Sadržaj

1 Uvod

1.1 Polaroni

Problem polarona početno se vezao uz opis sporog vodljivog elektrona (ili šupljine) unutar polarne kristalne rešetke. Njegovo prisustvo polarizira okolnu rešetku, odnosno dovodi do prostornih pomaka iona unutar molekula asociranih njezinim čvorovima. Svi ti pomaci zajedno pridruženi su prostornoj deformaciji rešetke, a dipoli polarizaciji. Polarizacija onda povratno (privlačno) djeluje na elektron i smanjuje njegovu energiju, te je elektron, gibajući se kroz kristal, vuče za sobom. Takav se elektron i pridruženo mu samosuglasno polarizacijsko polje može tretirati kao kvazi-čestica, i tu kvazi-česticu onda zovemo polaron.

Koncept polarona uveo je Pekar [1]. No, sam problem polarona dio je klasične fizike čvrstog stanja, i pojavio se prvi puta 1933, kada je Landau [2] iznio ideju samouhvata elektrona u NaCl kristalu, u pokušaju da objasni F centre. Od tada pa do današnjih dana, pojam polarona proširen je na elektrone vezane za nepolarne kristalne rešetke, te još mnoge druge fizikalne sisteme. Do sada su napravljena mnoga teoretska i eksperimentalna iztraživanja na temu polarona, kako bi se objasnila svojstva vodljivosti, optički efekti, itd, unutar raznih materijala. Polaronima se tumači i pojava supravodljivosti, difuzija lakih intersticijskih atoma unutar metala, topljenje električno nabijenih čestica u tekućinama [3], itd.

1.2 Fröhlichov model i molekularno-kristalni model, koncept velikog i malog polarona

Protezanje polarona mjeri se protezanjem deformacije rešetke koja mu je pridružena. Kada ona znatno prelazi veličinu konstante rešetke govorimo o velikom polaronu. Tada se obično kristalna rešetka aproksimira dielektričnim kontinuumom, čija su svojstva dana makroskopskom frekventno-ovisnom dielektričnom konstantom. U suprotnom slučaju, kada se diskretnost kristalne rešetke ne zanemaruje, ili se ne smije zanemariti (efektivno prosezanje polarona reda je veličine konstante rešetke), govorimo o malom polaronu.

U oba slučaja, teorijsko tretiranje problema počinje od definiranja hamiltonijana, čiji je opći oblik dan s

$$H = H_{el} + H_{fn} + H_{int} \ ,$$

gdje je H_{el} njegova elektronska komponenta koja sadrži kinetičku energiju elektrona i njegovu potencijalnu energiju u periodičnoj rešetki, H_{fn} je suma kinetičke i potencijalne energije atoma rešetke, dok H_{int} opisuje elektron-rešetka međudjelovanje u funkciji položaja elektrona i odstupanja (deformacije) rešetke iz svog ravnotežnog položaja u odsustvu elektrona. Međusobno međudjelovanje elektrona (polarona) se u principu izostavlja, a za H_{int} se gotovo uvijek pretpostavlja linearna ovisnost o deformaciji rešetke.

Hamiltonijan koji se odnosi na velike polarone prvi je izveo Fröhlich [4], dok se male polarone često promatra preko Holsteinovog hamiltonijana [5], koji je pridružen molekularno-kristalnom modelu (MCM-u). Ovaj drugi predmet je ovog rada, i ukratko ćemo ga opisati u slijedećem poglavlju.

2 Holsteinov hamiltonijan

2.1 Uvod

Holsteinov hamiltonijan, odnosno MCM, opisuje elektron u jednodimenzionalnoj kristalnoj rešetki, koji kratkodosežnim silama međudjeluje s optičkim fononima. Takav teoretski model može odgovarati gibanju fotopobuđenog nosioca naboja u jako dimeriziranim rešetkama, kao što su to npr. polimeri[1], ili možda zbivanjima u visokotemperaturnim supravodičima, gdje je polaronska masa 8 do 25 elektronskih masa, ovisno o materijalima koji su proučavani [6].

Svojom jednostavnošću model omogućuje dobru matematičku analizu polaronskog problema. Njegovo poopćenje na neke komplicirani je slučajeve kratkodosežnog elektron-rešetka međudjelovanja od one koju sam opisuje, ne donosi ništa kvalitativno novoga. Utjecaj pak višedimenzionalnosti rešetke na polarone predmet je mnogih proučavanja [7], no ona nisu posebno tretirana u ovom radu. Činjenica da model ne uključuje dugodosežne sile u elektron-fonon međudjelovanju, adresira ga u njegovom višedimenzionalnom obliku na metalne sisteme u kojima je dugodosežno Coulombovo međudjelovanje odsutno, odnosno dobro zasjenjeno. Fizikalni sistemi u kojima elektron-fonon međudjelovanje ima dugi doseg iskaču iz tog okvira.

2.2 Holsteinov hamiltonijan

Holsteinov hamiltonijan[2] sadrži tri različita doprinosa[3]

$$\begin{aligned} H &= H_{el} + H_{fn} + H_{int} \\ &= -J \sum_n c_n^\dagger \, (c_{n+1} + c_{n-1}) + \omega \sum_n (b_n^\dagger b_n + 1/2) + \lambda \sum c_n^\dagger c_n \, (b_n^\dagger + b_n) \, . \end{aligned} \tag{1}$$

Elektronski dio hamiltonijana dan je u aproksimaciji čvrste veze i prvih susjeda. $c_n^\dagger, c_n,$ su fermionski operatori stvaranja, odnosno poništavanja elektrona u stanju lokaliziranom na čvoru n. J je integral preklopa između susjednih stanja, i u modelu ne ovisi o stanju rešetke. Integrali preklapanja udaljenijih čvorova su zanemareni. Energiji lokaliziranog elektronskog stanja pridružena je vrijednost nula, što je omogućeno slobodom izbora ishodišta energetske skale.

Titranje molekula opisano je hamiltonijanom H_{fn}. $b_n^\dagger, b_n,$ su bozonski operatori stvaranja, odnosno poništavanja, nedisperzivnih[4] optičkih fonona, lokaliziranih na čvoru n. ω je odgovarajuća Einsteinova frekvencija.

H_{int} opisuje lokalno i linearno međudjelovanje elektrona s fononima. Lokalno zato što elektron međudjeluje samo s fononima čvora na kojem se nalazi, a linearno zato što je energija međudjelovanja proporcionalna prostornoj deformaciji rešetke[5] x_n.

Koristeći supstitucije

$$\begin{aligned} c_n &= 1/\sqrt{N} \sum_k e^{ikna} c_k & \qquad c_k &= 1/\sqrt{N} \sum_n e^{-ikna} c_n \\ b_n &= 1/\sqrt{N} \sum_q e^{iqna} b_q & \qquad b_q &= 1/\sqrt{N} \sum_n e^{-iqna} b_n \, , \end{aligned}$$

hamiltonijan (1) možemo prikazati u impulsnoj reprezentaciji

$$H = -2J \sum_k \cos{(ka)} \; c_k^\dagger c_k + \omega \sum_q b_q^\dagger b_q + \lambda/\sqrt{N} \sum_{k,q} (b_q c_{k+q}^\dagger c_k + b_q^\dagger c_k^\dagger c_{k+q}) \, . \tag{2}$$

Impulsu polarona $\hat{K}$ pridružen je operator

$$\hat{K} = \sum_k k \; c_k^\dagger c_k \; + \sum_q q \; b_q^\dagger b_q \, . \tag{3}$$

Operator $\hat{K}$ komutira s hamiltonijanom (2). Kako to ujedno vrijedi za operator $b_{q=0}$

[1] Na primjeru trans-poliacetilena ovaj slučaj raspravljen je u poglavlju 5.
[2] Detaljan izvod Holsteinovog hamiltonijana može se naći u [5].
[3] $\hbar = 1$.
[4] $\omega(k) = konst = \omega$
[5] Formalizam operatora $x_n, b_n^\dagger, b_n,$ i njihova međusobna veza detaljnije je dana u dodatku B.

$$[H, b_0] = 0 \ , \tag{4}$$

mogu se tražiti takve valne funkcije polarona koje su istovremeno svojstvena stanja hamiltonijana, impulsa polarona i operatora $b_{q=0}$. Pri konstrukciji varijacionih valnih funkcija o kojima ćemo u nastavku govoriti, korištene su spomenute simetrije.

2.3 Osnovno stanje Holsteinovog hamiltonijana, parametarski prostor J, λ, K

U ovom radu traže se aproksimativni izrazi za osnovno stanje Holsteinovog hamiltonijana u ovisnosti o prametrima J, ω, λ, K. Lako se je uvjeriti da se dva osnovna stanja istog valnog vektora K razlikuju samo ako su im pridruženi različiti omjeri $J/\omega, \lambda/\omega$. Stoga je pogodno definirati odgovarajući troparametarski prostor u kojem svakoj točki odgovara tek jedno osnovno stanje. U skladu s time u ovom radu fiksiran je parametar ω, tako da su dobiveni rezultati pridruženi različitim vrijednostima J, λ, K.

3 Pronalaženje osnovnog stanja Holsteinovog hamiltonijana

3.1 Uvod

3.1.1 Ograničenja na parametarski prostor J, λ, K

U svrhu pronalaženja spektra hamiltonijana moraju se koristiti aproksimativne metode jer se problem ne može riješiti analitički. Dobiveni rezultati onda, ovisno o aproksimaciji koja je primjenjena, bivaju približno dobri tek na dijelovima parametarskog prostora J, λ, K. U tipičnim elektron-fonon sistemima, koji su predmet ovog rada, efektivna masa elektrona m, u odsustvu elektron-fonon međudjelovanja, je uvijek znatno manja od mase čvorišta rešetke M. Nas zanima područje parametarskog prostora J, λ, K, za koje vrijedi[6]

$$1/2m = J \gg \omega = \sqrt{K_r/M} \; . \tag{5}$$

No problem nalaženja valnih funkcija polarona za sve vrijednosti K unutar prve Brillouinove zone, i uz uvijet (5), ostaje složen, pa smo pažnju u ovom radu ograničili na stanja s malim impulsom polarona. Stoga će se, osim ako to nije posebno napomenuto, prešutno pretpostavljati da valni vektor K pridružen impulsu polarona uvijek zadovoljava uvijet

$$2J(1 - \cos Ka) < \omega \; . \tag{6}$$

Drugim riječima, promatrat ćemo samo one slučajeve elektron-rešetka međudjelovanja u kojima je kinetička energija slobodnog elektrona manja od energije potrebne za pobudu jednog fonona. Primjetimo da je zbog (5), uvijet (6) dosta strog, tj. da odgovara zahtjevu $Ka \ll 1$.

3.1.2 Tri područja elektron-fonon međudjelovanja

Onaj dio parametarskog prostora koji je preostao poslije sada navedenih restrikcija, najzgodnije je podijeliti na tri područja, u ovisnosti o vrijednostima parametara J, ω, λ. Kada je $\lambda < \omega < J$ govorimo o području slabe elektron-fonon veze. Tada se H_{int} može promatrati kao mala pertubacija u odnosu na ostatak hamiltonijana, što odražava činjenicu da je za približan opis polarona dovoljno uzeti procese u kojima kvazislobodan elektron međudjeluje samo s jednim fononom. U granici $\lambda \to 0$ amplituda polarona teži nuli, za razliku od njegovog efektivnog protezanja koje ima konačnu vrijednost. Porast parametra λ općenito uzrokuje porast amplitude polarona, a u području slabe veze i porast efektivnog protezanja polarona.

Područjem srednje veze smatra se područje parametara kada vrijedi $\omega < \lambda < J$. U njemu se ni jedan član hamiltonijana ne može tretirati kao pertubacija, pa je nalaženje njegovog osnovnog stanja složenije. Iako se za dio područja srednje veze, u kojemu je $\lambda > \omega$ takav da vrijedi $\lambda^2/\omega < J$, u literaturi upotrebljava pojam slabog elektron-fonon međudjelovanja, problem polarona je znatno složeniji od onoga koji susrećemo za $\lambda < \omega$. Doprinosi viših redova elektron-fonon međudjelovanja se ne mogu zanemariti. Prosječan broj fonona u polaronu blizak je ili veći od jedan, pa elektron sada međudjeluje s deformaciom rešetke opisanom s više fonona. Porast njegove efektivne mase zbog elektron-fonon međudjelovanja, m_{ef}, znatan je u odnosu na njegovu efektivnu masu u odsustvu elektron-fonon međudjelovanja, m, pa elektron ne možemo smatrati kvazislobodnim. Napomenimo još da u dijelu područja srednje veze, efektivno protezanje polarona dostiže svoju maksimalnu vrijednost, od koje se daljnjim porastom parametra λ smanjuje.

Napokon, područje u kojemu je $J < \lambda$, definira područje jake veze. U njemu se kao smetnja može tretirati H_{el}. Naime, zbog jakog elektron-fonon međudjelovanja, elektron se nalazi u kvazivezanom stanju s fononima čvora na kojem je trenutno, te tek povremeno tunelira na susjedne čvorove. Kako λ raste tako se smanjuje efektivno protezanje polarona na red veličine kontante rešetke, što odgovara pojavi samouhvata elektrona.

3.2 Račun smetnje za područje slabe veze

3.2.1 Uvod

Elektronsko-fononsko međudjelovanje u području slabe veze, kada je $\lambda < \omega \ll J$, promatrat ćemo prvo standardnim računom smetnje, u kojem se H_{int} tretira kao pertubacija. Kao skup nesmetanih stanja sistema uzima se direktni produkt skupa stanja slobodnog elektrona i skupa fononskih stanja.

[6] K_r je konstanta elastične sile rešetke.

3.2.2 Energija i valna funkcija polarona

Tražimo popravke nesmetane valne funkcije polarona čiji je fononski dio dan samo osnovnim, bezfononskim stanjem rešetke: $\mid k, - >= c_k^\dagger \mid 0 >$. Prve korekcije energiji i valnoj funkciji polarona, različite od nule, tada su dane u 2, odnosno 1. redu računa smetnje

$$
\begin{aligned}
E_k^{(2)} &= E_k + \sum_q \frac{|< k+q, -q \mid H_{int} \mid k, - >|^2}{E_k - \omega - E_{k+q}} \\
\mid k, - >^{(1)} &= \mid k, - > + \sum_q \frac{< k+q, -q \mid \; H_{int} \; \mid k, - >}{E_k - \omega - E_{k+q}} \; \mid k+q, -q > ,
\end{aligned}
$$

gdje valna funkcija $\mid k, q >= c_k^\dagger \, b_q^\dagger \; \mid 0 >$, označava da u sistemu imamo elektron s valnim vektorom k i fonon s valnim vektorom q.

