G_{\nu\gamma} = G_{\alpha\beta}\sum_{\mu\nu\gamma} S_{\mu\nu}G_{\nu\gamma}D_{\gamma\mu} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \hat{G}\ S_p[\hat{S}\hat{G}\hat{D}] = \hat{G}(\overrightarrow{abt})\ S_p[\hat{D}(\overrightarrow{bat})\hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{G}(\overrightarrow{mbt})]$$

$$\sum_{\mu\nu\gamma} S_{\mu\nu}D_{\gamma\mu}G_{\alpha\gamma}G_{\nu\beta} = \sum_{\mu\nu\gamma} G_{\alpha\gamma}D_{\gamma\mu}S_{\mu\nu}G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \hat{G}(\overrightarrow{abt})\hat{D}(\overrightarrow{bat})\hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{G}(\overrightarrow{mbt})$$

$$\sum_{\mu\nu\gamma} S_{\alpha\nu}D_{\gamma\mu}G_{\mu\beta}G_{\nu\gamma} = \sum_{\mu\nu\gamma} S_{\alpha\nu}G_{\nu\gamma}D_{\gamma\mu}G_{\mu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \hat{S}(\overrightarrow{am})\hat{G}(\overrightarrow{mbt})\hat{D}(\overrightarrow{bat})\hat{D}(\overrightarrow{bat})\hat{G}(\overrightarrow{abt})$$

$$\sum_{\mu\nu\gamma} S_{\alpha\nu} D_{\gamma\mu} G_{\mu\gamma} G_{\nu\beta} = \sum_{\nu} S_{\alpha\nu} G_{\nu\beta} \sum_{\mu\gamma} D_{\gamma\mu} G_{\mu\gamma} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) S_p[\hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)]$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu\gamma} T_{\alpha\nu\mu'\nu'} D_{\gamma\mu'} G_{\nu'\beta} G_{\nu\gamma} = \sum_{\mu'\nu'\nu} T_{\alpha\nu\mu'\nu'} G_{\nu'\beta} \sum_{\gamma} G_{\nu\gamma} D_{\gamma\mu'} =$$
$$= \sum_{\mu'\nu'\nu} T_{\alpha\nu\mu'\nu'} (\hat{G}\hat{D})_{\nu\mu'} G_{\nu'\beta} = \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\alpha\nu'\mu'\nu} (\hat{G}\hat{D})_{\nu'\mu'}\Big) G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\vec{a}\vec{m})(\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\big)^{14}\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu\gamma} T_{\alpha\nu\mu'\nu'} D_{\gamma\mu'} G_{\nu'\gamma} G_{\nu\gamma} = \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\alpha\nu\mu'\nu'} (\hat{G}\hat{D})_{\nu'\mu'}\Big) G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\vec{a}\vec{m})(\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\big)^{12}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu\gamma} T_{\mu'\nu'\alpha\nu} D_{\gamma\mu'} G_{\nu'\beta} G_{\nu\gamma} = \sum_{\nu'}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\mu'\nu'\alpha\nu} (\hat{G}\hat{D})_{\nu\mu'}\Big) G_{\nu'\beta} =$$
$$= \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\mu'\nu\alpha\nu'} (\hat{G}\hat{D})_{\nu'\mu'}\Big) G_{\nu\beta} \longrightarrow \big(\hat{T}(\vec{m}\vec{a})(\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\big)^{32}\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)$$

$$\sum_{\mu'\nu'\nu\gamma} T_{\mu'\nu'\alpha\nu} D_{\gamma\mu'} G_{\nu'\gamma} G_{\nu\beta} = \sum_{\nu}\Big(\sum_{\mu'\nu'} T_{\mu'\nu'\alpha\nu} (\hat{G}\hat{D})_{\nu'\mu'}\Big) G_{\nu\beta} \longrightarrow$$
$$\longrightarrow \big(\hat{T}(\vec{m}\vec{a})(\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\big)^{34}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)$$

tako da se jednačina (1.3.12) konačno može napisati u obliku:

$$i\frac{d}{dt}\hat{\Gamma}(\vec{a}\vec{b}t) = i\delta(t)\delta_{\vec{a}\vec{b}}(\hat{1} - \hat{\varphi}) + \sum_{\vec{m}} \hat{R}(\vec{a}\vec{m})\hat{\Gamma}(\vec{m}\vec{b}t) -$$
$$- \sum_{\vec{m}} \Big\{ \hat{N}\hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) + \hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) S_p[\hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{N}(\vec{m}\vec{a})] +$$
$$+ \hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) S_p\hat{N} + \hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{N}(\vec{m}\vec{a})\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) -$$
$$- \big(\hat{T}(\vec{a}\vec{m})\hat{N}\big)^{12}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) - \big(\hat{T}(\vec{a}\vec{m})\hat{N}(\vec{a}\vec{m})\big)^{14}\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) -$$
$$- \big(\hat{T}(\vec{m}\vec{a})\hat{N}(\vec{a}\vec{m})\big)^{32}\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) - \big(\hat{T}(\vec{m}\vec{a})\hat{N}\big)^{34}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\Big\} +$$
$$+ \sum_{\vec{m}} \Big\{ \hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) S_p[\hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)] + \hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) +$$
$$+ \hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) + \hat{S}(\vec{a}\vec{m})\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) S_p[\hat{D}(\vec{b}\vec{a}t)\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)] -$$
$$- \big(\hat{T}(\vec{a}\vec{m})(\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\big)^{14}\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) -$$
$$- \big(\hat{T}(\vec{a}\vec{m})(\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\big)^{12}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) -$$

$$- \left(\hat{T}(\vec{m}\vec{a})(\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\right)^{32}\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t) -$$

$$- \left(\hat{T}(\vec{m}\vec{a})(\hat{G}(\vec{m}\vec{b}t)\hat{D}(\vec{b}\vec{m}t))\right)^{34}\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t)\Big\} \qquad (1.3.17)$$

U poslednjoj jednačini izvršena je Fourier-transformacija (Fourier-transformacija matrice podrazumeva Fourier-transformaciju svakog njenog elementa):

$$\hat{\Gamma}(\vec{a}\vec{b}t) = N^{-1}\sum_{\vec{k}}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\ \hat{\Gamma}(\vec{k},E)e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})-iEt}$$

$$\hat{G}(\vec{a}\vec{b}t) = N^{-1}\sum_{\vec{k}}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\ \hat{G}(\vec{k},E)e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})-iEt}$$

$$\hat{D}(\vec{a}\vec{b}t) = N^{-1}\sum_{\vec{k}}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\ \hat{D}(\vec{k},E)e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})-iEt}$$

$$\hat{N}(\vec{a}\vec{b}) = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \hat{N}(\vec{k})e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$$

$$\hat{N} = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \hat{N}(\vec{k})$$

$$\hat{S}(\vec{a}\vec{b}) = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \hat{S}(\vec{k})e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$$

$$\hat{T}(\vec{a}\vec{b}) = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \hat{T}(\vec{k})e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$$

$$\hat{R}(\vec{a}\vec{b}) = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \hat{R}(\vec{k})e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\ e^{-iEt}$$

$$\delta_{\vec{a}\vec{b}} = N^{-1}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})} \qquad (1.3.18)$$

gde je N broj molekula u kristalu. Tada se jednačina (1.1.17) svodi na:

$$[\hat{E} - \hat{R}(\vec{k})]\hat{G}(\vec{k},E)[\hat{1} - \hat{1}\ 2S_p\hat{N} - \hat{N} - \hat{G}^{-1}(\vec{k},E)\hat{N}\hat{G}(\vec{k},E)] =$$

$$= i\frac{1}{2\pi}(\hat{1} - \hat{\varphi}) - \hat{Y}(\vec{k})\hat{G}(\vec{k},E) + \hat{Z}(\vec{k},E) - [\hat{E} - \hat{R}(\vec{k})]\hat{X}(\vec{k},E) \qquad (1.3.19)$$

gde su uvedene oznake:

$$\hat{X}(\vec{k},E) = N^{-2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 \Big\{\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2)\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3) +$$

$$+ \hat{G}(\vec{q}_1E_1)S_p[\hat{D}(\vec{q}_2E_2)\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3)]\Big\}$$

$$\hat{Y}(\vec{k}) = N^{-1}\sum_{\vec{q}}\Big\{\hat{N}(\vec{q})\hat{S}(\vec{k}) + \hat{S}(\vec{k})S_p\hat{N}(\vec{q}) + \hat{S}(\vec{q})\hat{N}(\vec{q}) + S_p[\hat{N}(\vec{q})\hat{S}(\vec{q})] -$$

