1D Holsteinov polaron s harmoničkom i anharmoničkom rešetkom

O. S. Barišić i I. Batistić
Institut za fiziku, Zagreb

Model Holsteinovog polarona istraživan je raznim varijacionim i numeričkim metodama. Ovdje ćemo predstaviti rezultate numeričke metode koja omogućuje proračun energije i valne funkcije osnovnog stanja sistema za proizvoljni valni vektor, efektivnu masu polarona, razne spektralne funkcije (npr. optičku vodljivost), te omogućuje proširenje modela na situacije kao što je međudjelovanje elektrona s anharmoničkom rešetkom.

Numerička metoda, s kojoj smo računali valnu funkciju osnovnog stanja i pridružene fizikalne veličine, kombinacija je tzv. Lanczosove metode i metode inverzne iteracije. Osim uspoređivanja s metodama drugih autora, npr. [1], [2], gdje se ona pokazala vrlo uspješnom, bili smo u stanju, konzultirajući naše razne varijacione pristupe, proučiti polarone i u području parametarskog prostora koje adresira adijabatska aproksimacija, vrlo često korištena u sličnim, odnosno složenijim modelima. U spometom području parametarskog prostora, zbog velikog broja fononski stanja koje treba uključiti u polaronsku valnu funkciju, slične metode do sada nisu korištene. Unutar varijacionog pristupa razmatrali smo i karakter prvog pobuđenog stanja.

Efektivna masa je računata iz inverza druge derivacije energije po valnom vektoru koji odgovara težini Drude vrha u spektralnoj funkciji optičke vodljivosti. U području slabe veze, polaron je kvazičestica kojom dominira njezin elektronski karakter. Porastom vrijednosti elektron-rešetka vezanja efektivna masa naglo raste što kasnije dovodi do potpune prostorne lokalizacije polaronske valne funkcije. Ovaj prijalaz događa se međutim kontinuirano.

Za proračun optičke vodljivosti koristili smo tzv. metodu "polinomske aproksimacije jezgre", (KPM), [3]. Rezultati pokazuju postojanje Drude vrha na nultoj frekvenciji, te širokog spektra pobuđenih nekoherentnih stanja za područje energija iznad osnovne frekvencije rešetke.

Ovi rezultati su nađeni kako za harmoničku tako i za anharmoničku rešetku, te je napravljena njihova usporedba.

[1] D. Feinberg, S. Ciuchi, and F. de Pasquale: Int. J. Mod. Phys. B, **4**, 1395 (1990).

[2] G. Wellein and H. Fehske: Phys. Rev. B **56**, 4513 (1997).

[3] R.N. Silver, H. Roeder, A.F. Voter, and J. D. Kress: J. Comp. Phys. **124**, 115 (1996).