Ako primjetimo da je

$$
< k+q, -q \mid \; H_{int} \; \mid k, - >= \lambda / \sqrt{N}
$$

$$
E_k = -2J \cos ka ,
$$

računom dobivamo

$$
\begin{aligned}
E_k^{(2)} &= -2J \cos ka + \lambda^2 \cdot I(0) \\
\mid k, - >^{(1)} &= 1/\sqrt{N} \, \{ \sum_j e^{ikaj} \, c_j^\dagger \, [1 + \beta \sum_\Delta b_{j+\Delta}^\dagger \, I(\Delta)] \} \; \mid 0 > ,
\end{aligned}
$$

gdje smo s $I(n)$ označili

$$
I(n) = 1/N \sum_q \frac{e^{-iqan}}{-2J \cos ka - \omega + 2J \cos{(k+q)a}} .
$$

U slijedećem koraku može se izvesti konačni izraz za energiju i valnu funkciju polarona[7], odnosno dobiti

$$
\begin{aligned}
E_k^{(2)} &= -2J \cos ka + \lambda \, A_{RS} && (7) \\
\mid k, - >^{(1)} &= 1/\sqrt{N} \, \{ \sum_j e^{ikaj} \, c_j^\dagger \, [1 + A_{RS} \sum_\Delta b_{j+\Delta}^\dagger \, e^{ika\Delta} \; \cdot \; B_{RS}^{|\Delta|}] \; \mid 0 > \\
A_{RS} &= -\frac{\lambda}{2J} \cdot \frac{1}{\sqrt{(\cos ka + \omega/2J)^2 - 1}} \\
B_{RS} &= \cos ka + \omega/2J - \sqrt{(\cos ka + \omega/2J)^2 - 1} \, . && (8)
\end{aligned}
$$

3.2.3 Područje valjanosti računa smetnje

Da bi račun smetnje bio dobra aproksimacija, mora vrijediti

$$
(\sum_q \frac{\sqrt{|< k+q, -q \mid H_{int} \mid k, - >|^2}}{E_k - \omega - E_{k+q}}) \ll 1 \qquad \forall \quad k \; .
$$

Gornji zahtjev uvjetuje $A_{RS} \ll 1$, odnosno

$$
\begin{aligned}
\lambda &\ll J \\
\cos ka + \omega/2J &> 1 , && (9)
\end{aligned}
$$

gdje se druga nejednakost podudara s uvjetom (6).

[7] Detaljni račun za $I(n)$ može se naći u dodatku A.

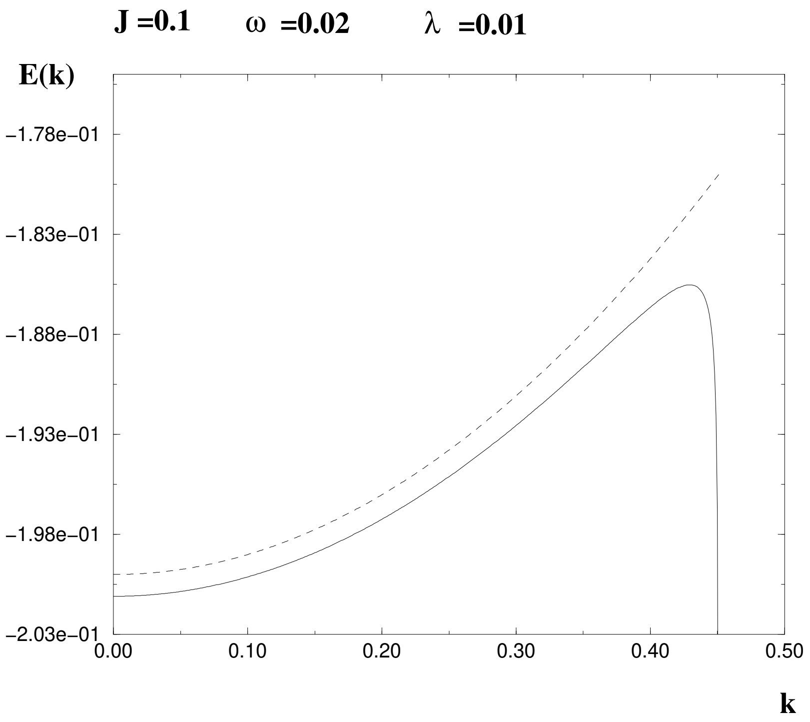
3.2.4 Efektivna masa elektrona

Kako je srednji broj fonona unutar polarona[8] u području slabe veze jako mali ($\ll 1$), glavni doprinos impulsu polarona dolazi od impulsa elektrona. Stoga često govorimo o efektivnoj masi elektrona iako se radi o efektivnoj masi polarona. Izraz za efektivnu masu elektrona izvodi se pomoću (7), i dan je s

$$\begin{aligned} 1/m_{eff} &= \frac{\partial^2 E_k}{\partial k^2} |_{k=0} \\ &= 1/m\,[1 - \frac{\lambda^2}{\omega^{3/2}} \cdot \frac{2J+\omega}{(4J+\omega)^{3/2}}]\,. \end{aligned} \tag{10}$$

3.2.5 Komentar rezultata računa smetnje

Energiji polarona (7) doprinose dva člana. Prvi je kinetička energija slobodnog elektrona, dok je drugi doprinos elektron-fonon vezanja. Na slici 1 vidimo ovisnost energije polarona o k (puna linija). Crtkanom linijom dana je energija slobodnog elektrona. Primjetimo kako račun smetnje divergira u granici: $(1-\cos ka) \to \omega/2J$, dakle kada (9) prestaje vrijediti.



Slika 1: Usporedba energije polarona dobivene računom smetnje (puna linija) i energije slobodnog elektrona (crtkana linija).

Srednji broj fonona na udaljenosti Δ od elektrona dan je korelacionom funkcijom (11). Njezina suma po svim udaljenostima Δ, (12), daje pak srednji broj fonona, N_{fp}, u polaronu

$$\Xi^K(\Delta) = <\Psi(K) \mid \sum_j c_j^\dagger c_j b_{j+\Delta}^\dagger b_{j+\Delta} \mid \Psi(K)> \tag{11}$$

$$N_{fp}(K) = \sum_\Delta \Xi^K(\Delta)\,. \tag{12}$$

Koristeći (8) možemo konkretno izračunati $\Xi^k(\Delta)$ i $N_{fp}(k)$ za račun smetnje. Tako dobivamo

[8] Srednji broj fonona unutar polarona definiran je s (12).

$$
\begin{aligned}
\Xi^k_{RS}(\Delta) &= (A_{RS}\, B_{RS}^{|\Delta|})^2 \\
N_{fp,RS}(k) &= A^2_{RS} \frac{1+B^2_{RS}}{1-B^2_{RS}} \,.
\end{aligned}
\tag{13}
$$

A_{RS} odgovara amplitudi deformacije. B_{RS} pak opisuje eksponencijalan pad fononskih pobuđenja pojedinih čvorova u ovisnosti o njihovoj udaljenosti od elektrona ($B_{RS} < 1$).

Vidimo da račun smetnje u području slabe veze predviđa konačno efektivno protezanje polarona i u području $\lambda \to 0$. B_{RS} zapravo uopće ne ovisi o λ. No, kako je $A_{RS} \sim \lambda$, amplituda deformacije teži nuli s λ, pa s njom nestaje i čitava deformacija. To je u skladu sa činjenicom da se u odsustvu elektron-fonon međudjelovanja sistem opisan s hamiltonijanom (1) sastoji od dva nezavisna podsistema: slobodnog elektrona i rešetke u osnovnom stanju ($T = 0^o K$).

3.3 Područje jake veze

3.3.1 Uvod

Jaka veza, kao što smo već prije spomenuli, obuhvaća područje u kojem vrijedi $\lambda > J \gg \omega$. Formalno se H_{el} može tretirati kao smetnja za ove odnose parametara J, ω, λ. To vodi na rješavanje beskonačno-degeneriranog računa smetnje. No, njegova neanalitičnost čini ga nepogodnim za jednostavne analize, pa u tu svrhu moramo upotrijebiti neku drugu metodu. Varijacioni pristup, o kojem ćemo sada govoriti, čini se najpogodnijim izborom.

3.3.2 Energija i valna funkcija polarona u području jake veze

Kada je λ dovoljno velik, polaron je praktički potpuno lokaliziran na jedan čvor rešetke, odnosno njegovo efektivno protezanje odgovara konstanti rešetke, a. Tako u najgrubljoj aproksimaciji možemo zanemariti procese tuneliranja elektrona na susjedne čvorove i promatrati kvazivezano stanje elektrona s fononima čvora j na kojemu se on trenutno nalazi. To kvazivezano stanje opisuje hamiltonijan

$$
\begin{aligned}
H_j &= \lambda\, c^\dagger_j c_j \,(b^\dagger_j + b_j) + \omega\, b^\dagger_j b_j \\
&= \lambda\, (b^\dagger_j + b_j) + \omega\, b^\dagger_j b_j \,.
\end{aligned}
$$

Zadnji red pretpostavlja da je elektron na čvoru j. Dijagonalizacija H_j izvedena je analitički, te pokazuje da je osnovno stanje hamiltonijana H_j[9]

$$
\begin{aligned}
S_j(\xi) \mid 0> &= e^{\xi b^\dagger_j - \xi^* b_j} \mid 0> \\
\xi &= -\lambda/\omega \,.
\end{aligned}
$$

Koristeći ovaj rezultat konstruirajmo translaciono invarijantnu varijacionu valnu funkciju $\Psi_{JV}(K)$ na slijedeći način

$$
\Psi_{JV}(K) = 1/\sqrt{N} \sum_j e^{iKaj}\; c^\dagger_j\; S_j(A_{JV}) \mid 0> \;. \tag{14}
$$

Ona opisuje polaron lokaliziran na jednom čvoru rešetke koji se propagira duž rešetke valnim vektorom K. Amplituda deformacije rešetke A_{JV}, varijacioni je parametar po kojemu minimiziramo energiju E_{JV}

$$
E_{JV} = \frac{<\Psi_{JV} \mid H \mid \Psi_{JV}>}{<\Psi_{JV} \mid \Psi_{JV}>} = -2J\, e^{-A^2_{JV}}\; \cos(Ka) + \omega\, A^2_{JV} + 2\lambda\, A_{JV} \;.
$$

Minimizacija po A_{JV} daje jednadžbu

$$
A_{JV} \;=\; -\frac{\lambda}{\omega}\, \frac{1}{1 + 2J/\omega\; e^{-A^2_{JV}}\; \cos(Ka)} \;,
$$

[9] Dijagonalizacija hamiltonijana, H_j, koherentna stanja i operator $S_j(\xi)$, detaljnije su obrađeni u dodatku B.

koja se numerički iterativnim procesom lako rješava. Kako nas po pretpostavci zanima područje za koje vrijedi $\lambda > J \gg \omega$, odnosno kada $\lambda/\omega \to \infty$, A_{JV} se može vrlo dobro aproksimirati s

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda/\omega\to\infty} A_{JV} &\approx -\frac{\lambda}{\omega}\ [1 - \frac{2J}{\omega}\ e^{-(\lambda/\omega)^2}\ \cos{(Ka)}] \\ &\approx -\frac{\lambda}{\omega} = \xi\ , \end{aligned}$$

a energija sustava s

$$E_{JV} = -2J\ e^{-(\lambda/\omega)^2}\ \cos{(Ka)} - \lambda^2/\omega\ . \tag{15}$$

3.3.3 Komentar rezultata varijacionog računa u području jake veze

Naglasimo prvo da je pretpostavka valne funkcije o lokaliziranosti polarona samosuglasna s izrazom (15), dobivenim za energiju. U njemu naime prvi član, trne s $\exp -(\lambda/\omega)^2$, dakle vrlo brzo. Njegov srazmjerno zanemariv doprinos energiji sustava znači da su rijetki slučajevi kada elektron napusti čvor na kojemu je rešetka deformirana. S tim je potvrđena pretpostavka varijacione valne funkcije. Kaže se da je došlo do samouhvata elektrona.

Činjenica da je elektron praktički zarobljen preko jakog elektron-fonon međudjelovanja za onaj čvor na kojem se deformacija nalazi, pospješuje lokalizaciju same deformacije. Naime, kako elektron gotovo ne tunelira na susjedne čvorove, broj pobuđenih fonona na tim čvorovima je zanemariv, odnosno ništa ne doprinosi povećanju efektivnog protezanja deformacije. Tako lokalizacija elektrona pospješuje lokalizaciju deformacije i obrnuto, lokalizacija deformacije pospješuje lokalizaciju elektrona.

3.3.4 Divergencija efektivne mase polarona

Prvom članu izraza (15) doprinosi kinetička energija gibanja polarona (ako $K \neq 0$). Drugom doprinosi pozitivna potencijalna energija deformacije rešetke i negativna energija samog elektron-fonon vezanja.

Kinetičkoj energiji polarona, kao i ukupnom impulsu polarona, doprinose i elektron i fononi. Izraz za efektivnu masu polarona lako je naći iz kinetičke energije polarona

$$m_{ef} = 1/2J\ e^{(\lambda/\omega)^2} = m\ e^{(\lambda/\omega)^2}\ .$$

On divergira s $\exp{(\lambda/\omega)^2}$. To ima za poslijedicu da je polaron, za konstatni K, porastom λ sve tromiji: $v_K = K/m_{ef}$. Zapravo u granici jake veze, $\lambda/\omega \to \infty$ polaron je praktički statičan, te je njegova kinetička energija, kao što smo već opazili, zanemariva.

Energetska vrpca slobodnog elektrona širine $4J$ stisnuta je, zbog jakog elektron-fonon međudjelovanja za faktor $\exp -(\lambda/\omega)^2$. Energija polarona, neovisno o valnom vektoru K, teži u području jake veze vrijednosti $-\lambda^2/\omega$. To je, primjetimo, energija osnovnog stanja hamiltonijana H_j, odnosno energija elektron-fonon vezanja i pridružene deformacije rešetke za slučaj kada je elektron potpuno lokaliziran na jednom čvoru.