$$- (\hat{T}(0)\hat{N}(\vec{q}))^{12} - (\hat{T}(0)\hat{N}(\vec{q}))^{34} - (\hat{T}(\vec{k}-\vec{q})\hat{N}(\vec{q}))^{14} - (\hat{T}(\vec{k}-\vec{q})\hat{N}(\vec{q}))^{32}\Big\}$$

$$\hat{Z}(\vec{k},E) = N^{-2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2\Big\{\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2)\hat{S}(\vec{q}_3)\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3) +$$

$$+ \hat{G}(\vec{q}_1E_1)S_p[\hat{D}(\vec{q}_2E_2)\hat{S}(\vec{q}_3)\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3)] +$$

$$+ \hat{S}(\vec{q}_1)\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2)\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3) +$$

$$+ \hat{S}(\vec{q}_1)\hat{G}(\vec{q}_2E_2)S_p[\hat{D}(\vec{q}_2E_2)\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3)] -$$

$$- \{\hat{T}(\vec{q}_1-\vec{q}_2)(\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2))\}^{12}\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3) -$$

$$- \{\hat{T}(\vec{q}_1-\vec{q}_2)(\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2))\}^{34}\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3) -$$

$$- \{\hat{T}(\vec{k}-\vec{q}_1)(\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2))\}^{14}\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3) -$$

$$- \{\hat{T}(\vec{k}-\vec{q}_1)(\hat{G}(\vec{q}_1E_1)\hat{D}(\vec{q}_2E_2))\}^{32}\hat{G}(\vec{q}_3\tilde{E}_3)\Big\}$$

$$\tilde{E}_3 = E - E_1 - E_2\ ; \qquad \vec{q}_3 = \vec{q} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2 \tag{1.3.20}$$

Jednačina (1.3.20) može da se uprosti zamenjujući Greenove funkcije i srednje brojeve u članovima višeg reda njihovim vrednostima u nultoj aproksimaciji. Ne ulazeći za sada kako ove veličine izgledaju unutar funkcije (to je učinjeno kasnije), za sada se bez dokaza može uzeti da su nulte aproksimacije dijagonalne matrice (koristiti činjenicu da dijagonalne matrice komutiraju). Na osnovu navedenog pristupa dobija se relacija približna relaciji (1.3.20) kojom se dalje računa:

$$[\hat{E} - \hat{\Lambda}(\vec{k})]\hat{G}(\vec{k},E) = \frac{i}{2\pi}\hat{C}[\hat{1} + 2\pi i\hat{W}(\vec{k},E)]^{-1}$$

$$\hat{C} = \hat{1} + \hat{1}\ S_p\hat{N}^{(0)} + \hat{N}^{(0)}$$

$$\hat{\Lambda}(\vec{k}) = \hat{R}(\vec{k}) - \hat{Y}^{(0)}(\vec{k})$$

$$
\begin{aligned}
\hat{Y}^{(0)}(\vec{k}) = N^{-1} \sum_{\vec{q}} \Big\{ & \hat{N}^{(0)}(\vec{q})\hat{S}(\vec{k}) + \hat{S}(\vec{k}) S_p \hat{N}^{(0)}(\vec{q}) + \\
& + \hat{S}(\vec{q})\hat{N}^{(0)}(\vec{q}) + S_p [\hat{N}^{(0)}(\vec{q})\hat{S}(\vec{q})] - (\hat{T}(0)\hat{N}^{(0)}(\vec{q}))^{12} - \\
& - (\hat{T}(0)\hat{N}^{(0)}(\vec{q}))^{34} - (\hat{T}(\vec{k}-\vec{q})\hat{N}^{(0)}(\vec{q}))^{14} - (\hat{T}(\vec{k}-\vec{q})\hat{N}^{(0)}(\vec{q}))^{32} \Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{N}(\vec{k},E) = N^{-2} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 \Big\{ & \hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)\hat{S}(\vec{q}_3)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) + \\
& + \hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1) S_p [\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)\hat{S}(\vec{q}_3)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3)] + \hat{S}(\vec{q}_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1) \cdot \\
& \cdot \hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) + \hat{S}(\vec{q}_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1) S_p [\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3)] - \\
& - (\hat{T}(\vec{q}_1-\vec{q}_2)(\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)))^{12}\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) - \\
& - (\hat{T}(\vec{q}_1-\vec{q}_2)(\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)))^{34}\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) - \\
& - (\hat{T}(\vec{k}-\vec{q}_1)(\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)))^{14}\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) - \\
& - (\hat{T}(\vec{k}-\vec{q}_1)(\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)))^{32}\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) - \\
& - \frac{i}{2\pi} \hat{G}^{(0)-1}(\vec{k},E)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3) - \\
& - \frac{i}{2\pi} \hat{G}^{(0)-1}(\vec{k},E)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1 E_1) S_p [\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2 E_2)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3 E_3)] \Big\} .
\end{aligned}
$$

Aproksimacija:

$$
\hat{E} - \hat{R}(\vec{k}) \longrightarrow \frac{i}{2\pi} \hat{G}^{(0)-1}(\vec{k},E); \quad E_3 = E - E_1 + E_2 \tag{1.3.21}
$$

Da bi se došlo do uslova koji daje kinematičke nivoe, jednačina (1.3.21) se analizira u različitim aproksimacijama.

U nultoj aproksimaciji $\hat{A}(\vec{k}) \longrightarrow \hat{R}(\vec{k})$, $\hat{C} \longrightarrow \hat{1}$ i $\hat{W}(\vec{k},E) \longrightarrow 0$. Jednačina (1.3.21) postaje tada:

$$
[\hat{E} - \hat{R}(\vec{k})]\hat{G}(\vec{k},E) = \frac{i}{2\pi} \hat{1} \tag{1.3.22}
$$

Ako se na jednačinu (1.3.22) primeni unitarna matrica $\hat{U}_R (\hat{U}_R^+ = \hat{U}_R^{-1})$, jednačina tada postaje:

$$
\hat{U}_R^{-1} [\hat{E} - \hat{R}(\vec{k})] \hat{U}_R \hat{U}_R^{-1} \hat{G}(\vec{k},E) \hat{U}_R = \frac{i}{2\pi} \hat{1} \tag{1.3.23}
$$

Matrica $\hat{U}_R$ odredjuje se tako da dijagonalizuje matricu $\hat{R}(\vec{k})$, tj.

$$\hat{R}(\vec{k})\hat{U}_R = \hat{U}_R\hat{\Omega}^{(0)}(\vec{k}) \;; \qquad \hat{\Omega}^{(0)}(\vec{k}) = \|\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{k})\delta_{\alpha\beta}\|$$

$$\hat{U}_R^{-1}\hat{G}(\vec{k},E)\hat{U}_R = \hat{G}^{(0)}(\vec{k},E) \tag{1.3.24}$$

Na osnovu prethodnog sledi:

$$\hat{G}^{(0)}(\vec{k},E) = \frac{i}{2\pi}[\hat{E} - \hat{\Omega}^{(0)}(\vec{k},E)]^{-1} \tag{1.3.25}$$

čime je dokazano da je Greenova funkcija u nultoj aproksimaciji dijagonalna aproskimacija.

Uvedimo matricu spektralne intenzivnosti funkcije $\hat{G}^{(0)}$:

$$\hat{J}^{(0)}(\vec{k},E) = (e^{E/\theta} - 1)^{-1}\;\hat{1}\;2\mathrm{Re}\hat{G}^{(0)}(\vec{k},E) =$$

$$= (e^{E/\theta}-1)^{-1}\delta(\hat{E} - \hat{\Omega}^{(0)}(\vec{k})) = \|(e^{E/\theta}-1)^{-1}\delta(E - \Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{k}))\delta_{\alpha\beta}\| \;,$$

a, preko nje, po formuli

$$\hat{N}^{(0)}(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE\;\hat{J}^{(0)}(\vec{k},E)$$

odredimo i matricu srednjeg broja eksitona u nultoj aproksimaciji:

$$\hat{N}^{(0)}(\vec{k}) = \|(e^{(\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{k}))/\theta} - 1)^{-1}\delta_{\alpha\beta}\|$$

$$\hat{N}^{(0)} = N^{-1}\sum_{\vec{k}}\hat{N}^{(0)}(\vec{k}) =$$

$$= \|N^{-1}\sum_{\vec{k}}(e^{(\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{k}))/\theta} - 1)^{-1}\delta_{\alpha\beta}\| \tag{1.3.26}$$

Kao što se vidi i matrica srednjeg broja eksitona u nultoj aproksimaciji je dijagonalna matrica.