3.4 Dinamička aproksimacija

3.4.1 Koherentno gibanje polarona i dinamička aproksimacija

Gibanje elektrona u odnosu na deformaciju rešetke može se podijeliti najgrublje na dvije vrste, koherentno i nekoherentno. Ovo prvo obuhvaća procese u kojima se i elektron i deformacija zajedno, koherentno, pomiču duž kristalne rešetke. Nasuprot njima prepoznajemo procese u kojima se elektron pomiče unutar deformacije rešetke. Dakako, ovo je aproksimativno shvaćanje cjelokupne dinamike polarona, dok stanju stvari općenito više odgovara nekakva kombinacija ovih dvaju gibanja. Aproksimiranje dinamike polarona nekoherentnim gibanjem elektrona susret ćemo u poglavlju 3.5, prilikom iznošenja Holsteinovog rješenja. Sada ćemo pažnju obratiti na koherentno gibanje i tzv. dinamičku aproksimaciju.

Dinamička aproksimacija zanemaruje doprinose dinamici polarona koji su poslijedica propagacije elektrona u odnosu na deformaciju rešetke. Elektronski dio valne funkcije polarona lokaliziran je na jednom čvoru rešetke, te se elektron može pomicati s čvora na čvor rešetke tek pomicanjem cijelog polarona. Ovakvu sliku polarona daju do sada obrađene metode, račun smetnje za slabu vezu, te varijaciona metoda za područje jake veze. Pogledajmo ukratko zašto je to tako.

Da bi mogli govoriti o položaju elektrona unutar deformacije, a onda i nekoherentnom gibanju elektrona, deformacija kao takva mora biti dobro definirana. U granici slabe veze, područje u kojem se događa proces virtualne pobude i poništavanja fonona, znatno je manje od puta koji elektron prijeđe ne inicirajući takav proces. Drugim riječima, rešetka je u prosjeku nedeformirana, a kada je deformirana, njezin prostorni odnos spram elektrona svodi se na odnos elektrona i jednog virtualno pobuđenog i poništenog fonona. Iz ovoga slijedi da u području slabe veze nema gibanja elektrona u odnosu na deformaciju rešetke, pošto ona u tom smislu riječi nije definirana. Dinamika polarona gotovo u potpunosti je opisana dinamičkom aproksimacijom.

U slučaju pak jake veze, efektivno protezanje deformacije rešetke s kojom je elektron u kvazivezanom stanju, odgovara konstanti rešetke. Procesi u kojima se elektron pomiče naspram deformacije rešetke, tunelirajući iz njezine potencijalne jame na neki susjedni čvor, podsjećamo, pokazali su se zanemarivim. Možda je najbolje primijetiti da u području jake veze u prvom redu možemo zanemariti svako gibanje elektrona, i koherentno i nekoherentno.

Naš slijedeći cilj je jednim tipom varijacione valne funkcije opisati polarone i u području slabe i u području jake veze. Konstruirajući varijacionu valnu funkciju u skladu s dinamičkom aproksimacijom, pokazat ćemo da se rezultati računa smetnje i varijacione valne funkcije u području jake veze mogu u njoj objediniti.

3.4.2 Konstrukcija varijacione valne funkcije, izraz za energiju

Varijaciona valna funkcija polarona, u dinamičkoj aproksimaciji, opisuje lokalizirani elektron s pridruženom mu deformacijom rešetke, koji se koherentno propagiraju rešetkom. Slijedeća valna funkcija [9] u skladu je s tom slikom,

$$
\begin{aligned}
\Psi_{DN}(K) &= 1/\sqrt{N}\sum_j e^{iKaj}\; c_j^\dagger \prod_n S_j(n) \mid 0 > \\
S_j(n) &= e^{\xi_n\, b_j^\dagger - \xi_n^*\, b_j} \\
\xi_n &= A_{DN} B_{DN}^{|n|} \quad , \quad 0 \le B_{DN} < 1 \ .
\end{aligned} \tag{16}
$$

A_{DN} i B_{DN} su varijacioni parametri, a $S_j(n) \mid 0 >$ koherentno stanje $\xi(n)$ na čvoru j[10]. U području slabe veze očekujemo da će $A_{DN} \to 0$, a u području jake veze da će pak $B_{DN} \to 0$. U tom slučaju bi oblik varijacione valne funkcije težio do sada dobivenim valnim funkcijama za područje slabe veze (8) i za područje jake veze (14). Naime, primijetimo da vrijedi

$$
\begin{aligned}
\lim_{A\to 0} \prod_n S_j(n) &\approx 1 + A_{DN}\sum_\Delta B_{DN}^{|\Delta|}\; b_{j+\Delta}^\dagger \\
\lim_{B\to 0} \prod_n S_j(n) &\approx S_j(0) \ ,
\end{aligned}
$$

odnosno, da varijaciona valna funkcija u ova dva limesa zaista ima slični oblik kao i valne funkcije koji smo imali za područje slabe odnosno jake veze.

Varijacioni izraz za energiju lako izračunamo[11]

$$
E_{DN}(K) = -2J\cos{(Ka)}\ \exp\{-A_{DN}^2\frac{1-B_{DN}}{1+B_{DN}}\} + \omega\ A_{DN}^2\frac{1+B_{DN}^2}{1-B_{DN}^2} + \lambda\ A_{DN}\ .
$$

U prvom članu izraza prepoznajemo kinetički član koji je poslijedica propagacije polarona, drugom potencijalnu energiju deformacije rešetke te u trećem energiju elektron-fonon vezanja.

3.4.3 Minimizacija energije

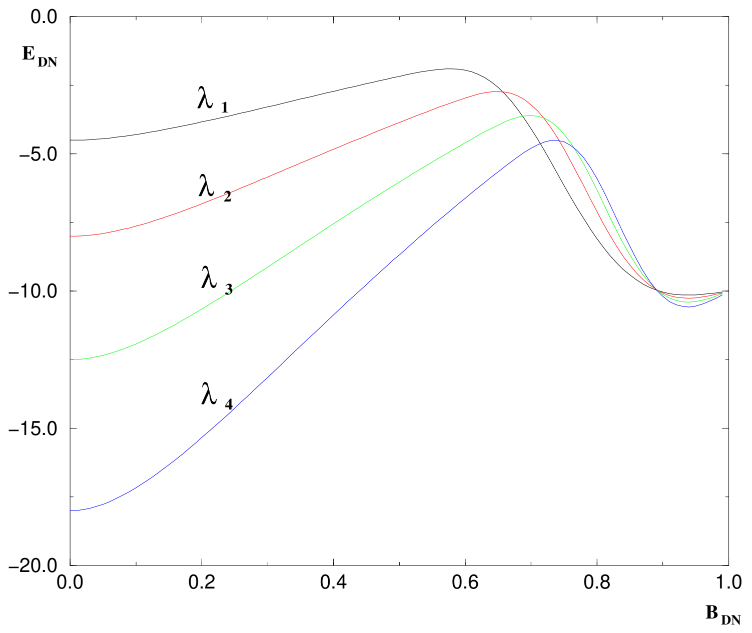
Minimizacijom energije dobijaju se dva uvjeta na varijacione parametre

[10] Formalizam koherentnih stanja iznešen je u dodatku B.

[11] Detaljni izvod varijacionog izraza za energiju dan je u [10].

$$
\begin{aligned}
A_{DN} &= -\lambda/\omega \cdot \frac{1-B_{DN}}{1+B_{DN}} && (17)\\
J\cos(Ka) &= \omega \cdot \frac{B_{DN}}{(1-B_{DN})^2} \cdot \exp\{(\lambda/\omega)^2\,(\frac{1-B_{DN}}{1+B_{DN}})^3\}\,. && (18)
\end{aligned}
$$

Kako prvi uvijet povezuje A_{DN} s B_{DN}, varijacioni izraz za energiju može se prikazati kao funkcija samo jedne varijable, B_{DN}. Njegov minimum nalazi se numerički iteracijom izraza (18), osim u točki $B_{DN} = 0$. Na slici 2 prikazana je ovisnost energije E_{DN} o B_{DN}. Vidimo da postoje dva



$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \lambda_4$

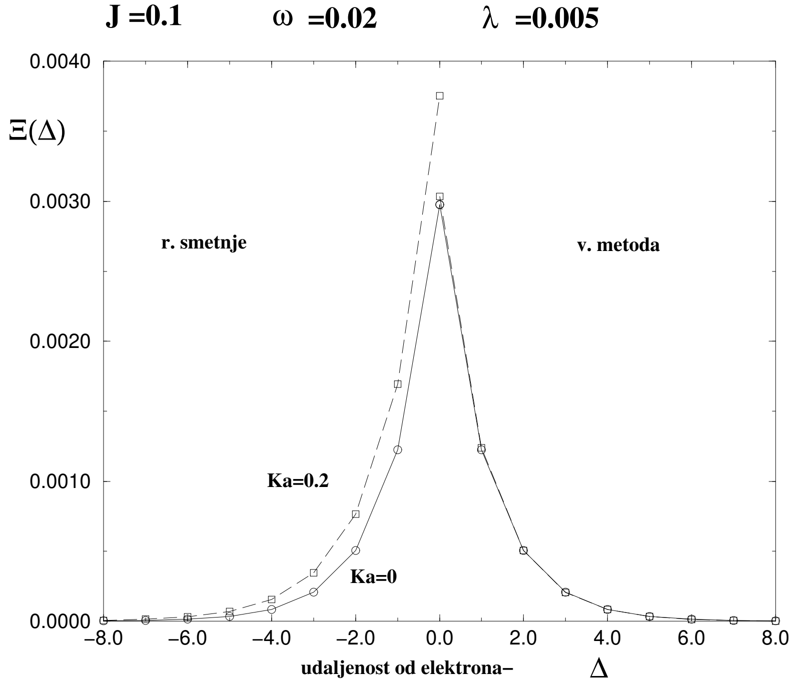
Slika 2: Ovisnost variacione energije E_{DN} o varijacionom parametru B_{DN} za razne vrijednosti parametra λ.

minimuma, jedan za $B_{DN} = 0$, i drugi za $B_{DN} \neq 0$. U području jake veze, apsolutni minimum je u točki $B_{DN} = 0$, no smanjenjem jakosti elektron-fonon međudjelovanja, za neko kritično λ, taj minimum postaje lokalni, u korist minimuma gdje je $B_{DN} \neq 0$. Ovaj prijelaz događa se u području srednje veze, kada ne očekujemo da je dinamička aproksimacija dobra. Stoga, toj pojavi ne treba pridavati fizikalno značenje, već je treba shvatiti kao poslijedicu korištene metode.

3.4.4 Ovisnost deformacije rešetke o valnom vektoru K

Porastom valnog vektora polarona K očekujemo povećanje amplitude i efektivnog protezanja polarona. To predviđaju rezultati svih drugih metoda koje su u ovom radu obrađeni, ali ne i varijaciona valna funkcija dana s (16). Obrnuto, ona porastom K predviđa neznatno smanjenje efektivnog protezanja polarona, dok amplituda deformacije bilježi tek mali porast.

Ilustrirajmo rečeno slikom 3, na kojem je prikazana korelaciona funkcija definirana s (11), za račun smetnje i varijacionu valnu funkciju (16). Pošto je korelaciona funkcija uvijek simetrična u odnosu na elektron, kojem pridružujemo ishodište koordinatnog sustava, dovoljno je prikazati njenu vrijednost duž jedne poluosi. To onda općenito pri međusobnom uspoređivanju raznih rezultata korelacione funkcije možemo iskoristiti tako da lijevoj strani slike (negativna poluos) pridružimo jedne rezultate, a desnoj strani slike (desna poluos) druge. Posebno, na slici 3, lijeva strana slike odgovara rezultatima računa smetnje, a desna rezultatima varijacione metode. Složit ćemo se da je utjecaj promjene K suštinski različit na rezultate ovih dviju metoda. Kvadratići su pridruženi



Slika 3: Usporedba korelacionih funkcija $\Xi(\Delta)$ za račun smetnje i variacionu metodu. Simetričnost korelacione funkcije u odnosu na ishodište omogućava nam da negativnim vrijednostima apcise pridružimo rezultate računa smetnje, a pozitivnim varijacione metode. Rezultati koji su dobiveni za $Ka = 0$, označeni su s punom linijom i kružićima, dok su oni dobiveni za $Ka = 0.2$, označeni crtkanom linijom i kvadratićima.

vrijednosti korelacione funkcije obiju metoda za $Ka = 0.2$, dok su kružići pridruženi rezultatima za $Ka = 0$.

Ubacivanjem faznog faktora $e^{i\varphi na}$, $\varphi = K$, u varijacionu valnu funkciju (16), njezino ponašanje za $K \neq 0$ može se popraviti. To se čini na slijedeći način

$$\xi_n = A_{DN} B_{DN}^{|n|} \quad \rightarrow \quad \xi_n = A_{DN} B_{DN}^{|n|}\, e^{i\varphi na} \; .$$

Primjetimo da se tako prepravljena varijaciona valna funkcija u granici $\lambda \rightarrow 0$, odnosno $A_{DN} \rightarrow 0$, više formalno ne razlikuje od izraza (8), valne funkcije polarona u prvom redu računa smetnje za slabu vezu. Poslijedica toga je da onda ovako prepravljena valna funkcija, porastom K, predviđa znatniji porast amplitude i efektivnog protezanja polarona, odnosno da se ponaša konzistentno predviđanjima ostalih metoda.

Da bi ova prepravka bila opravdana, prepravljena varijaciona valna funkcija mora biti energetski opravdana. Drugim riječima energija sustava uz iste parametre J, λ, K, pridružena prepravljenoj valnoj funkciji, mora biti niža od energije pridružene neprepravljenoj valnoj funkciji. Takav slučaj je u području slabe veze. U području pak jake veze fazni faktor nema nikakvog utjecaja, jer je $B_{DN} = 0$.

Tako smo došli do konačnog izraza za varijacionu valnu funkciju polarona opisanog dinamičkom aproksimacijom. U nastavku ovog rada, kao rezultati dinamičke aproksimacije smatrat će se rezultati koji su dobiveni korištenjem prepravljene varijacione valne funkcije[12]

$$\begin{aligned} \Psi_D(K) &= 1/\sqrt{N} \sum_j e^{iKaj}\, c_j^\dagger \prod_n S_{j+n}(n) \mid 0 > \\ \xi_n &= A_D B_D^{|n|}\, e^{i\varphi na} \quad , \quad \varphi = K \; . \end{aligned} \tag{19}$$

3.4.5 Komentar dinamičke aproksimacije

Pokazuje se da dinamička aproksimacija daje dobre rezultate i u području slabe, i u području jake veze. U području slabe veze, energija sustava računata dinamičkom aproksimacijom poklapa se s

[12]Izvod izraza za variacionu energiju u dinamičkoj aproksimaciji obrađen je u dodatku D.

energijom sustava dobivenom računom smetnje. Spomenute dvije metode razlikuju se tek malo u predviđanju oblika deformacije rešetke.

U području jake veze rezultati dinamičke aproksimacije istovjetni su rezultatima varijacione metode razvijene u 3.3, jer je $B_D = 0$.

3.5 Adijabatska aproksimacija

3.5.1 Uvod

Najopćenitiji adijabatski pristup rješavanju našeg problema skiciran je npr. u [8]. No, za ilustraciju adijabatske aproksimacije nama će biti dovoljno samo ono rješenje dano u Holsteinovom članku [5], koje opisuje polaron koji kao cijelina stoji, sa središtem na jednom od čvorova rešetke. To riješenje daje dobre rezultate u području srednje veze, točnije u dijelu parametarskog prostora za koji je $\omega \ll \lambda \ll J$ zadovoljeno. Primjenjivost adijabatske aproksimacije osigurava uvijet $\omega \ll J, \lambda$, dok je zahtjev da efektivno protezanje polarona bude znato veća od konstante rešetke osigurano s $\lambda \ll J$. Ovo posljednje potreba je aproksimacije kontinuuma učinjene tokom izvođenja Holsteinovog rješenja, i nije u vezi s adijabatskom aproksimacijom.

3.5.2 Opravdanost adijabatske aproksimacije

Adijabatska aproksimacija temelji se na činjenici da je masa asocirana čvoru rešetke M znatno veća od efektivne mase elektrona u odsustvu elektron-fonon međudjelovanja m (uvijet (5)). Brzi elektron (mala masa) nalazi se efektivno u potencijalnoj jami deformacije rešetke, koja se u odnosu na njegovu brzinu zbog velikih masa asociranih čvorovima rešetke, sporo mjenja. Efektivni potencijal i valna funkcija elektrona su samosuglasni, u smislu da minimiziraju energiju polarona. Faktično, elektron prati adijabatski gibanje deformacije rešetke, što onda omogućava primjenu adijabatske aproksimacije.

Impulsu i kinetičkoj energiji sustava doprinose elektron i fononi. No za razliku od područja slabe veze, glavni doprinos dolazi od sporih fonona, jer je efektivna masa deformacije rešetke znatno veća od mase elektrona. Praktičnije je govoriti o tome da elektron slijedi deformaciju rešetke nego obrnuto. Tako je za male K, kinetička energija propagacije polarona tek mali doprinos energiji polarona, koji se tretira u drugom redu.

U posebnom slučaju, kada polaron kao cijelina stoji (statični polaron), dovoljno je riješiti elektronski dio polaronske funkcije. Srednje vrijednosti prostorne deformacije rešetke na svakom čvoru ne mjenjaju se tokom vremena, a mase asocirane čvorovima rešetke titraju oko tih ravnotežnih položaja. Kada je frekvencija samog titanja jako mala (M jako veliko), moguće je u prvom redu zanemariti energiju tog titranja naspram potencijalne energije rešetke i energije elektron-fonon vezanja. Upravo na tome se bazira Holsteinovo rješenje.

3.5.3 Energija i valna funkcija Holsteinovog rješenja

Koristeći operatore koordinata čvorova definirane s

$$x_j = \frac{b_j^\dagger + b_j}{\sqrt{2}} \qquad p_j = \frac{b_j^\dagger - b_j}{i\sqrt{2}} \ ,$$

naš hamiltonijan (1) možemo napisati u obliku

$$H = \omega/2 \sum_j (x_j^2 + p_j^2) + \lambda\sqrt{2} \sum_j x_j c_j^\dagger c_j - J \sum_j c_j^\dagger (c_{j+1} + c_{j-1}) + konst \ . \tag{20}$$

U adijabtskoj granici ($p_j = 0$) rješava se samo statični dio hamiltonijana (20). Tako ravnotežne koordinate x_j^0 postaju klasične veličine, pa se ova aproksimacija zna još zvati i klasičnom aproksimacijom. Naš elektron se nalazi u samosuglasnom statičnom vanjskom potencijalu čvorova rešetke, što se jasno vidi u izrazu dobivenom minimizacijom H po x_j

$$V_n = -\frac{2\lambda^2}{\omega} \ < c_n^\dagger c_n > = -\frac{2\lambda^2}{\omega} \cdot \bar{\varrho}_n \ , \tag{21}$$

gdje je V_n potencijal čvora n, a $\bar{\varrho}_n$ srednja elektronska gustoća na tom čvoru.

Spomenuta minimizacija vodi na Schrödingerovu jednadžbu, čije je analitičko rješenje nađeno u aproksimaciji kontinuuma, odnosno uz uvijet da je efektivno protezanje polarona znatno veće od konstante rešetke a. U tim okolnostima za energiju statičnog polarona dobiven je izraz

$$E_{AD} = -2J - \frac{1}{12J}(\frac{\lambda^2}{\omega})^2 \ . \tag{22}$$

U slučaju Holsteinovog rješenja, ne govorimo o valnoj funkciji polarona na isti način kao što to radimo pri ostalim metodama rješavanja našeg hamiltonijana u ovom radu. Ovdje je opis rešetke klasičan, a ne dan u II kvantizaciji. Naravno, konstrukcijom varijacione valne funkcije polarona kao što je to učinjeno u [10] i minimizacijom aproksimiranog varijacionog izraza za energiju, može se dobiti izraz (22) koristeći i formalizam II kvantizacije.

Na kraju navedimo izgled valne funkcije elektrona, kao i oblik deformacije rešetke

$$\Psi_{AD}(n) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\sqrt{2}\lambda^2}{J\omega}}\ sech[\frac{\lambda^2}{2J\omega}(n-n_0)]$$

$$x_n^0 = -\frac{\sqrt{2}\lambda}{\omega}(\Psi_{AD}(n))^2 \ .$$

Vidimo da polaron u području srednje veze ima složenu strukturu. Iz gornjih izraza lako je vidjeti da porast parametra J povećava efektivno protezanje deformacije rešetke nauštrb njezine amplitude. Porast parametra λ pak povećava amplitudu polarona, a smanjuje njegovo efektivno protezanje.

3.6 Troparametarska valna funkcija

3.6.1 Uvod

U literaturi postoji cijeli niz varijacionih valnih funkcija koje aproksimiraju polaronska stanja pridružena našem hamiltonijanu (1) od onih s jednim varijacionim parametrom [6], [10], preko onih s nekoliko [9], [10], do onih s velikim brojem parametara, npr. [11], [12]. Ovdje razvijena troparametarska varijaciona valna funkcija, treba odmah reći, ne pokriva istom kvalitetom aproksimacije cjelokupno parametarsko područje J, λ, koje je od našeg interesa. To se može objasniti njezinim relativno malim brojem parametara, kao i nekim drugim razlozima o kojima ćemo kasnije govoriti. No, njezina konstrukcija omogućuje relativno jednostavnu numeričku obradu, dok joj rezultati ipak ne zaostaju za većinom rezultata iz literature, ako već nisu bolji.

Radi čitljivosti teksta, ovu troparametarsku varijacionu valnu funkciju označavati ćemo kraticom: VV funkcija. Pridruženi izrazi i rezultati će u skladu s tim imati iste oznake.

3.6.2 Konstrukcija varijacione valne funkcije

Dinamička aproksimacija[13] zanemaruje procese u kojima se elektron giba unutar polarona. No, činjenica da se gibanje elektrona unutar polarona za područje srednje veze, ne može zanemariti [14], zahtijeva da poopćimo varijacionu valnu funkciju (19), ako želimo da nova konstrukcija bolje opisuje polarone i u tom području. Promotrimo valnu funkciju

$$\begin{aligned}
\Psi_{VV}(K) &= \frac{1}{Nor}\sum_j e^{iKaj}\ (\sum_l \eta_l\ c^\dagger_{j+l})\ \prod_n S_j(n) \mid 0 > \\
S_j(n) &= e^{\xi_n b_j^\dagger - \xi_n^* b_j} \\
\eta_l &= C\ G^{|l|}\ e^{iKla} \\
\xi_n &= A\ B^{|n|}\ e^{i\varphi na} \ .
\end{aligned} \tag{23}$$

Nor je normalizacijska konstanta. η_l i ξ_n su kompleksne funkcije indeksa l, n, pridružene lokalizaciji elektrona i fonona, redom[15]. Njihov općenit izbor dakako vrlo je raznolik, i zahtijeva u principu samo da η_l, ξ_n, trnu porastom svojih indeksa. Eksponencijalni oblik, kakav je ovdje za njih izabran, omogućava da se VV funkcija u granici

$$G \to 0 \qquad \eta_l \to \delta_{l,0} \ ,$$

[13] Vidjeti poglavlje 3.4, Dinamička aproksimacija.
[14] Vidjeti poglavlje 3.5, Adijabatska aproksimacija.
[15] Sličnu varijacionu polaronsku valnu funkciju prvi je predložio Y. Toyozawa [13].

svede na dinamičku aproksimaciju (19). Time je onda osigurano da VV funkcija jednako dobro, ili bolje od (19), aproksimira fonone u području slabe i jake veze. Nadalje, ovaj izbor prilagođen je i adijabatskoj aproksimaciji. Može se naime lako pokazati da uvjet (21) za $K = 0$ odgovara jednakosti

$$B = G^2 \ . \tag{24}$$

Uvjet normalizacije elektrona

$$\sum_n \eta_n^* \, \eta_n = C^2 \frac{1+G^2}{1-G^2} = 1 \ ,$$

povezuje C i G, dok uvjet (4) to čini s A i B[16]

$$A \frac{1-B^2}{1-2B\cos\varphi + B^2} = -\lambda/\omega \ .$$

VV funkcija stoga je funkcija triju varijacionih parametara

$$0 \leq G < 1 \ , \qquad 0 \leq B < 1 \ , \qquad 0 \leq \varphi < 2\pi \ ,$$

a pridružena joj varijaciona metoda troparametarska. Svakoj točki parametarskog prostora J, λ, K, odgovara jedno rješenje u faznom prostoru G, B, φ[17]. No, za razliku od parametarskog prostora J, λ, K, fazni prostor G, B, φ, je ograničen na konačni volumen.

3.6.3 Deformacija rešetke

Ako izraz (23) prepišemo uz slijedeće supstitucije, $j' = j + l$, $n' = n - l$, dobivamo

$$\Psi_{VV}(K) = \frac{1}{Nor} \sum_{j'} e^{iKaj'} c_{j'}^\dagger \sum_l C \, G^{|l|} \prod_{n'} S_{j'+n'}(n'+l) \mid 0 > \ . \tag{25}$$

Sada razliku između (19) i VV funkcije možemo shvaćati i na slijedeći način. VV funkciju smo u (25) transformirali u oblik u kojem lako prepoznajemo ravni val elektrona s pridruženom mu deformacijom rešetke kojoj je on u centru. Ta deformacija dana je za elektron u ishodištu fononskom valnom funkcijom

$$\Psi_{VV,fn} = \sum_l C \, G^{|l|} \prod_n S_n(n+l) \mid 0 > ,$$

u slučaju VV funkcije, odnosno s

$$\Psi_{D,fn} = \prod_n S_n(n) \mid 0 > ,$$

u slučaju dinamičke aproksimacije (19). Primijetimo da je fononska valna funkcija za dinamičku aproksimaciju pridružena svakom čvoru n opisana koherentnim stanjem, odnosno da je odgovarajuća deformacija rešetke gausijanska[18]. VV funkcija pak deformaciju rešetke opisuje superpozicijom većeg broja ($\lim_{l\to\infty} G^{|l|} = 0$) koherentnih stanja, tj. opisuje negausijansku deformaciju. No, kako taj varijacioni oblik i ta negausijanska deformacija nisu u potpunosti općeniti, postoji odstupanje rezultata VV funkcije od idealnih vrijednosti.

Na slici 4 prikazana je fononska valna funkcija pridružena čvoru $n = 0$ rešetke u prostornoj reprezentaciji, i to za dinamičku aproksimaciju i VV funkciju

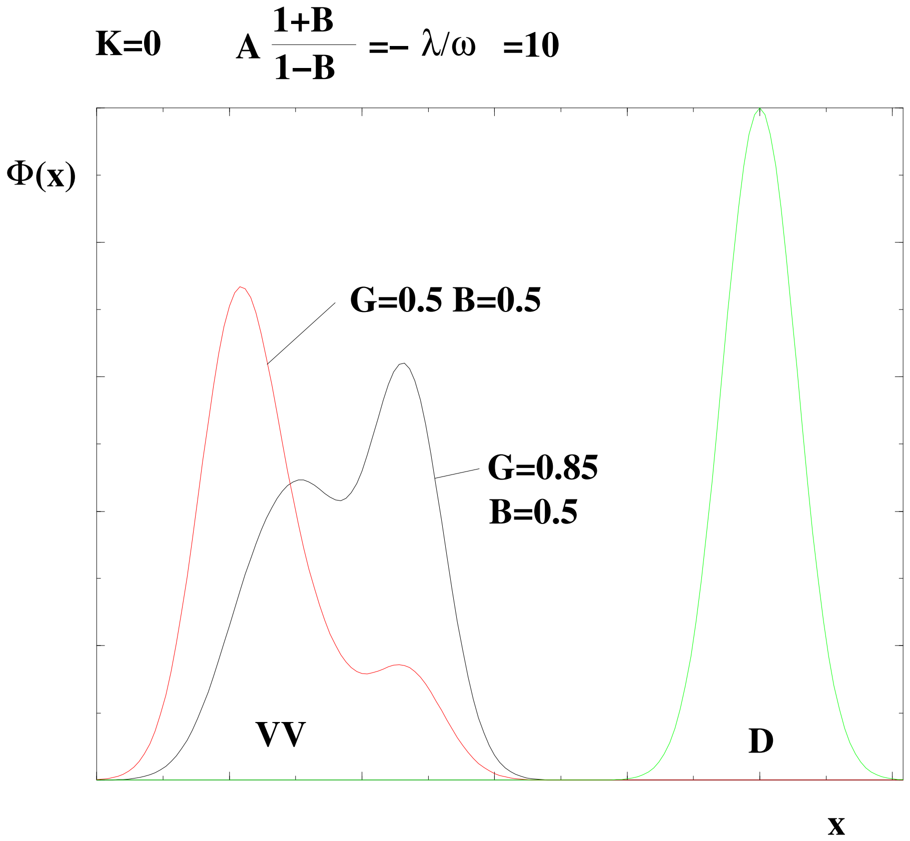
$$\begin{aligned} \Phi_D(x) &= S_0 \mid 0 > \\ \Phi_{VV}(x) &= \sum_l C \, G^{|l|} S_0(l) \mid 0 > \ . \end{aligned}$$

[16] Vidjeti izraz (35) u dodatku G, i (36) u dodatku C.