Izvršimo prelaz na prvu aproksimaciju koja se sastoji u tome što se u jednačini (1.3.21) uzima da je $\hat{W}(\vec{k},E) \approx 0$. Račun u ovoj aproksimaciji ne daje kinematičke nivoe ali daje popravke harmonijskih karakteristika eksitona koje dolaze usled kinematičke i dinamičke interakcije. U pomenutoj aproksimaciji jednačina (1.3.21) postaje:

$$[\hat{E} - \hat{\Lambda}(\vec{k})]\hat{G}(\vec{k},E) = \frac{i}{2\pi}\hat{C} \tag{1.3.27}$$

Nakon primene unitarne matrice $\hat{U}_\Lambda$ na jednačinu (1.3.27) ona postaje:

$$\hat{U}_{\Lambda}^{-1}[\hat{E} - \hat{\Lambda}(\vec{k})]\hat{U}_{\Lambda}\hat{U}_{\Lambda}^{-1}\hat{G}(\vec{k},E)\hat{U}_{\Lambda} = \frac{i}{2\pi}\hat{U}_{\Lambda}^{-1}\hat{C}\hat{U}_{\Lambda} \tag{1.3.28}$$

Matrica $\hat{U}_{\Lambda}$ se odredjuje tako da dijagonalizuje matricu $\hat{\Lambda}(\vec{k})$, tj. :

$$\hat{\Lambda}(\vec{k})\hat{U}_{\Lambda} = \hat{U}_{\Lambda}\hat{\Omega}^{(1)}(\vec{k})$$

$$\hat{\Omega}^{(1)}(\vec{k}) = \|\Omega_{\alpha\alpha}^{(1)}(\vec{k})\delta_{\alpha\beta}\|$$

$$\hat{U}_{\Lambda}^{-1}\hat{G}(\vec{k},E)\hat{U}_{\Lambda} = \hat{G}^{(1)}(\vec{k},E) \tag{1.3.29}$$

Veličine $\hat{\Omega}_{\alpha\alpha}^{(1)}(\vec{k})$ predstavljaju eksitonske energije u koje su uračunate i popravke od kinematičke interakcije i dinamičke interakcije eksitona.

Korelator Greenove funkcije $\hat{G}^{(1)}(\vec{k},E)$ ima oblik:

$$\hat{K} = \hat{U}_{\Lambda}^{-1}\hat{C}\hat{U}_{\Lambda} = \|K_{\alpha\beta}\|$$

$$K_{\alpha\beta} = \left(1 + S_p\hat{N}^{(0)}\right)\delta_{\alpha\beta} + \sum_{\mu} U_{\mu\alpha}^{*(\Lambda)} N_{\mu\mu}^{(0)} U_{\mu\beta}^{(\Lambda)} \tag{1.3.30}$$

i nije dijagonalna matrica, tako da ni matrica srednjeg broja eksitona, koja se izražava preko matrice $\hat{K}$ nije dijagonalna matrica, već ima oblik:

$$\hat{N}^{(1)}(\vec{k}) = \|(e^{(\Omega_{\alpha\alpha}^{(1)}(\vec{k}))/\theta} - 1)^{-1}K_{\alpha\beta}\| \tag{1.3.31}$$

Da bi se našli srednji brojevi eksitona u prvoj aproksimaciji uvodi se unitarna matrica $\hat{U}_N$ koja dijagonalizuje matricu $\hat{N}^{(1)}(\vec{k})$, tj. :

$$\hat{N}^{(1)}(\vec{k})\hat{U}_N = \hat{U}_N\hat{n}(\vec{k})$$

$$\hat{n}(\vec{k}) = \|n_{\alpha\alpha}(\vec{k})\delta_{\alpha\beta}\| \tag{1.3.32}$$

Veličine $n_{\alpha\alpha}(\vec{k})$ predstavljaju srednje brojeve eksitona na datoj temperaturi θ .

Konačno se može preći na analizu uslova koji daju energije kinematičkih nivoa. Iz jednačine (1.3.21) se vidi da Greenova funkcija $\hat{G}$ može da ima dopunske polove u odnosu na već ispitane, eksitonske, iako matrična jednačina:

$$1 + 2\pi i\, \hat{W}(\vec{k},E) = 0 \tag{1.3.33}$$

ima realno i pozitivno rešenje po E .

Da bi se ispitali kinematički nivoi u uslovu prema (1.3.33), potrebno je da se izvrši integracija po energijama E_1 i E_2 . U tom smislu sledi:

$$\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_1E_1)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_2E_2)\hat{G}^{(0)}(\vec{q}_3E_3) \underset{\delta\to 0}{=}$$

$$= \left(\frac{i}{2\pi}\right)^3 \left\|\frac{\delta_{\alpha\beta}}{E_1-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_1) + i\delta}\right\| \left\|\frac{\delta_{\alpha\beta}}{E_2-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_2) + i\delta}\right\| \left\|\frac{\delta_{\alpha\beta}}{E_3-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_3) + i\delta}\right\| =$$

$$= \left(\frac{i}{2\pi}\right)^3 \left\|\frac{\delta_{\alpha\beta}}{[E_1-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_1) + i\delta][E_2-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_2) + i\delta][E_3-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_3) + i\delta]}\right\| \tag{1.3.34}$$

Važno je napomenuti da se integracija po energijama u izrazu za $\hat{W}(\vec{k},E)$ izvodi na taj način što se najpre izvrši množenje, a zatim integracija matričnih elemenata (integracija matrice znači integraciju svakog njenog elementa).

Posle izvršene procedure uslov (1.3.33) svodi se na:

$$\hat{A}(\vec{k},E) = \hat{1}\,; \qquad \hat{A}(\vec{k},E) = \|A_{\alpha\beta}(\vec{k},E)\| \tag{1.3.35}$$

gde su matrični elementi dati sa:

$$\begin{aligned}
A_{\alpha\beta}(\vec{k},E) = (2N)^{-2} \sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \Big\{ & S_{\alpha\beta}(\vec{q}_3)\, j_{\alpha\alpha\beta}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) + \\
= \delta_{\alpha\beta} \sum_{\mu} & S_{\mu\mu}(\vec{q}_3)\, j_{\alpha\mu\mu}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) + S_{\alpha\beta}(\vec{q}_1)\, j_{\beta\beta\beta}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) + \\
+ \sum_{\mu} & S_{\alpha\beta}(\vec{q}_1)\, j_{\beta\mu\mu}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) - \sum_{\mu}[T_{\alpha\beta\mu\mu}(\vec{q}_1-\vec{q}_2) + \\
+ & T_{\mu\mu\alpha\beta}(\vec{q}_1-\vec{q}_2) + T_{\alpha\mu\mu\beta}(\vec{q}_1-\vec{k}) + T_{\mu\beta\alpha\mu}(\vec{k}-\vec{q}_1)]\, j_{\mu\mu\beta}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) - \\
- & \delta_{\alpha\beta}[E-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{k})][j_{\alpha\alpha\alpha}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) + \sum_{\mu} j_{\alpha\mu\mu}(\vec{q}_1\vec{q}_2E)]\Big\}
\end{aligned} \tag{1.3.36}$$

pri čemu funkcije j imaju sledeći oblik:

$$\begin{aligned}
j_{\alpha\beta\gamma}(\vec{q}_1\vec{q}_2E) = {} & [E-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_1) + \Omega^{(0)}_{\beta\beta}(\vec{q}_2) - \Omega^{(0)}_{\gamma\gamma}(\vec{q}_3)]^{-1} - \\
& - i\pi\delta[E-\Omega^{(0)}_{\alpha\alpha}(\vec{q}_1) + \Omega^{(0)}_{\beta\beta}(\vec{q}_2) - \Omega^{(0)}_{\gamma\gamma}(\vec{q}_3)]
\end{aligned} \tag{1.3.37}$$

Energije kinematičkih nivoa se nalaze tako što se uvede unitarna matrica $\hat{U}_A$ koja dijagonalizuje matricu $\hat{A}$, tj.

$$\hat{A}(\vec{k},E)\hat{U}_A = \hat{U}_A\hat{\mathcal{D}}(\vec{k},E)$$
$$\hat{\mathcal{D}}(\vec{k},E) = \|\mathcal{D}_{\alpha\alpha}(\vec{k},E)\delta_{\alpha\beta}\| \tag{1.3.38}$$

i izjednačavajući elemente matrice $\hat{\mathcal{D}}$ sa jedinicom:

$$\mathcal{D}_{\alpha\alpha}(\vec{k},E) = 1 \quad \text{za} \quad \alpha = 1,2,3, \ldots , w \tag{1.3.39}$$

dobija se sistem jednačina čija rešenja po E predstavljaju zakone disperzije kinematičkih ekscitacija.