[17] Iznimno, točke parametarskog prostora J, λ, K, koje su pridružene prijelazima, a o kojima govorimo u nastavku, odgovaraju paru rješenja u faznom prostoru G, B, φ.

[18] Pojam gausijanske deformacije rešetke objašnjen je u dodatku B.

Prikazana fononska valna funkcija pridružena dinamičkoj aproksimaciji ovisno o parametrima J, λ, mijenja svoje efektivno protezanje i amplitudu, ali uvijek ostaje gaussijan. Nasuprot toga, vidimo da fononska valna funkcija pridružena VV funkciji promjenom parametara J, λ, odnosno promjenom varijacionih parametara G, B, osim promjene efektivnog protezanja i amplitude, znatno mijenja i oblik.

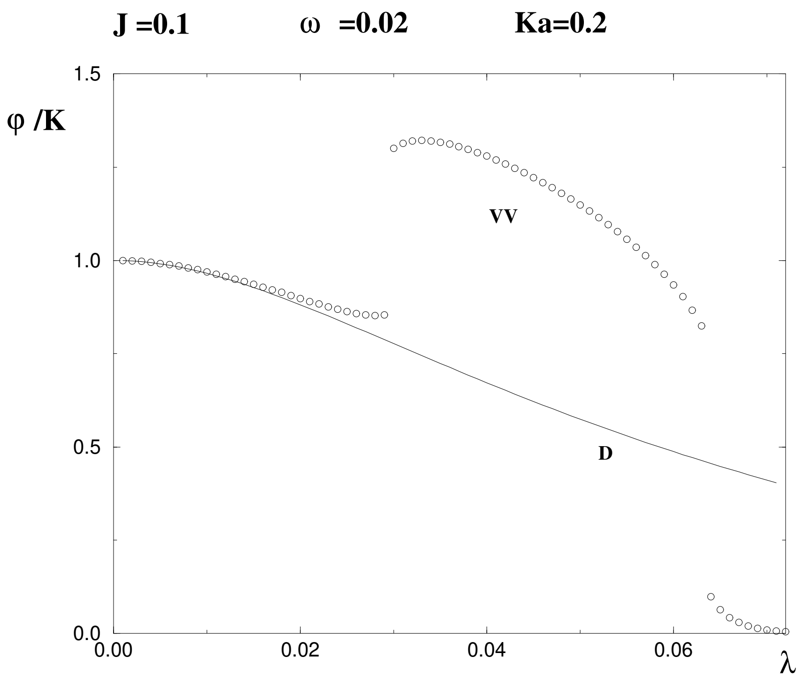


Slika 4: Prikaz fononskih valnih funkcija $\Phi_D(x), \Phi_{VV}(x)$, u koordinatnoj reprezentaciji.

3.6.4 Minimizacija varijacionog izraza za energiju

Varijacioni izraz za energiju $E(G,B,\varphi)$[19] je kompleksna funkcija čiji minimum možemo odrediti samo numeričkim putem. Pažljiva analiza hiperpovršine energije u ovisnosti o G,B,φ, u mnogočemu nam olakšava numeričku obaradu, te objašnjava neka svojstva dobivenih rješenja.

Na slici 5 prikazan je φ za koji je $E(G,B,\varphi)$ u minimumu u ovisnosti o λ. To je učinjeno za VV metodu i dinamičku aproksimaciju u kojoj je φ tretiran kao varijacioni parameter (oznaka Dk). Prvoj su pridruženi kružići, a drugoj puna linija. Kako se pokazuje da omjer φ/K u obje metode malo ovisi o K, ordinata je radije pridružena tom omjeru, nego apsolutnoj vrijednosti φ. Za $\lambda \geq 0.072$ (desni rub slike) je $B_D = 0$, pa φ_D nije definiran. Točka u kojoj je puna linija prekinuta, odgovara prijelazu o kojem se govori u 3.4.3. Što se tiče VV funkcije, primjećujemo prvo da ona u području srednje veze ima dva prijelaza. O njima ćemo detaljnije govoriti nešto kasnije. U području slabe veze, zbog $\Psi_{VV} \approx \Psi_D$ vrijedi $\varphi_{VV} \approx \varphi_D$, dok u području jake veze, potpunom lokalizaciom polarona, $\varphi_{VV} \to 0$.



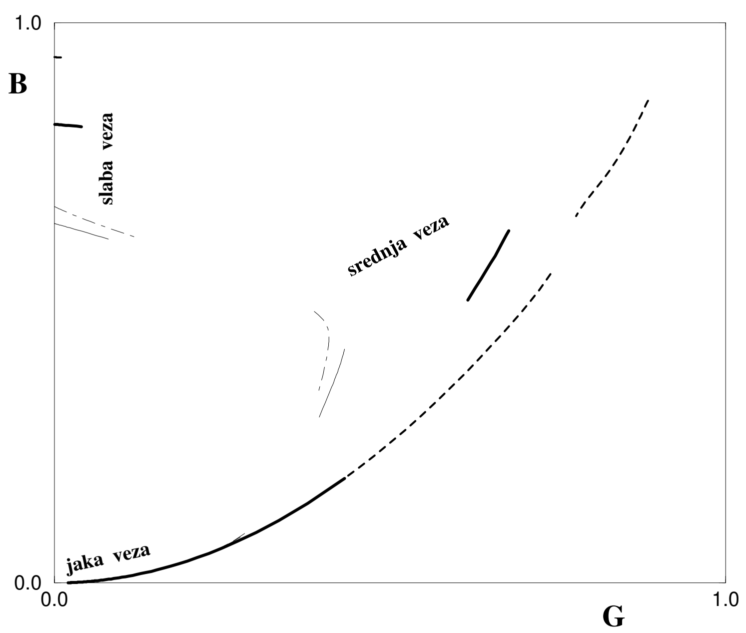
Slika 5: Ovisnost vrijednosti varijacionog parametra φ, za koje je su varijacione energije E_{VV} i E_{Dk} u minimumu, o λ.

Pojavu dvaju prijelaza VV funkcije vidi se i u pozicijama minimuma varijacionog izraza za energiju u G,B, parametarskom podprostoru, za razne vrijednosti λ (slika 6). U području slabe veze $G \to 0$, odnosno $\Psi_{VV} \to \Psi_D$. Od područja jake veze prema području srednje veze, B,G zadovoljavaju relaciju (24).

Prijelazi nagovješćuju da VV funkcija, u području srednje veze kada se oni događaju, nije najuspiješnija u aproksimiranju polarona. Pogledajmo na slikama kako izgleda energetska površina u blizini kritičnog skupa $J,\lambda,K=\varphi=0$, parametara za koji dolazi do prijelaza. Slika 7 je perspektivna projekcija $E_{VV}(G,B,\varphi=0)$ površine, dok je slika 8 njezin prikaz pomoću izohipsi. Obje slike prikazuju samo one točke energetske plohe čije su vrijednosti bliske vrijednosti apsolutnog minimuma.

Vidimo da za cijeli niz vrijednosti G,B, energija $E_{VV}(G,B)$ ima približno vrijednost apsolutnog minimuma. Na jednom kraju "jarka" nalazi se lokalni minimum, a na drugom kraju apsolutni. Međutim, porastom parametra λ, lokalni minimum za neko λ kritično, postaje apsolutni[20].

[19] Detaljni izvod varijacionog izraza za energiju VV funkcije dat je u dodatku C.
[20] Analognu situaciju imali smo u dinamičkoj aproksimaciji, vidjeti 3.4.3.

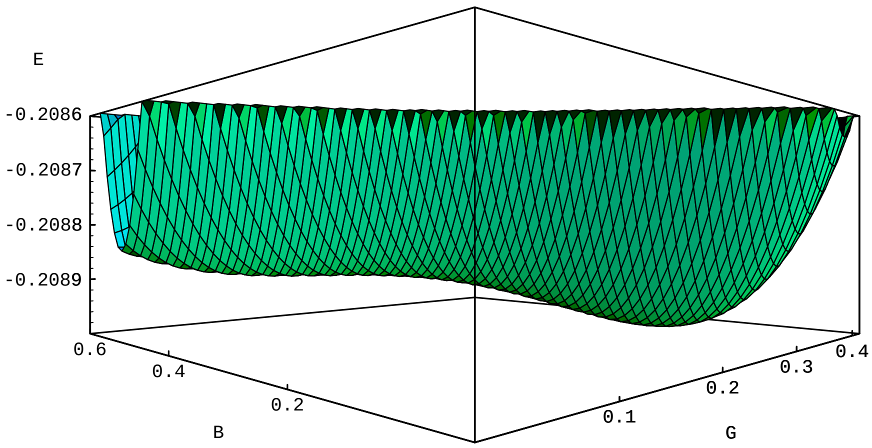


vrsta linije	J	Ka
tanka puna linija	$J = 0.1$	$Ka = 0$
točka crtica linija	$J = 0.1$	$Ka = 0.2$
debela puna linija	$J = 0.5$	$Ka = 0$
crtkana linija	$J = 5$	$Ka = 0$

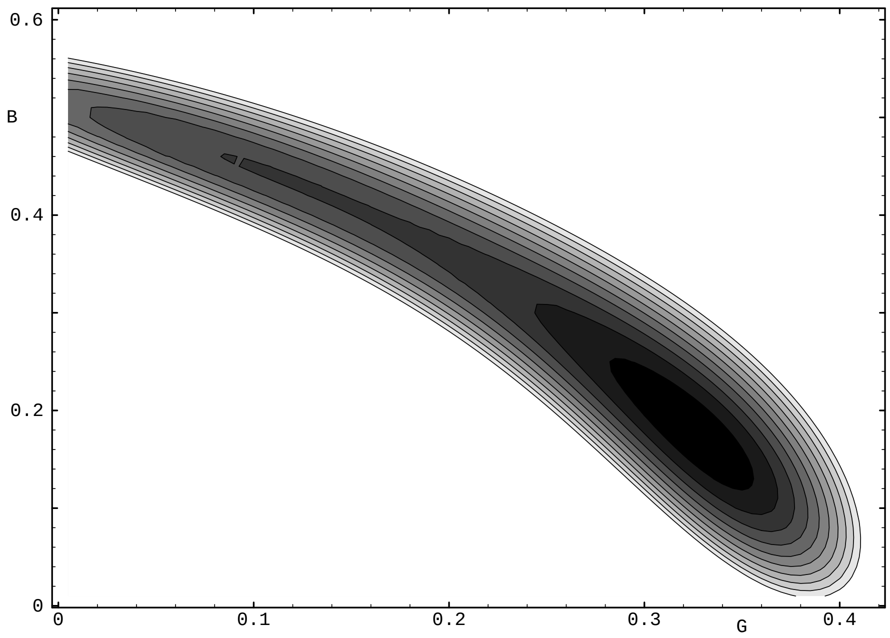
Slika 6: Kretanje minimuma varijacionog izraza za energiju E_{VV} u G, B, parametarskom podprostoru. λ je parametar.

Nepostojanje jasnog minimuma varijacionog izraza za energiju u nekim područjima J, λ, parametarskog prostora, upozorava da varijaciona valna funkcija nije dovoljno dobro prilagođena tom području[21]. Drugim riječima, posredno, analizom hiperpovršine varijacionog izraza za energiju, u odsustvu rezultata drugih metoda, može se proučavati valjanost varijacione valne funkcije.

[21] Obrnuto dakako općenito ne vrijedi.



Slika 7: Perspektivna projekcija $E_{VV}(G, B, \varphi = 0)$ površine u blizini kritičnog skupa parametara $J, \lambda, K = \varphi = 0,$ za koji dolazi do prijelaza.



Slika 8: Prikaz $E_{VV}(G, B, \varphi = 0)$ površine u blizini kritičnog skupa parametara $J, \lambda, K = \varphi = 0,$ za koji dolazi do prijelaza, pomoću izohipsi.

3.7 Numerička metoda

3.7.1 Uvod

U ovom poglavlju ukratko ćemo promotriti numeričku metodu koju je razvio I. Batistić [14]. Ona je kombinacija varijacione metode i eksplicitne dijagonalizacije matrice. U prvom koraku, konstruira se ortonormirani skup stanja elektron-fonon sistema s kojima je aproksimiran određeni podprostor Hilbertovog prostora stanja. Na taj podprostor, nazovimo ga $\aleph$, projecira se onda hamiltonijan (2), odnosno izračuna se odgovarajuća hermitska blok matrica. U drugom koraku, koristeći Lanczosev algoritam [15], [16], pronalazi se najniža svojstvena vrijednost i svojstveni vektor te matrice, odnosno dobivaju se približne vrijednosti za energiju i valnu funkciju polarona.

3.7.2 Primjena numeričke metode na slučaj harmoničkog oscilatora u konstantnom vanjskom polju

Prije nego što primjenimo numeričku metodu na hamiltonijan (2), pogledajmo njezino ponašanje na jednostavnom primjeru harmoničkog oscilatora u konstantnom vanjskom polju ($\omega = 1$)

$$H = b^\dagger b + \lambda(b^\dagger + b) \; .$$

Analitičnost problema[22] omogučava nam idealnu analizu rezultata. Izraze i rezultate pridružene numeričkoj metodi označmo s indeksom NH, dok one pridružene analitičkom rješenju, označimo s indeksom AH. Oznaka za valnu funkciju harmoničkog oscilatora kada je $\lambda = 0$ u stanju n neka bude: $\mid n >$.

Razna stanja $\mid n >$ međusobno su povezana izrazom

$$H \mid n >= n \mid n > + \lambda \left(\sqrt{n+1} \mid n+1 > + \sqrt{n} \mid n-1 > \right) .$$

Za vektore baze potprostora $\aleph$, uzmimo prvih sto stanja ($n < 100$), te na njega projecirajmo hamiltonijan H. Kao rezultat dobivamo matricu H_{NH}, dimenzije 100×100:

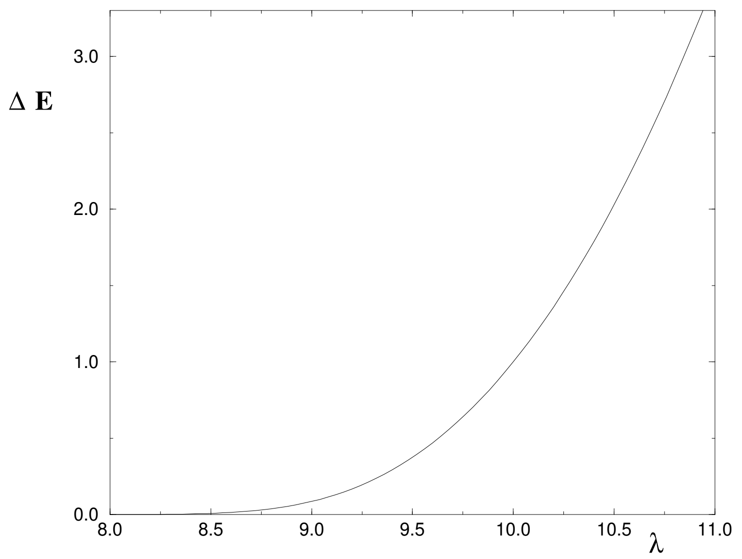
$$H_{NH} = \begin{bmatrix} 0 & \lambda & 0 & & & & & & & \\ \lambda & 1 & \lambda\sqrt{2} & & & & & & & \\ 0 & \lambda\sqrt{2} & 2 & \cdot & & & & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & & & & & \\ & & \cdot & n-1 & \lambda\sqrt{n} & 0 & & & & \\ & & & \lambda\sqrt{n} & n & \lambda\sqrt{n+1} & & & & \\ & & & 0 & \lambda\sqrt{n+1} & n+1 & \cdot & & & \\ & & & & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & & & & \cdot & 97 & \lambda\sqrt{98} & 0 \\ & & & & & & & \lambda\sqrt{98} & 98 & \lambda\sqrt{99} \\ & & & & & & & 0 & \lambda\sqrt{99} & 99 \end{bmatrix}$$

Lanczosevim algoritmom izračunamo njezino osnovno stanje i pripadajuću mu energiju E_{NH}. Na slici 9 može se vidjeti razlika između ovako dobivene energije i njezine točne vrijednosti, $\Delta E(\lambda) = E_{NH} - E_{AH} = E_{NH} + \lambda^2$, u ovisnosti o λ. Vidimo da se E_{NH} i E_{AH} počinju međusobno razlikovati tek od neke kritične vrijednosti $\lambda \approx 8.2$. Za niže vrijednosti λ, numerička metoda praktički daje točan opis osnovnog stanja hamiltonijana H. Uzrok tome leži u odabiru baze potprostora $\aleph$. Naime, ako na slici 10 pogledamo koeficijente $a_{AH}(m)$ točne valne funkcije u okolici kritične vrijednosti λ

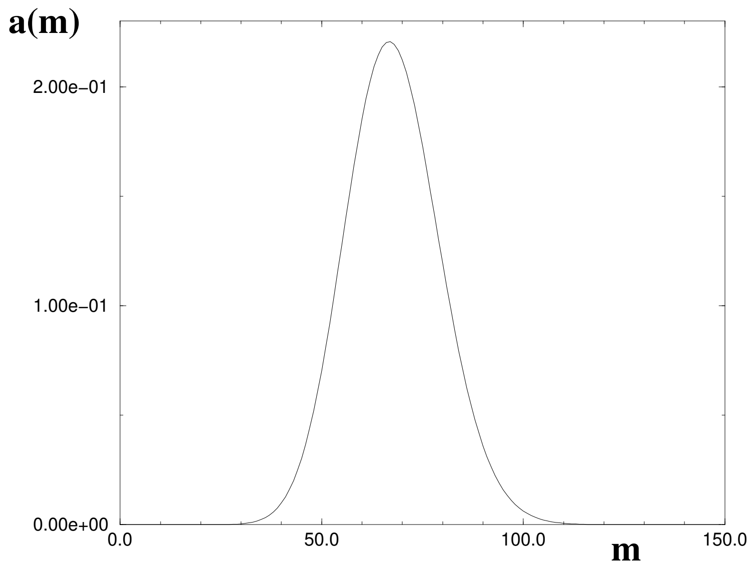
$$\Psi_{AH} = \sum_{m=0}^{\infty} a_{AH}(m) \mid m >= e^{-\lambda^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\lambda^m}{\sqrt{m!}} \mid m > \quad \Longrightarrow \quad a_{AH}(m) = e^{-\lambda^2/2} \frac{\lambda^m}{\sqrt{m!}} \, ,$$

vidimo da po prilici vrijedi $a(m) \neq 0$ za m koji leži u području $20 < m < 120$. Razlika između E_{NH} i E_{AH} poslijedica je manjka viših pobuđenih stanja $\mid m >$, gdje je $m > 99$, u bazi potprostora $\aleph$. Ovo se posebno za vrijednost $\lambda = 8.2$ može ispraviti uzimanjem u obzir stanja $99 < m < 120$, a zanemarivanjem nepotrebnih stanja $m < 20$. U ovom slučaju onda, broj vektora baze je ostao nepromijenjen.

[22] Analitičko rješenje i svi pripadajući izrazi dani su u dodatku B. Treba samo primjetiti da je $H \equiv H_j$.



Slika 9: Odstupanje energije E_{NH} od točne analitičke vrijednosti E_{AH}. Područje $\lambda < 8$ nije prikazano, pošto u njemu praktički vrijedi $E_{NH} = E_{AH}$.



Slika 10: Vrijednost koeficijenata $a_{AH}(m)$ u okolici kritične vrijednosti λ.

3.7.3 Korištenje numeričke metode u pronalaženju osnovnog stanja Holsteinovog hamiltonijana

Definirajmo vektor baze potprostora $\aleph$, odnosno valnu funkciju pridruženu nekom stanju elektron-rešetka sistema na translaciono invarjantan način

$$| n_0, n_1, n_{-1}, .., n_m, .. >_K = 1/\sqrt{N} \sum_j e^{iKaj}\ c_j^\dagger \prod_m \frac{(b_{j+m}^\dagger)^{n_m}}{\sqrt{n_m!}}\ | 0 > ,$$

gdje su $n_m \geq 0$ cijeli brojevi. Gornji izraz opisuje stanje sistema s valnim vektorom k u kojem na čvoru m udaljenom od elektrona postoji n_m fonona. Tako npr.

$$| 3, 1, 0, ... >_K$$

označava da na čvoru na kojem se nalazi elektron imamo tri fonona, da na prvom desnom i lijevom čvoru imamo jedan i nula fonona redom, itd. Da se radi o vektorima ortonomirane baze vidi se iz činjenice da su dva stanja sistema ista samo ako su im svi n_m, K, isti, točnije

$$_{K'} < n_0', n_1', n_{-1}', .., n_m', .. | n_0, n_1, n_{-1}, .., n_m, .. >_K = \sum_m \delta_{n_m, n_m'}\ \delta_{K,K'} \ .$$

Pri određenom izboru parametara $J, \lambda,$ čini se opravdanim primjetiti da valnoj funkciji polarona ne pridonose sva ova stanja jednako. U ekstremnom primjeru, kada je $\lambda = 0$, osnovno stanje našeg hamiltonijana je jednostavno bezfononsko s elektronom u stanju K. Točno bi taj rezultat dobili primjenom numeričke metode i kada bi našu bazu sveli samo na jedno, ovo banalno stanje, koje je ujedno traženo rješenje. Proširujući ovakvo razmišljanje[23] na složenije primjere, mogu se na temelju očekivanog oblika rješenja, dobivenog npr. nekom drugom metodom, ili proučavanjem rezultata ove numeričke, iz baze izbaciti ona stanja za koja se ne očekuje da će doprinjeti rješenju. Tako npr, ako je ukupni očekivani prosječni broj fonona reda veličine 10^3, logično je iz baze izbaciti ona stanja čiji je broj fonona reda veličine 10 i manji, ili ona stanja čiji je broj fonona reda veličine 10^5, ili veći. Ako je pak očekivano efektivno protezanje polarona 5 čvorova, također se čini opravdanim izbaciti iz baze ona stanja koja sadrže fonone na daljinama većim od recimo 10^2.

Ovu redukciju baze Hilbertovog prostora na konačan skup stanja treba višestruko provjeriti. Svako stanje doprinosi ukupnoj valnoj funkciji polarona s određenom amplitudom. Ako se te amplitude ne mijenjaju bitno proširenjem baze Hilbertovog prostora, može se zaključiti da stanja koja smo uključili ne doprinose bitno ukupnoj valnoj funkciji polarona, pa se mogu i zanemariti.

Razna $| n_0, n_1, n_{-1}, ..., n_m, .. >$ stanja[24] povezana su slijedećom relacijom

$$\begin{aligned}
H | n_0, n_1, n_{-1}, .., n_m, .. > &= -J(e^{-iKa} | n_1, n_2, n_0, .., n_{m+1}, .. > \\
&\quad + e^{iKa} | n_{-1}, n_0, n_{-2}, .., n_{m-1}, .. >) \\
&+ \omega\, (\sum_m n_m) | n_0, n_1, n_{-1}, .., n_m, .. > \\
&+ \lambda\, (\sqrt{n_0+1} | n_0+1, n_1, n_{-1}, .., n_m, .. > \\
&\quad + \sqrt{n_0} | n_0-1, n_1, n_{-1}, .., n_m, .. >) \ ,
\end{aligned}$$

pomoću koje iz jednog vektora baze potprostora $\aleph$ produciramo druge. Počnimo za ilustraciju produkciju bezfonoskim stanjem

$$\begin{aligned}
H | 0, 0, 0, .., 0, .. > &= -2J \cos Ka\ \ | 0, 0, 0, .., 0, .. > + \lambda | 1, 0, 0, .., 0, .. > \\
H | 1, 0, 0, .., 0, .. > &= -J\, (e^{-iKa}\ \ | 0, 0, 1, .., 0, .. > + e^{iKa}\ \ | 0, 1, 0, .., 0, .. >) \\
&+ \omega\, | 1, 0, 0, .., 0, .. > \\
&+ \lambda\, (\sqrt{2}\ \ | 2, 0, 0, .., 0, .. > + | 0, 0, 0, .., 0, .. >) \\
H | 2, 0, 0, .., 0, .. > &= .... \\
H | 0, 1, 0, .., 0, .. > &= .... \\
H | 0, 0, 1, .., 0, .. > &= .... \ .
\end{aligned}$$

[23] Ovoj raspravi analogna je ona na istu temu iz poglavlja 3.7.2.

[24] Pošto polaronu s valnim vektorom K doprinose samo $| n_0, n_1, n_{-1}, ..., n_m, .. >$ stanja s istim valnim vektorom, indeks K ne treba eksplicitno pisati. Podrazumijeva se da vektori baze poprostora $\aleph$ imaju isti K.

U prvoj generaciji produciran je $| 1,0,0,..,0,.. >$, u drugoj $| 2,0,0,..,0,.. >$, $| 0,1,0,..,0,.. >$, $| 0,0,1,..,0,.. >$, itd. Svaka generacija generira neka nova stanja. Produkciju možemo zaustaviti po više kriterija, ograničenjem ukupnog broja vektora baze, ograničenjem maksimalne udaljenosti fonona od elektrona, maksimalnim ukupnim brojem fonona unutar polarona, ili njegovim ograničenjem po jednom čvoru...

Projekcija hamiltonijana na podprostor čiju bazu čine gornjih pet stanja daje matricu:

$$\begin{bmatrix} -2J\cos Ka & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \omega & -Je^{-iKa} & -Je^{Ka} & \lambda\sqrt{2} \\ 0 & -Je^{iKa} & \omega & 0 & 0 \\ 0 & -Je^{-iKa} & 0 & \omega & 0 \\ 0 & \lambda\sqrt{2} & 0 & 0 & 2\omega \end{bmatrix}$$

U praksi, dakako, dimenzija matrice mora biti mnogo veća od pet da bi se dobili upotrebljivi rezultati.

Tako rezultati izneseni u ovom radu dobiveni su korištenjem baze od cca 10^6 stanja. Unatoč ovako velikom broju stanja koji su ozeti u obzir, dobiveni rezultati nisu dobri za jako veliki λ i J. Veliki λ i J zahtijevaju stanja s većim brojem fonona i njihovim većim efektivnim prostiranjem, a to nije bilo moguće ostvariti na računalima koja su nam stajala na raspolaganju (memorija=128 Mb).