Rezultati, dobijeni do sada, analizirani su i za slučaj tronivoske sheme.

Dijagonalizacija matrice $\hat{R}(\vec{k})$ daje u ovom slučaju sledeće harmonijske energije za eksitone:

$$E^{(0)}_{1,2}(\vec{k}) = \frac{1}{2}\big(R_{11}(\vec{k}) + R_{22}(\vec{k})\big) \pm \sqrt{\frac{1}{4}\big(R_{11}(\vec{k}) - R_{22}(\vec{k})\big)^2 + R_{12}(\vec{k})R_{21}(\vec{k})} \tag{1.3.40}$$

Srednji brojevi eksitona nulte aproksimacije dati su sa:

$$N^{(0)}_{11}(\vec{k}) = [e^{\left(E^{(0)}_1(\vec{k})\right)/\theta} - 1]^{-1}$$
$$N^{(0)}_{22}(\vec{k}) = [e^{\left(E^{(0)}_2(\vec{k})\right)/\theta} - 1]^{-1} \tag{1.3.41}$$

U prvoj aproksimaciji dijagonalizacija matrice dovodi do sledećih eksitonskih energija:

$$E^{(1)}_{1,2}(\vec{k}) = \frac{1}{2}\big(\Lambda_{11}(\vec{k}) + \Lambda_{22}(\vec{k})\big) \pm \sqrt{\frac{1}{4}\big(\Lambda_{11}(\vec{k}) - \Lambda_{22}(\vec{k})\big)^2 + \Lambda_{12}(\vec{k})\Lambda_{21}(\vec{k})} \tag{1.3.42}$$

a dijagonalizacija matrice srednjeg broja eksitona $\hat{N}^{(0)}(\vec{k})$ daje srednje brojeve eksitona u prvoj aproksimaciji:

$$\tilde{N}^{(1)}_{1,2}(\vec{k}) = \frac{1}{2}\big(N^{(1)}_{11}(\vec{k}) + N^{(1)}_{22}(\vec{k})\big) \pm \sqrt{\frac{1}{4}\big(N^{(1)}_{11}(\vec{k}) - N^{(1)}_{22}(\vec{k})\big)^2 + N^{(1)}_{12}(\vec{k})N^{(1)}_{21}(\vec{k})} \tag{1.3.43}$$

Konačno može da se predje na izračunavanje energija kinematičkih nivoa. Pri tome se zanemaruje zavisnost veličina S i T od talasnog vektora $\vec{k}$. Pomenute veličine zamenjuju se vrednostima funkcija za $\vec{k}=0$. Ova aproksimacija je opravdana ako su eksitonske zone uske tj. ako su matrični elementi dipol-dipolne interakcije $V_{\vec{n}\vec{m}}$ mali u odnosu na energiju pobudjenja izolovanog molekula. Znači:

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}) \approx S_{\alpha\beta}(0) \equiv S_{\alpha\beta}$$

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta}(\vec{k}) \approx T_{\alpha\beta\gamma\delta}(0) \equiv T_{\alpha\beta\gamma\delta} \qquad (1.3.44)$$

Sem ovoga, izvršene su i aproksimacije:

$$\Omega_{11}^{(0)}(\vec{k}) \approx E_1 - E_o \equiv \tilde{\Delta}_{11}$$

$$\Omega_{22}^{(0)}(\vec{k}) \approx E_2 - E_o \equiv \tilde{\Delta}_{22} \qquad (1.3.45)$$

Konačno je, na osnovu formule (1.3.36), moguće izračunati matrične elemente $A_{\alpha\beta}$ koji imaju oblik:

$$A_{11} = -\frac{3}{4} + \frac{5S_{11} + S_{22} - 4T_{1111} - T_{1122} - T_{2211} - T_{1221} - T_{2112}}{4(E - \tilde{\Delta}_{11})}$$

$$A_{22} = -\frac{3}{4} + \frac{5S_{22} + S_{11} - 4T_{2222} - T_{2211} - T_{1122} - T_{2112} - T_{1221}}{4(E - \tilde{\Delta}_{22})}$$

$$A_{12} = \frac{3S_{12} - 2(T_{1211} + T_{1112} + T_{1222} + T_{2212})}{4(E - \tilde{\Delta}_{22})}$$

$$A_{21} = \frac{3S_{21} - 2(T_{2111} + T_{1121} + T_{2122} + T_{2221})}{4(E - \tilde{\Delta}_{11})} \qquad (1.3.46)$$

Dijagonalizacija matrice $\hat{A}$ daje dijagonalne elemante matrice $\hat{\mathcal{D}}$ u obliku:

$$\mathcal{D}_{11,22}(\vec{k},E) = \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(A_{11} - A_{22})^2 + A_{12}A_{21}} \qquad (1.3.47)$$

Izjednačujući $\mathcal{D}_{11}$ i $\mathcal{D}_{22}$ sa jedinicom, što predstavlja uslove za nalaženje energija kinematičkih nivoa, pokazuje se da se oba uslova svode na jedan:

$$A_{11}A_{22} - A_{11} - A_{22} + 1 - A_{12}A_{21} = 0 \qquad (1.3.48)$$

koji daje kvadratnu jednačinu po nepoznatoj E :

$$E^2 - [\tilde{\Delta}_{11} + \tilde{\Delta}_{22} + \frac{4}{7}(u+v)]E + \tilde{\Delta}_{11}\tilde{\Delta}_{22} + \frac{4}{7}(u\tilde{\Delta}_{22} + v\tilde{\Delta}_{11}) + \frac{16}{49}(uv-w) = 0 \quad (1.3.49)$$

gde su u, v i w date redom relacijama:

$$u = \frac{1}{4}(5S_{11} + S_{22} - 4T_{1111} - T_{1122} - T_{2211} - T_{1221} - T_{2112})$$

$$v = \frac{1}{4}(5S_{22} + S_{11} - 4T_{2222} - T_{2211} - T_{1122} - T_{2112} - T_{1221})$$

$$w = \frac{1}{16}[3S_{12} - 2(T_{1211} + T_{1112} + T_{1222} + T_{2212})][3S_{21} - 2(T_{2111} + T_{1121} + T_{2122} + T_{2221})] \quad (1.3.50)$$

Rešenja jednačine (1.3.49) predstavljaju energije kinematičkih nivoa:

$$E_{1,2}^{kin} = \frac{1}{2}(\tilde{\Delta}_{11}+\tilde{\Delta}_{22}) + \frac{2}{7}(u+v) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\tilde{\Delta}_{11}-\tilde{\Delta}_{22})^2 + \frac{2}{7}(\tilde{\Delta}_{11}-\tilde{\Delta}_{22})(u-v) + \frac{4}{49}[(u-v)^2 + 4w]} \quad (1.3.51)$$

Kao što se vidi, za tronivosku shemu postoje dva kinematička nivoa, tj. pored dva tipa eksitona postoje i dva tipa kinematičkih ekscitacija. Ovde su, radi poredjenja, takodje date i harmonijske eksitonske energije koje odgovaraju aproksimacijama (1.3.44) i (1.3.45)

$$E_{1,2}^{(0)} = \frac{1}{2}(\tilde{\Delta}_{11} + \tilde{\Delta}_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\tilde{\Delta}_{11} - \tilde{\Delta}_{22})^2 + S_{12}S_{21}} \quad (1.3.52)$$

Može se videti da eksitoni i kinematičke ekscitacije imaju energije istog reda veličine, a njihov uzajamni raspored na energetskoj skali zavisi od znaka i veličine matričnih elemenata S i T .

G L A V A 2.

2.1. NEODRŽANJE EKSITONA I HAMILTONIJAN ZA DVONIVOSKU SHEMU

U prvoj su glavi izložene osobine eksitonskog sistema. Konstatovano je da su, u opštem slučaju, operatori koji kreiraju i anihiliraju eksitone kvazi-Pauli operatori i da se u teorijskim analizama oni zamenjuju Bose operatorima sa različitim stepenom tačnosti. Takodje je ukazano i na činjenicu da, pored normalnih eksitona, u molekularnom kristalu mogu da se pojave i dopunske optičke ekscitacije koje se nazivaju kinematička pobudjenja. Spektar energija kinematičkih pobudjenja analiziran je i za dvonivosku shemu molekulskih pobudjenja i za multinivosku shemu. U svim pomenutim analizama nije uzeta u obzir činjenica da eksitonski hamiltonijan sadrži forme koje opisuju istovremene kreacije i anihilacije para eksitona. Ove su forme ispuštene iz računa.