4 Rezultati

4.1 Uvod

Na stranicama koje slijede usporedit ćemo međusobno rezultate raznih metoda koje smo u ovom radu teoretski obradili. Svaku ćemo označit s nekim drugim indeksom radi lakšeg snalaženja

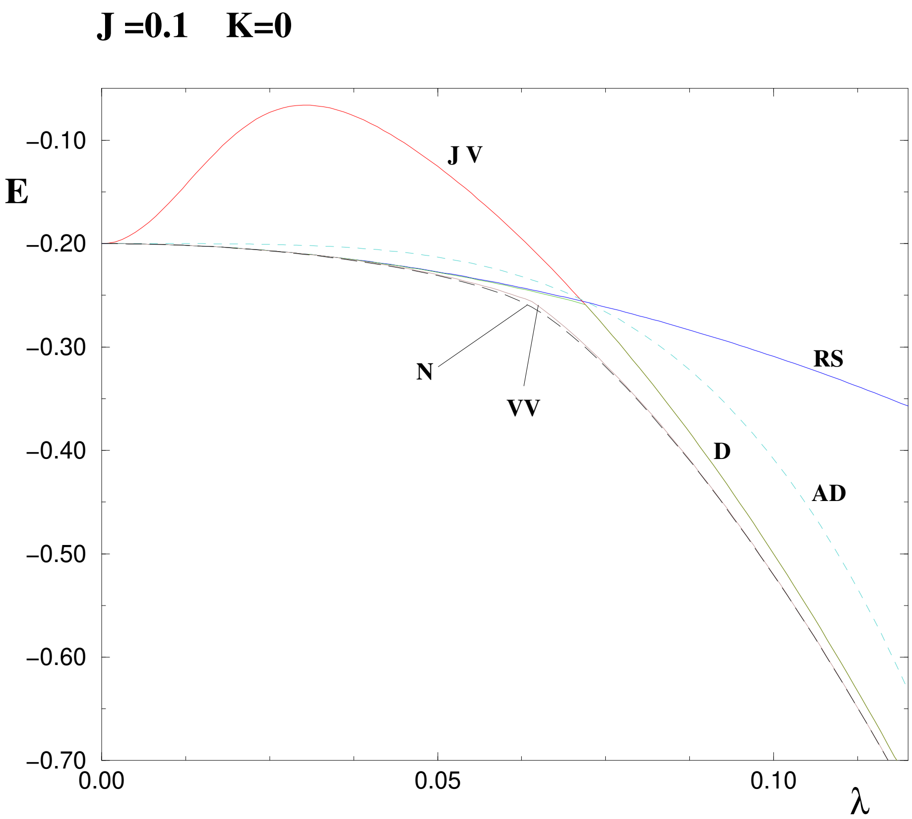
indeks	metoda	poglavlje
RS	račun smetnje za slabu vezu	3.2
JV	varijaciona metoda za jaku vezu	3.3
D	dinamička aproksimacija	3.4
AD	Holsteinovo rješenje	3.5
VV	varijaciona metoda s tri parametra	3.6
N	numerička metoda	3.7

.

Vrijednost parametra ω pri obradi rezultata uvijek je bila ista, pa je nećemo eksplicitno pisati: $\omega = 0.02$.

4.2 Energija polarona impulsa $K = 0$

Na slici 11, prikazana je energija polarona impulsa $K = 0$ u ovisnosti o λ. Neka opća ponašanja



Slika 11: Energija polarona u ovisnosti o λ, $J = 0.1$, $K = 0$.

rezultata za energiju prikazanih metoda možemo već sada komentati iz slike 11. U području slabe veze, rezultati dinamičke aproksimacije, VV funkcije i numeričke metode, smanjenjem λ, teže rezultatima računa smetnje (u točki $\lambda = 0$, $E(\lambda = 0) = -2J$, se podudaraju). U području jake veze, dinamička aproksimacija se podudara s varijacionom valnom funkcijom za jaku vezu (JV).

Lokalizacijom polarona za veliki λ, rezultati VV funkcije i numeričke metode se asimptotski približavaju rezultatima dinamičke aproksimacije. U području srednje veze, VV funkcija nešto slabijom kvalitetom prati rezultate numeričke metode.

Holsteinovo rješenje (AD) u ovom području parametarskog prostora, zbog malog efektivnog protezanja polarona, ne može se smatrati relevantnim[25].

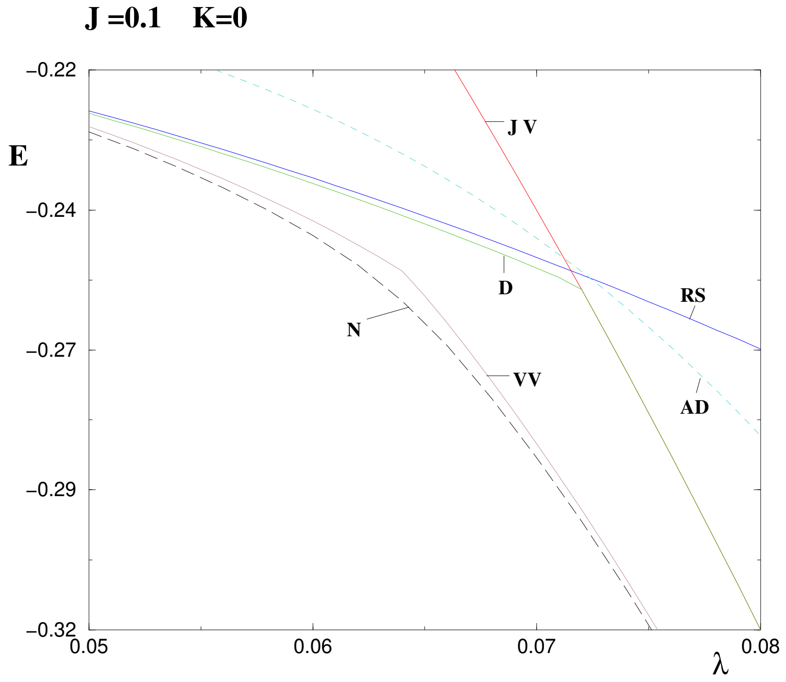
Prijelaz dinamičke aproksimacije te drugi prijelaz VV funkcije dobro su vidljivi ako uvećamo detalj sa slike 11. Tada, što se vidi na slici 12, oni odgovaraju točkama u kojima krivulje spomenutih metoda imaju lom, tj. skok u derivaciji po λ.

Povećanje parametra J, unosi tek manje promjene u sadržaj gornje rasprave. Na slici 13, vidimo da Holsteinovo rješenje, u području srednje veze, daje bolje rezultate, nego što je to bio slučaj za $J = 0.1$. Također se može primjetiti da VV funkcija u desnom kraju slike daje malo nižu energiju od numeričke metode. To je znak da se ograničenja, npr. ukupnog broja fonona unutar polarona, koja smo koristili pri izboru baze potprostora $\aleph$, počinju osjećati[26].

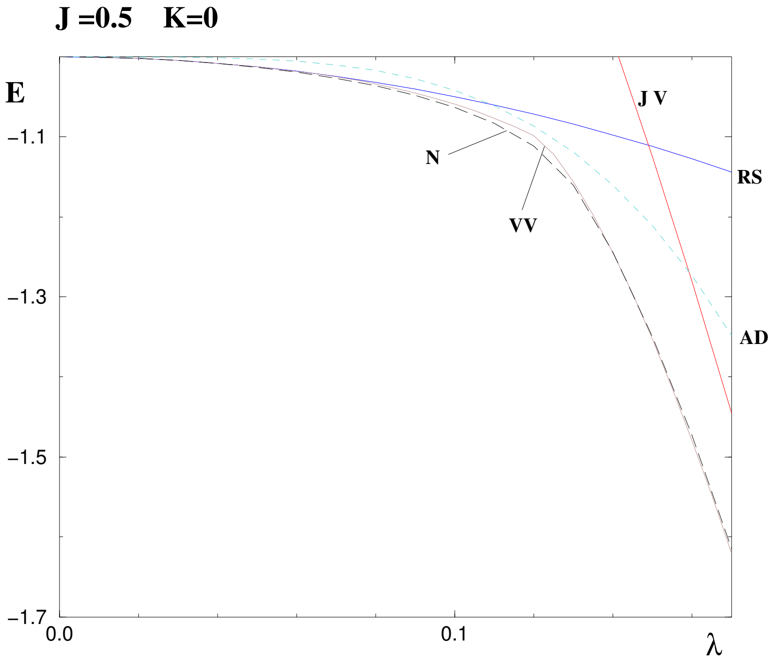
Veća vrijednost λ još više potencira spomenuto ponašanje numeričke metode. To se dobro vidi na slici 14 gdje ona daje valjane rezultate samo u području slabe veze.

Za ovako veliku vrijednost J, efektivno protezanje polarona dostiže i više desetaka kontanti rešetke. Poslijedica toga je da u području valjanosti adijabatske aproksimacije postoje polaroni s velikim efektivnim protezanjem koji su najbolje opisani Holsteinovim rješenjem. To smo ilustrirali slikom 15 koja prikazuje detalj slike 14 za $0.2 < \lambda < 0.5$. Vidimo da unutar područja za koje je $0.25 \leq \lambda \leq 0.36$, Holsteinovo rješenje naspram ostalih metoda daje najnižu energiju polarona.

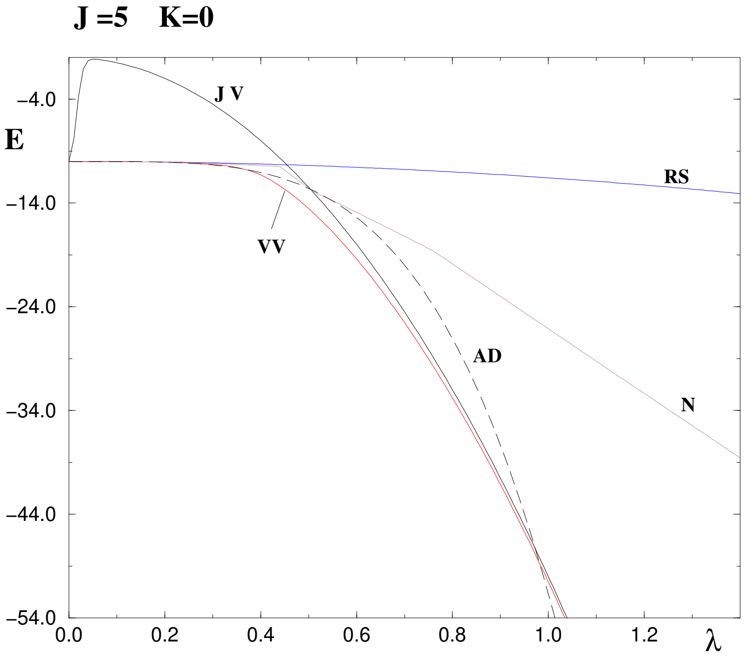
[25] Vidjeti 3.5.1.
[26] Vidjeti 3.7.3.



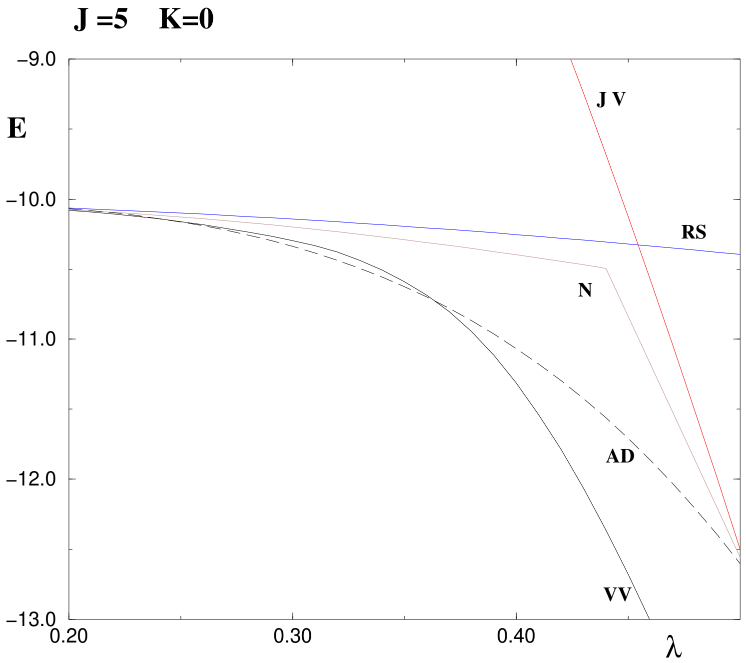
Slika 12: Energija polarona u ovisnosti o λ, $J = 0.1$, $K = 0$, detalj.



Slika 13: Energija polarona u ovisnosti o λ, $J = 0.5$, $K = 0$.



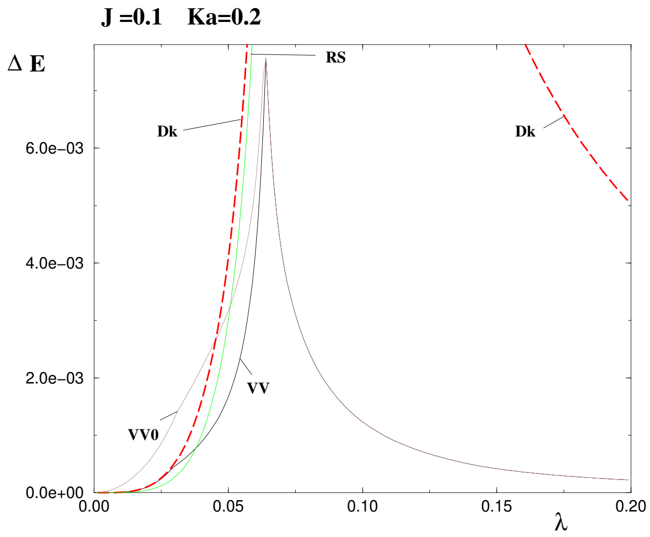
Slika 14: Energija polarona u ovisnosti o λ, $J = 5$, $K = 0$.



Slika 15: Energija polarona u ovisnosti o λ, $J = 5$, $K = 0$, detalj.

4.3 Energija polarona impulsa $K \neq 0$

Slika 16 ilustrira djelovanje varijacionog parametra φ na ponašanje VV funkcije. S VV0 označena je energija polarona koju dobivamo s VV funkcijom u kojoj φ nije tretiran kao varijacioni parametar[27], već je uvršteno $\varphi = 0$. Nasuprot toga, s Dk je označena dinamička aprokcimacija u kojoj je φ tretiran kao varijacioni parametar, a ne kao konstanta $\varphi = K$[28]. Svi rezultati dani su u odnosu na numeričku metodu, odnosno dani su kao razlika između energije prikazane metode i energije numeričke metode. Tako npr. VV funkciji pridružen je graf: $\Delta E_{VV} = E_{VV} - E_N$.



Slika 16: Utjecaj varijacionog parametra φ na minimum varijacione energije.