Prisustvo forme sa parom kreacionih, odnosno anihilacionih, operatora u eksitonskom hamiltonijanu dovodi do toga da operator broja eksitona:

$$\hat{N} = \sum_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} \tag{2.1.1}$$

ne komutira sa hamiltonijanom sistema. Kvantnomehanički zakoni konzervacije neke veličine zahtevaju da ta veličina komutira sa hamiltonijanom sistema. Kako u slučaju eksitona $\hat{N}$ ne komutira sa $\hat{H}$, a to znači da se broj eksitona u sistemu ne održava. S druge strane, pokazano je da kinematički nivoi nastaju u procesima fuzije dva eksitona u jedan i odgovarajućeg raspada, a ovi procesi očigledno menjaju broj eksitona (od dva nastaje jedan i obrnuto). Intuitivno je jasno da se, ako su u račun uvedeni procesi simultanog kreiranja i anihiliranja parova eksitona, mogu tada dobiti rezultati sa bogatijom informacijom o kinematičkim nivoima, nego što je to slučaj kada su ovi članovi ispušteni.

Ovde je izvršena analiza kinematičkih nivoa uz uračunavanje efekta neodržanja eksitona. Radi uprošćenja računa posmatrajmo dvonivosku shemu molekulskih pobudjenja (postoji samo osnovno stanje sa indeksom o i pobudjeno stanje sa indeksom f). U tom slučaju eksitonski hamiltonijan ima oblik:

$$\hat{H} = \Delta \sum_{\vec{n}} P^{+}_{\vec{n}} P_{\vec{n}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} X(\vec{n}-\vec{m}) P^{+}(\vec{n}) P(\vec{m}) +$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} Y(\vec{n}-\vec{m}) [P^{+}(\vec{n}) P^{+}(\vec{m}) + P(\vec{m}) P(\vec{n})] +$$
$$+ \sum_{\vec{n}\vec{m}} Z(\vec{n}-\vec{m}) P^{+}(\vec{n}) P(\vec{n}) P^{+}(\vec{m}) P(\vec{m}) \qquad (2.1.2)$$

gde su uvedene oznake:

$$\Delta = E_f - E_o + \frac{1}{2}[F(ff00) + F(00ff)] - F(0000)$$

$$X(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{1}{2}[V_{\vec{n}\vec{m}}(f00f) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0ff0)]$$

$$Y(\vec{n}-\vec{m}) = V_{\vec{n}\vec{m}}(f0f0) = V_{\vec{n}\vec{m}}(0f0f)$$

$$Z(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{1}{2}[V_{\vec{n}\vec{m}}(ffff) + V_{\vec{n}\vec{m}}(0000) - V_{\vec{n}\vec{m}}(00ff) - V_{\vec{n}\vec{m}}(ff00)]$$

$$F(f_1 f_2 f_3 f_4) = \sum_{\vec{\ell}} V_{\vec{\ell}}(f_1 f_2 f_3 f_4); \qquad \vec{\ell} = \vec{n}-\vec{m} \qquad (2.1.3)$$

U formulama (2.1.3) E_f i E_o označavaju energije pobudjenog i osnovnog stanja elektrona u molekulu, dok su $V_{\vec{n}\vec{m}}(f_1 f_2 f_3 f_4)$ matrični elementi dipol-dipol interakcije. Pretpostavimo da su funkcije X, Y i Z realne i parne. Kao što je poznato, Δ iznosi oko 5 eV, dok su X, Y i Z 10 do 100 puta manje. Operatori P su Pauli-operatori i zadovoljavaju kao što je od ranije poznato sledeće komutacione relacije:

$$[P(\vec{n}), P^{+}(\vec{m})] = \left(1 - 2P^{+}(\vec{n}) P(\vec{m})\right) \delta_{\vec{n}\vec{m}}$$

$$P^2(\vec{n}) = P^{+2}(\vec{n}) = 0$$

$$[P(\vec{n}), P(\vec{m})] = [P^{+}(\vec{n}), P^{+}(\vec{m})] = 0 \qquad (2.1.4)$$

Član koji je proporcionalan Y u hamiltonijanu (2.1.2) dovodi do neodržanja eksitona. U svim analizama iz prve glave taj član je ispušten iz računa. U daljim se analizama ispituje na koji način prisustvo ovog člana utiče na stvaranje i osobine kinematičkih nivoa.

2.2. SISTEM JEDNAČINA ZA GREENOVE FUNKCIJE SISTEMA

Normalni i kinematički eksitonski nivoi analiziraju se pomoću Greenove funkcije:

$$\Gamma(\vec{f}-\vec{g};t) = \langle\langle P^+(\vec{f},t)|P(\vec{g},0)\rangle\rangle \qquad (2.2.1)$$

Sa $\vec{f}$ i $\vec{g}$ ovde su označeni vektori čvorova rešetki. Korišćenjem formule opšte teorije dvovremenskih Greenovih funkcija, za funkciju Γ može se napisati sledeća jednačina:

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{d}{dt}\Gamma(\vec{f}-\vec{g};t) - \Delta\Gamma(\vec{f}-\vec{g};t) - \sum_{\vec{m}}[X(\vec{f}-\vec{m})\Gamma(\vec{m}-\vec{g};t) + \\
&+ Y(\vec{f}-\vec{m})\Lambda(\vec{m}-\vec{g};t)] = i\hbar\delta_{\vec{f}\vec{g}}[1-2\langle P^+(\vec{f},0)P(\vec{f},0)\rangle] - \\
&- 2\sum_{\vec{m}}[X(\vec{f}-\vec{m})\langle\langle P^+(\vec{f},t)P(\vec{f},t)P(\vec{m},t)|P(\vec{g},0)\rangle\rangle + \\
&+ Y(\vec{f}-\vec{m})\langle\langle P^+(\vec{m},t)P^+(\vec{f},t)P(\vec{f},t)|P^+(\vec{g},0)\rangle\rangle - \\
&- Z(\vec{f}-\vec{m})\langle\langle P^+(\vec{m},t)P(\vec{m},t)P(\vec{f},t)|P(\vec{g},0)\rangle\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{d}{dt}\Lambda(\vec{f}-\vec{g};t) + \Delta\Lambda(\vec{f}-\vec{g};t) + \sum_{\vec{m}}[X(\vec{f}-\vec{m})\Lambda(\vec{m}-\vec{g};t) + \\
&+ Y(\vec{f}-\vec{m})\Gamma(\vec{m}-\vec{g};t)] = 2\sum_{\vec{m}}[X(\vec{f}-\vec{m})\langle\langle P^+(\vec{m},t)P^+(\vec{f},t)P(\vec{f},t)|P^+(\vec{g},0)\rangle\rangle + \\
&+ Y(\vec{f}-\vec{m})\langle\langle P^+(\vec{f},t)P(\vec{f},t)P(\vec{m},t)|P^+(\vec{g},0)\rangle\rangle - \\
&- Z(\vec{f}-\vec{m})\langle\langle P^+(\vec{f},t)P^+(\vec{m},t)P(\vec{m},t)|P^+(\vec{g},0)\rangle\rangle]
\end{aligned}$$

$$\Lambda(\vec{f}-\vec{g};t) = \langle\langle P^+(\vec{f},t)|P^+(\vec{g},0)\rangle\rangle \qquad (2.2.2)$$

Bitan element za dalju analizu predstavlja način dekuplovanja viših paulionskih Greenovih funkcija koje figurišu u jednačini (2.2.2). Da bi se dobili kinematički nivoi potrebno je da se Pauli operatori u (2.2.2) zamene Bose operatorima prema približnim formulama:

$$P = B - B^+BB; \qquad P^+ = B^+ - B^+B^+B \qquad (2.2.3)$$

Posle zamene (2.2.3) u (2.2.2) umesto paulionskih, dobijaju se bozonske Greenove funkcije, a dekuplovanje se vrši tako što se uz striktnu primenu Vikove teoreme sparuju i operatori koji deluju u istom trenutku vremena i operatori koji deluju u različitim vremenskim trenucima. U skladu sa ovim, dekuplovanje viših paulionskih Greenovih funkcija vrši se po sledećoj opštoj shemi:

$$\begin{aligned}
&\langle\langle P^+_a P_b P_c | P^+_d \rangle\rangle = \langle\langle B^+_a B_b B_c | B^+_d \rangle\rangle - \\
&- \langle\langle B^+_a B_b B_c | B^+_d B^+_d B_d \rangle\rangle = N_{ba} G_{cd} + N_{ca} G_{bd} + \tilde{M}_{cb} \tilde{T}_{ad} - \\
&- 2(G_{bd} G_{cd} \tilde{G}_{ad} + G_{bd} T_{ad} \tilde{T}_{cd} + G_{cd} T_{ad} \tilde{T}_{bd})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\langle\langle P^+_a P^+_b P_c | P^+_d \rangle\rangle = \langle\langle B^+_a B^+_b B_c | B^+_d \rangle\rangle - \\
&- \langle\langle B^+_a B^+_b B_c | B^+_d B^+_d B_d \rangle\rangle = M_{ba} G_{cd} + N_{ca} T_{bd} + N_{cb} T_{ad} - \\
&- 2(T_{ad} T_{bd} \tilde{T}_{cd} + T_{bd} G_{cd} \tilde{G}_{ad} + T_{ad} G_{cd} \tilde{G}_{bd})
\end{aligned}$$

$$G_{ab} \equiv G(\vec{a}-\vec{b};t) \equiv \langle\langle B(\vec{a},t) | B^+(\vec{b},0) \rangle\rangle$$

$$\tilde{G}_{ab} \equiv G(\vec{a}-\vec{b};t) \equiv \langle\langle B^+(\vec{a},t) | B^+(\vec{b},0) \rangle\rangle$$

$$T_{ab} \equiv T(\vec{a}-\vec{b};t) \equiv \langle\langle B^+(\vec{a},t) | B^+(\vec{b},0) \rangle\rangle$$

$$\tilde{T}_{ab} \equiv T(\vec{a}-\vec{b};t) \equiv \langle\langle B(\vec{a},t) | B(\vec{b},0) \rangle\rangle$$

$$N_{ab} \equiv N(\vec{a}-\vec{b}) \equiv \langle B^+(\vec{b},t) B(\vec{a},t) \rangle$$

$$M_{ab} \equiv M(\vec{a}-\vec{b}) \equiv \langle B^+(\vec{b},t) B^+(\vec{a},t) \rangle$$

$$\tilde{M}_{ab} \equiv \tilde{M}(\vec{a}-\vec{b}) \equiv \langle B(\vec{b},t) B(\vec{a},t) \rangle$$

$$N_{aa} \equiv N; \quad M_{aa} \equiv M; \quad \tilde{M}_{aa} \equiv \tilde{M} \tag{2.2.4}$$

Napomenimo posebno, da su u datoj opštoj shemi zanemareni svi članovi koji su proporcionalni kvadratu koncentracije eksitona. S obzirom da je korišćena aproksimativna formula (2.2.3), iz računa su ispali svi oni članovi koji sadrže produkte sa više od tri bozonske Greenove funkcije. Posle zamene (2.2.4) u (2.2.2) i Fourier transformacija tipa:

$$F(\vec{n}-\vec{m};t) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \; F(\vec{k},\omega) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m}) - i\omega t} \tag{2.2.5}$$

gde je N broj molekula u kristalu, dobija se sledeća jednačina za Greenovu funkciju $\Gamma(\vec{k},\omega)$:

$$[\hbar\omega - W(\vec{k})]\Gamma(\vec{k},\omega) - Y(\vec{k})\Lambda(\vec{k},\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi}(1 - 2N) -$$
$$- u_1(\vec{k})G(\vec{k},\omega) - u_2(\vec{k})T(\vec{k},\omega) + u_3(\vec{k},\omega)$$

$$Y(\vec{k})\Gamma(\vec{k},\omega) + [\hbar\omega + W(\vec{k})]\Lambda(\vec{k},\omega) =$$
$$= v_1(\vec{k})G(\vec{k},\omega) + v_2(\vec{k})T(\vec{k},\omega) - v_3(\vec{k},\omega) \qquad (2.2.6)$$

Oznake upotrebljene u jednačini (2.2.6) su sledeće:

$$W(\vec{k}) = \Lambda + X(\vec{k}) \; ; \quad \langle P^{+}(\vec{f},0)P(\vec{f},0)\rangle \approx N$$

$$u_1(\vec{k}) = \frac{2}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{[X(\vec{k}) + X(\vec{q}) - Z(\vec{k}-\vec{q})]N(\vec{q}) + Y(\vec{q})M(\vec{q})\right\}$$

$$u_2(\vec{k}) = \frac{2}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{[Y(\vec{k}) + Y(\vec{q})]N(\vec{q}) + [X(\vec{q}) - Z(\vec{k}-\vec{q})]\tilde{M}(\vec{q})\right\}$$

$$v_1(\vec{k}) = \frac{2}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{[Y(\vec{k}) + Y(\vec{q})]N(\vec{q}) + [X(\vec{q}) - Z(\vec{k}-\vec{q})]M(\vec{q})\right\}$$

$$v_2(\vec{k}) = \frac{2}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{[X(\vec{k}) + X(\vec{q}) - Z(0) - Z(\vec{k}-\vec{q})]N(\vec{q}) + Y(\vec{q})\tilde{M}(\vec{q})\right\}$$

$$u_3(\vec{k},\omega) = \frac{4}{N^2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 \left\{[X(\vec{q}_1) - Z(\vec{k}-\vec{q}_1)]G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}(\vec{q}_2,-\omega_2)G(\vec{q}_3,\omega_3) +\right.$$
$$+ [X(\vec{q}_1) + X(\vec{q}_2) - Z(\vec{k}-\vec{q}_1) - Z(\vec{k}+\vec{q}_2)]G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3) +$$
$$+ [Y(\vec{q}_2) + Y(\vec{q}_3)]G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_2) +$$
$$\left. + \; Y(\vec{q}_1)T(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3)\right\}$$

$$v_3(\vec{k},\omega) = \frac{4}{N^2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 \left\{Y(\vec{q}_1)G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}(\vec{q}_2,-\omega_2)G(\vec{q}_3,\omega_3) +\right.$$
$$+ [X(\vec{q}_2) + X(\vec{q}_3) - Z(\vec{k}+\vec{q}_2) + Z(\vec{q}_1-\vec{q}_2)]G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3) +$$
$$+ [Y(\vec{q}_1) + Y(\vec{q}_2)]G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3) +$$
$$\left. + [X(\vec{q}_1) - Z(\vec{k}-\vec{q}_1)]T(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3)\right\}$$

$$\vec{q}_3 = \vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2 \; ; \qquad \omega_3 = \omega - \omega_1 + \omega_2 \qquad (2.2.7)$$

Tokom daljeg računa funkcije u i v izražavaju se u harmonijskoj aproksimaciji koja odgovara zameni $P^{+} = B^{+}$ i $P = B$ u hamiltonijanu (2.2.2) uz odbacivanje člana proprocionalnog Z. U ovoj se aproksimaciji dobijaju sledeći rezultati:

$$G^{(0)}(\vec{k},\omega) = \frac{i}{2\pi}\left\{\frac{1}{2}\left[1+\frac{\Omega_W(\vec{k})}{\Omega(\vec{k})}\right]\frac{1}{\omega-\Omega(\vec{k})} + \frac{1}{2}\left[1-\frac{\Omega_W(\vec{k})}{\Omega(\vec{k})}\right]\frac{1}{\omega+\Omega(\vec{k})}\right\}$$

$$\tilde{G}^{(0)}(\vec{k},\omega) = G^{(0)}(\vec{k},-\omega)$$

$$T^{(0)}(\vec{k},\omega) = \tilde{T}^{(0)}(\vec{k},\omega) = -\frac{i}{2\pi}\frac{\Omega_Y(\vec{k})}{2\Omega(\vec{k})}\left[\frac{1}{\omega-\Omega(\vec{k})} - \frac{1}{\omega+\Omega(\vec{k})}\right]$$

$$N^{(0)}(\vec{k}) = \frac{1}{2}\left[\frac{\Omega_W(\vec{k})}{\Omega(\vec{k})}\, cth\,\frac{\hbar\Omega(\vec{k})}{2k_BT} - 1\right]$$

$$M^{(0)}(\vec{k}) \equiv \tilde{M}^{(0)}(\vec{k}) = -\frac{\Omega_Y(\vec{k})}{2\Omega(\vec{k})}\, cth\,\frac{\hbar\Omega(\vec{k})}{2k_BT}$$

$$N^{(0)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} N^{(0)}(\vec{k}); \qquad M^{(0)} = \tilde{M}^{(0)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} M^{(0)}(\vec{k})$$

$$\Omega_R(\vec{k}) = \hbar^{-1}R(\vec{k}); \qquad R \in (X,\ Y,\ Z,\ W)$$

$$\Omega(\vec{k}) = \hbar^{-1}\sqrt{W^2(\vec{k}) - Y^2(\vec{k})} \tag{2.2.8}$$

Kako je za sve realne temperature $\hbar\Omega(\vec{k}) \gg 2k_BT$, može se uzeti da je $cth(\hbar\Omega(\vec{k})/2k_BT) \approx 1$. Ograničenje uvodi i aproksimacija linearna po odnosu izmedju širine eksitonske zone i energije molekulskih pobudjenja, tj. : $(X/\Delta)^2 \approx (Y/\Delta)^2 \approx (Z/\Delta)^2 \approx 0$. Primenom pomenutih aproksimacija formule (2.2.8) prelaze u uprošćene izraze:

$$G^{(0)}(\vec{k},\omega) = \frac{i}{2\pi}\frac{1}{\omega-\Omega(\vec{k})}; \qquad \tilde{G}^{(0)}(\vec{k},\omega) = G^{(0)}(\vec{k},-\omega)$$

$$T^{(0)}(\vec{k},\omega) = \tilde{T}^{(0)}(\vec{k},\omega) = -\frac{\Omega_Y(\vec{k})}{2\Omega(\vec{k})}[G^{(0)}(\vec{k},\omega) + \tilde{G}^{(0)}(\vec{k},\omega)]$$

$$N^{(0)}(\vec{k}) = N^{(0)} = M^{(0)} = \tilde{M}^{(0)} = 0$$

$$M^{(0)}(\vec{k}) = \tilde{M}^{(0)}(\vec{k}) = -\frac{\Omega_Y(\vec{k})}{2\Omega(\vec{k})} \tag{2.2.9}$$

U skladu sa shemom (2.2.4) funkcije Γ i Λ izražavaju se preko bozonskih funkcija na sledeći način:

$$\Gamma(\vec{k},\omega) = (1-4N)G(\vec{k},\omega) - \tilde{M}\Gamma(\vec{k},\omega) - M\tilde{T}(\vec{k},\omega) +$$

$$+ \frac{2}{N^2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 [G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}(\vec{q}_2,-\omega_2)G(\vec{q}_3,\omega_3) +$$

$$+ 2G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3)]$$

$$\Lambda(\vec{k},\omega) = (1-4N)T(\vec{k},\omega) - \tilde{M}G(\vec{k},\omega) - M\tilde{G}(\vec{k},\omega) +$$

$$+ \frac{2}{N^2}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 [T(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3) +$$

$$+ 2G(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}(\vec{q}_2,-\omega_2)T(\vec{q}_3,\omega_3)]$$

$$\tilde{\Gamma}(\vec{k},\omega) = \Gamma(\vec{k},-\omega)\ ; \qquad \tilde{\Lambda}(\vec{k},\omega) = \Lambda(\vec{k},-\omega)$$

$$\vec{q}_3 = \vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2\ ; \qquad \omega_3 = \omega - \omega_1 + \omega_2 \tag{2.2.10}$$

Kombinovanjem (2.2.6), (2.2.9) i (2.2.10) dolazi se do izraza za bozonske Greenove funkcije:

$$G(\vec{k},\omega) = \frac{i}{2\pi}\frac{\omega + \Omega_1(\vec{k})}{[\omega^2 - \Omega_B^2(\vec{k})][1 - \chi(\vec{k},\omega)]}$$

$$T(\vec{k},\omega) = -\frac{i}{2\pi}\frac{\Omega_2(\vec{k})}{[\omega^2 - \Omega_B^2(\vec{k})][1 - \sigma(\vec{k},\omega)]} \tag{2.2.11}$$

gde su upotrebljene sledeće oznake:

$$\Omega_B^2(\vec{k}) = \Omega_1^2(\vec{k}) - \Omega_2^2(\vec{k});\quad \Omega_1(\vec{k}) = \Omega_w(\vec{k}) + \frac{1}{\hbar N}\sum_{\vec{q}}\frac{\Omega_y^2(\vec{q})}{\Omega_\Delta}$$

$$\Omega_2(\vec{k}) = \Omega_y(\vec{k}) + \frac{1}{\hbar N}\sum_{\vec{q}}\frac{[\Omega_x(\vec{q}) - \Omega_z(\vec{q})]\Omega_y(\vec{q})}{\Omega_\Delta}$$

$$\chi(\vec{k},\omega) = \frac{2\pi}{i\hbar}\Big\{u_3^{(0)}(\vec{k},\omega) - \frac{\Omega_2(\vec{k})}{\omega + \Omega_1(\vec{k})}v_3^{(0)}(\vec{k},\omega) - \hbar u_4^{(0)}(\vec{k},\omega)[\omega - \Omega_w(\vec{k}) +$$

$$+ \frac{\Omega_2(\vec{k})\Omega_y(\vec{k})}{\omega + \Omega_1(\vec{k})}] + \hbar v_4^{(0)}(\vec{k},\omega)[\Omega_y(\vec{k}) - \frac{\Omega_2(\vec{k})(\omega + \Omega_w(\vec{k}))}{\omega + \Omega_1(\vec{k})}]\Big\}$$

$$\sigma(\vec{k},\omega) = \frac{2\pi}{i\hbar}\Big\{u_3^{(0)}(\vec{k},\omega) + \frac{\omega - \Omega_1(\vec{k})}{\Omega_2(\vec{k})}v_3^{(0)}(\vec{k},\omega) - \hbar u_4^{(0)}(\vec{k},\omega)[\omega - \Omega_w(\vec{k}) -$$

$$- \frac{\Omega_y(\vec{k})(\omega + \Omega_1(\vec{k}))}{\Omega_2(\vec{k})}] + \hbar v_4^{(0)}(\vec{k},\omega)[\Omega_4(\vec{k}) - \frac{(\omega - \Omega_1(\vec{k}))(\omega + \Omega_w(\vec{k}))}{\Omega_2(\vec{k})}]\Big\}$$

$$u_4^{(0)}(\vec{k},\omega) = \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 [G^{(0)}(\vec{q}_1,\omega_1) G^{(0)}(\vec{q}_2,-\omega_2) G^{(0)}(\vec{q}_3,\omega_3) +$$

$$+ 2G^{(0)}(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{T}^{(0)}(\vec{q}_2,-\omega_2)T^{(0)}(\vec{q}_3,\omega_3)]$$

$$v_4^{(0)}(\vec{k},\omega) = \frac{2}{N^2} \sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 [T^{(0)}(\vec{q}_1,\omega_1) \tilde{T}^{(0)}(\vec{q}_2,-\omega_2) T^{(0)}(\vec{q}_3,\omega_3) +$$

$$+ 2G^{(0)}(\vec{q}_1,\omega_1)\tilde{G}^{(0)}(\vec{q}_2,-\omega_2)T^{(0)}(\vec{q}_3,\omega_3)] \qquad (2.2.12)$$

Na kraju treba naglasiti da se avansovane funkcije $\tilde{G}$ i $\tilde{T}$ dobijaju iz retardovanih funkcija G i T prelazom $\omega \to -\omega$, tj. :

$$\tilde{G}(\vec{k},\omega) = G(\vec{k},-\omega) \; ; \qquad \tilde{T}(\vec{k},\omega) = T(\vec{k},-\omega) \qquad (2.2.13)$$

Formule (2.2.11) i (2.2.12) mogu da posluže pri odredjivanju energija normalnih eksitonskih nivoa kao i za odredjivanje energija kinematičkih nivoa. Struktura pomenutih formula ukazuje da fizički realne polove daju kako retardovane, tako i avansovane Greenove funkcije. U slučajevima kada neodržanje eksitona nije uzeto u obzir, polovi avansovanih funkcija daju nefizička rešenja, tj. energije eksitona sa negativnim znakom. Zaključak o povećanju broja polova koji imaju fizički smisao isključuje posledice neodržanja eksitona. Treba takodje naglasiti da, što se tiče normalnih eksitonskih energija, retardovane i avansovane funkcije daju iste rezultate. Što se tiče kinematičkih nivoa, svaka od četiri funkcije (dve retardovane i dve avansovane) daje polove koji su medjusobno različiti.

2.3. KINEMATIČKI NIVOI. PROCENA VREMENA ŽIVOTA I ŠIRENJE LINIJA

Iz jednačine (2.2.11) se vidi da je uslov za nalaženje normalnih eksitonskih energija sledeći:

$$\omega^2 \Omega_B^2(\vec{k}) = 0 \qquad (2.3.1)$$

Ovaj uslov sledi iz sve četiri funkcije G, $\tilde{G}$, T i $\tilde{T}$ i daje samo jednu energiju koja ima fizičkog smisla, a to je:

$$E = \hbar\Omega_B(\vec{k}) \qquad (2.3.2)$$

Kao što je ranije rečeno, funkcije G, $\tilde{G}$, T i $\tilde{T}$ daju četiri tipa kinematičkih nivoa. Uslovi za odredjivanje energija kinematičkih nivoa su:

$$1 - \chi(\vec{k},\omega) = 0 \; ; \qquad 1 - \sigma(\vec{k},\omega) = 0$$
$$1 - \chi(\vec{k},-\omega) = 0 \; ; \qquad 1 - \sigma(\vec{k},-\omega) = 0 \qquad (2.3.3)$$

Treba naglasiti da uslovi (2.3.3) dovode do veoma komplikovanih, višestruko singularnih integrala po impulsima, tako da njihovo rešavanje prelazi okvire koji se postižu primenom elektronskih računara. Kako je cilj ovog rada da se dobiju izvesni kvalitativni podaci o kinematičkim nivoima, prilikom njihovog proračuna koristi se aproksimacija $\vec{k} \to 0$, što znači da dobijeni rezultati važe za ekstremno male talasne vektore. Sem pomenute, koristi se i aproksimacija malih talasnih vektora najbližih suseda za prostu kubnu strukturu. Uzima se takodje da je $\omega + \Omega_\Delta \simeq 2\Omega_\Delta$, što sa svoje strane znači da se analizira ponašanje kinematičkih nivoa u blizini frekvencije kojom se pobudjuju eksitoni. Na kraju treba naglasiti da se realni delovi funkcija χ i σ pri $\vec{k} \to 0$ mogu egzaktno izračunati, ali da to dovodi do veoma komplikovanih transcedentnih jednačina za odredjivanje energija. Ovi su delovi, zbog toga, izračunati uz potpuno zanemarivanje disperzije (svi matrični elementi koji su funkcije talasnih vektora zamenjeni su iz svojih kvadratnih srednjih vrednosti po zoni). Uz sve navedene aproksimacije, frekvencije kinematičkih nivoa date su sledećim izrazima:

$$\omega(G) = \Omega_\Lambda + \Omega_x(0)\left[1 + 2\,\frac{\Omega_y^2(0)}{\Omega_x^2(0)}\right] - i\,\frac{|\Omega_x(0)|}{Q_o}$$

$$\omega(\tilde{G}) = \Omega_\Lambda + \frac{\Omega_y^2(0)}{6\Omega_\Lambda} - i\,\frac{|\Omega_x(0)|}{Q_o}\,\frac{\Omega_y^2(0)}{6\Omega_\Lambda^2}$$

$$\omega(T) = \Omega_\Delta + \Omega_z(0) - i\,\frac{|\Omega_x(0)|}{4Q_o}$$

$$\omega(\tilde{T}) = \frac{1}{3}\,\Omega_\Lambda - i\,\frac{|\Omega_x(0)|}{6Q_o}$$

$$Q_o = \frac{Q^4}{32\pi^3} \qquad (2.3.4)$$

S obzirom na sve učinjene aproksimacije, dobijen rezultat može da posluži samo kao gruba procena ponašanja kinematičkih nivoa. Ipak, ono što je u ovoj proceni nedvosmisleno, jeste činjenica da efekti neodržanja dovode do stvaranja većeg broja kinematičkih nivoa, nego što ih ima kada neodržanje nije prisutno. Ovde konkretno, jednom normalnom eksitonskom nivou odgovaraju četiri različita tipa kinematičkih pobudjenja. Takodje treba ukazati na činjenicu da svi kinematički nivoi imaju konačno vreme života. Najduže vreme života imaju kinematički nivoi koji odgovaraju avansovanoj Greenovoj funkciji $\tilde{G}$. Interesantno je ukazati i na činjenicu da se procesima dve sukcesivne eksitonske fuzije (pol funkcije $\tilde{T}$) stvaraju niskoenergetski kvanti pobudjenja (realni deo frekvencije $\omega(\tilde{T})$ ima oko tri puta manju vrednost od frekvencije normalnih eksitona).

Može se, konačno, izvršiti procena vremena života kinematičkih pobudjenja, odnosno njihove širine linija. Za $\Omega_\Delta = 8 \times 10^{15}$ Hz i $\Omega_x(0) \approx \Omega_y(0) \approx \Omega_z(0) = 10^{14}$ Hz dobijaju se sledeće vrednosti za vreme života Φ i širine linija L :

$$\Phi(G) = 2.3 \times 10^{-15}\ \mathrm{s}\ ;\quad L(G) = 2250 \times 10^{2}\ \mathrm{m}^{-1}$$

$$\Phi(T) = 9.2 \times 10^{-15}\ \mathrm{s}\ ;\quad L(T) = 560 \times 10^{2}\ \mathrm{m}^{-1}$$

$$\Phi(\tilde{G}) = 8.8 \times 10^{-11}\ \mathrm{s}\ ;\quad L(\tilde{G}) = 1\ \mathrm{m}^{-1}$$

$$\Phi(\tilde{T}) = 1.4 \times 10^{-14}\ \mathrm{s}\ ;\quad L(\tilde{T}) = 375 \times 10^{2}\ \mathrm{m}^{-1} \qquad (2.3.5)$$

S obzirom na nadjene vrednosti za širine linija, nije isključeno da anomalno velika širenja linija koja se u eksperimentu dobijaju odgovaraju u stvari kinematičkim pobudjenjima, a ne normalnim eksitonima.

Z A K L J U Č A K

Analize izvršene u ovom radu ukazuju na činjenicu da efekt neodržanja eksitona ima veoma značajnu ulogu u teoriji kinematičkih nivoa. Ako se uporede rezultati dobijeni bez uračunavanja efekta neodržanja sa rezultatima ovde dobijenim, tada se vidi da, zbog neodržanja eksitona, u dvonivoskoj shemi nastaju četiri tipa kinematičkih eksitacija. U slučajevima kada efekti neodržanja nisu uzeti u obzir, za dvonivosku eksitonsku shemu dobija se samo jedan tip kinematičkih pobudjenja. Značaj efekata neodržanja pri stvaranju kinematičkih pobudjenja intuitivno je bio jasan *a priori*, budući da kinematički nivoi svoj nastanak duguju procesima fuzije i raspada eksitona. Izvedeni računi i dobijeni rezultati samo potvrdjuju prethodno intuitivno izvedenu pretpostavku.

Svi kinematički nivoi imaju konačno vreme života kojem odgovara širenje eksitonskih linija koje je reda 10^5 m^{-1}. Ovaj se zaključak izvanredno dobro uklapa u eksperimentalne rezultate, koji pokazuju abnormalno širenje linija u optičkom delu spektra molekularnih kristala, pa postoje razlozi za verovanje da su za ovo širenje linija odgovorna kinematička pobudjenja.

Rezultati do kojih se došlo, predstavljaju samo grubu procenu, jer je stroži račun neizvodljiv s obzirom na pojavu višestruko singularnih integrala u uslovima za odredjivanje energije kinematičkih nivoa. Ovaj se problem, nažalost, danas ne može rešiti ni primenom elektronskih računara, pa otuda, dok pomenuti problem ne bude rešen, svi računi u vezi sa kinematičkim nivoima otaju u granicama više ili manje grubih procena.

L I T E R A T U R A

1. B.S. Tošić : Statistička fizika,

2. V.M. Agranovič : Theory of Excitons, NAUKA, Moscow 1968 (in Russian); pp. 159-171 pp. 136-145

3. A.S. Davydov : Theory of Molecular Excitons, NAUKA, Moscow 1968. (in Russian) pp. 111-112

4. D. Hadžiahmetović, M. Pirić and B.S. Tošić : *Phys. Stat. Sol.*, 83, 479 (1977)

5. V.M. Agranovič : *Zh. eksper. teor. Fiz.*, 37, 430 (1959)

6. S.V. Tyablikov : Methods of Quantum Theory in Magnetism, NAUKA, Moscow 1975 (in Russian) pp. 216-228

7. V.M. Agranovič, B.S. Tošič : *Zh. eksper. teor. Fiz.*, 53, 149 (1967)

8. M. Pirić, M.M. Marinković and B.S. Tošić : *Physica NHPC*, 90A, 597 (1978)

9. R. Maksimović, M.J. Škrinjar and B.S. Tošić : *Physica NHPC*, 97A, 163 (1978)

10. D.V. Kapor, S.D. Stojanović, M.J. Škrinjar and B.S. Tošić : *Phys. Stat. Sol.*, 74, 103 (1976)