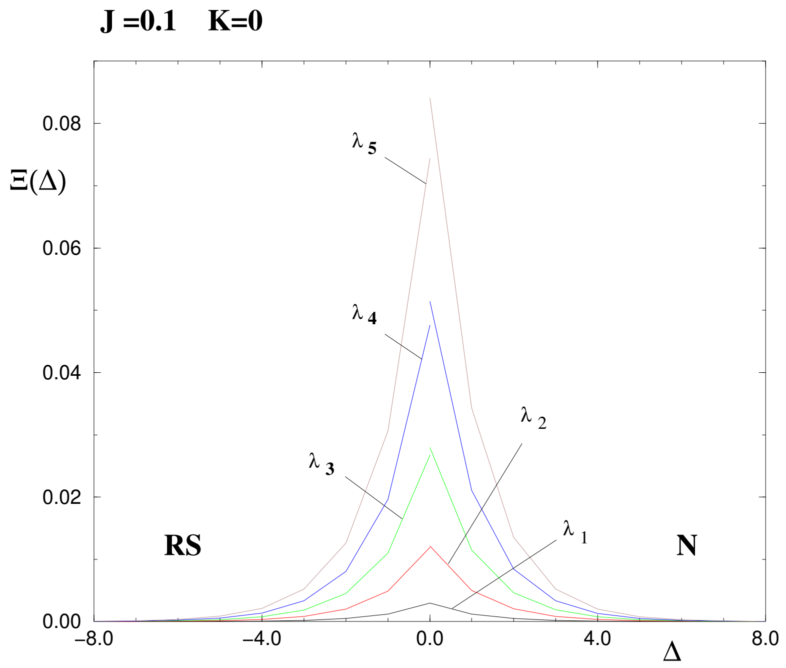
4.4 Deformacija rešetke

Deformaciju rešetke opisuje korelaciona funkcija (11). Njezino ponašanje za neke metode prikazat ćemo na slijedećim slikama.

Usporedimo najprije rezultate računa smetnje, slika 17, s rezultatima numeričke metode. Računu smetnje pridružena je lijeva strana grafa, a numeričkoj metodi desna[29]. Na slici 18 uspoređeni su rezultati u slučaju VV varijacione valne funkcije s rezultatima numeričke metode. Između λ_1 i λ_2 nalazi se prvi prijelaz VV funkcije, a između λ_7 i λ_8 je drugi prijelaz. U području slabe veze, $\lambda < \lambda_1$, VV funkcija daje slične rezultate za korelacionu funkciju (11) kao i numerička metoda. Isto vrijedi i u području jake veze, $\lambda > \lambda_8$, u kojem dolazi dolazi do lokalizacije polarona. Primjetimo da je efektivno protezanje polarona već za λ_8 manje od onog za λ_7 prema rezultatima obiju metoda.

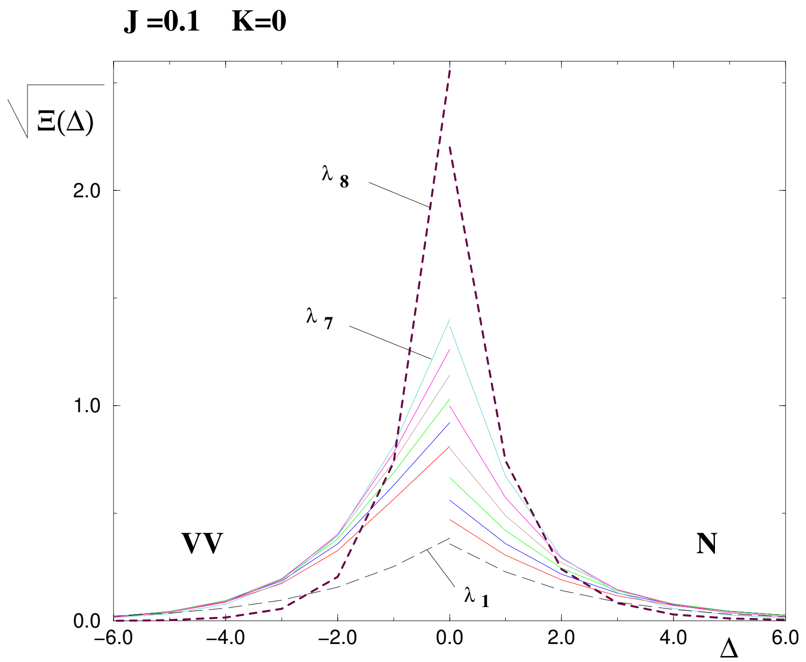
Zgodno je još pogledati ponašanje korelacione funkcije u ovisnosti o J, slika 19, i K, slika 20. Neka nam za to posluže rezultati VV funkcije. Vidimo da J povećava efektivno protezanje polarona nauštrb njegove amplitude. Porast parametra K pak, doprinosi povećanju amplitude i efektivnog protezanja polarona.

[27] Vidjeti izraz (23).
[28] Vidjeti izraz (19).
[29] Korelaciona funkcija je simetrična u odnosu na ishodište, vidjeti 3.4.4.



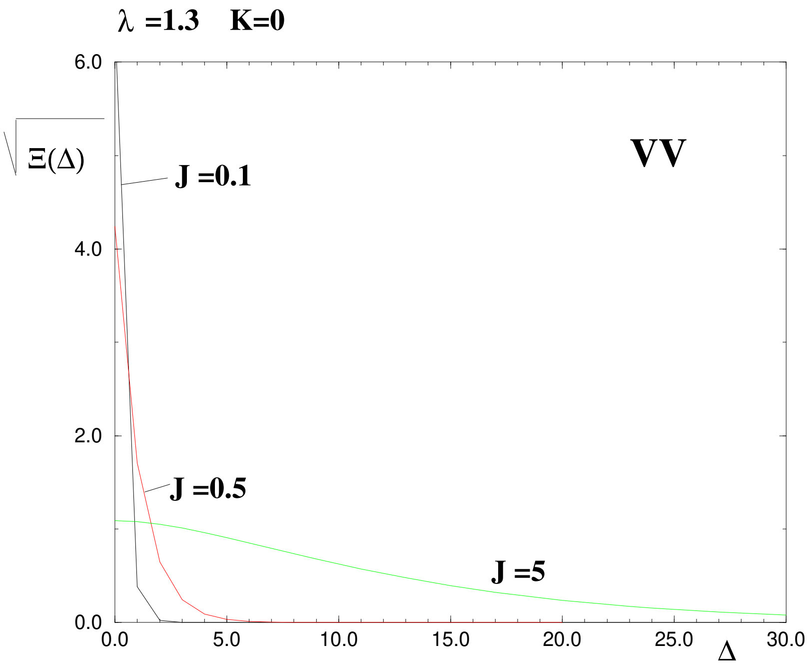
$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + 0.005 \quad , \quad \lambda_1 = 0.005$$

Slika 17: Usporedba korelacione funkcije za račun smetnje i numeričku metodu.

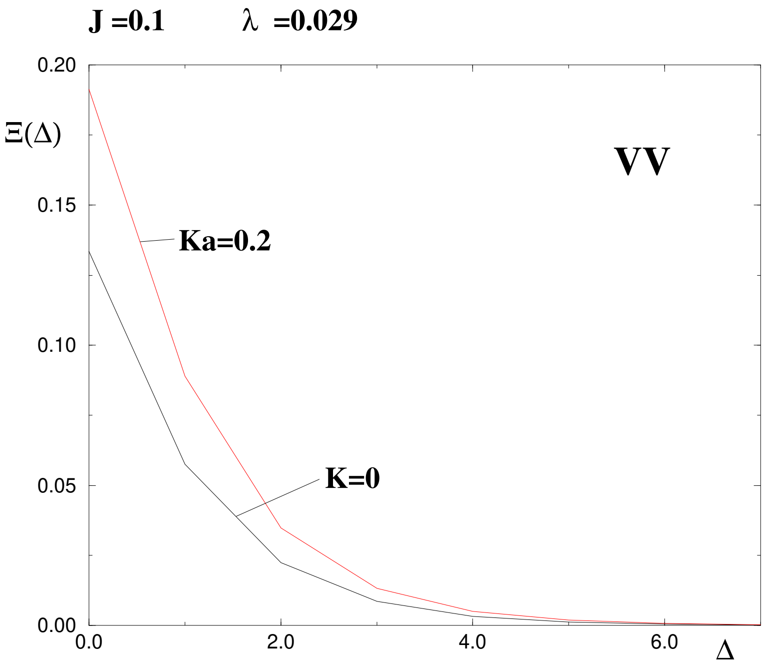


$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + 0.005 \quad , \quad \lambda_1 = 0.03$$

Slika 18: Usporedba korelacione funkcije za VV funkciju i numeričku metodu.



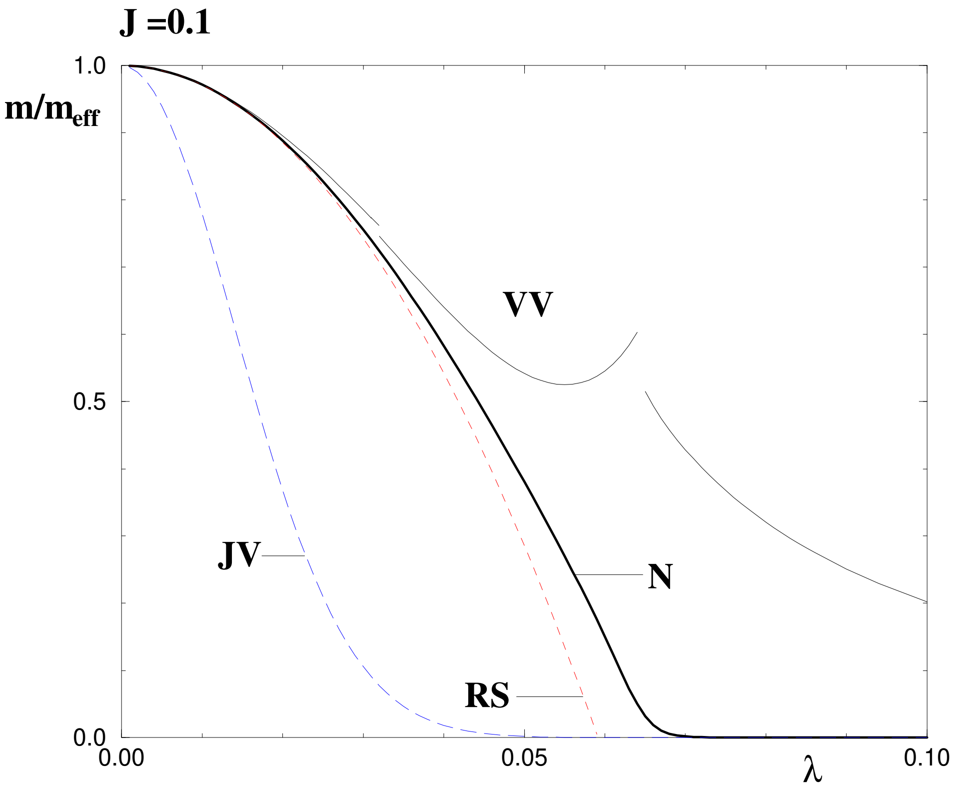
Slika 19: Utjecaj parametra J na deformaciju rešetke.



Slika 20: Utjecaj parametra K na deformaciju rešetke.

4.5 Efektivna masa

Efektivnoj masi polarona pridružen je izraz (10). Njezina ovisnost o λ prikazana je na slici 21 za račun smetnje u području slabe veze, varijacionu metodu za jaku vezu, VV funkciju i numeričku metodu. Ordinati je pridružen bezdimenzionalni omjer m/m_{eff}.



Slika 21: Efektivna masa kao funkcija λ.

U području slabe veze, sve prikazane metode osim varijacione metode za jaku vezu daju slične efektivne mase. Izvan tog područja, kada je $\lambda > \omega$, rezultati računa smetnje, iako bliski onima numeričke metode, nemaju praktične vrijednosti.

Rezultati pridruženi VV funkciji opet jasno ukazuju na postojanje dvaju prijelaza. Također lako je primjetiti da je polaron kakvim ga opisuje numerička metoda u pravilu teži od onoga kavim ga opisuje VV funkcija. Za $\lambda > 0.7$ (uz J=0.1), numerička metoda praktički predviđa divergenciju efektivne mase polarona, za razliku od VV funkcije koja to predviđa za znatno veće vrijednosti λ.

Na kraju primjetimo da aproksimacija varijacione metode za jaku vezu (potpuna lokalizacija polarona) ne odgovara parametarkom području λ prikazanom na slici 21. No i iz njezinih rezultata prikazanih na slici 21, očita je divergencija efektivne mase polarona u području jake veze.

5 Primjena MCM-a na realne fizikalne sustave

5.1 Uvod

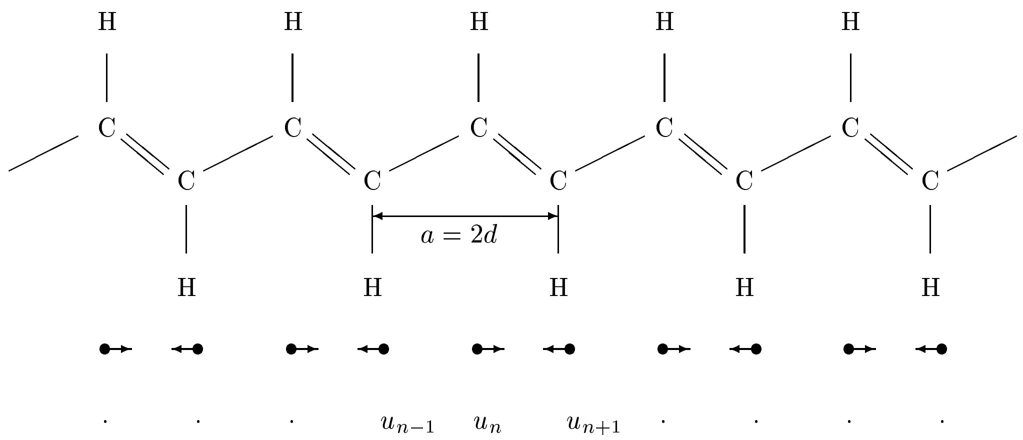
Pojava polarona koje smo u ovom radu promatrali u sklopu MCM-a predviđa se u mnogim fizikalnim sustavima, o čemu smo nešto već rekli u samom uvodu ovog rada. U posljednje vrijeme mnoštvo je članaka posvećeno vodljivim polimerima[30], kao i spojevima prelaznih metala i halogena[31], koji formiraju duge kvazijednodimenzionalne lance. U sklopu teoretskih analiza oni se razmatraju u okviru tzv. Su-Schrieffer-Heegerovog (SSH) modela [19], [20], za polimere, odnosno njegovog klona [21], za spojeve prelaznih metala i halogena. U oba slučaja predviđena su polaronska stanja.

Na stranicama koje slijede, pokazat ćemo da se rezultati MCM-a mogu pridružiti u nekim uvjetima rezultatima SSH modela, što će onda ujedno biti primjer jedne od upotreba MCM-a na neki realni fizikalni sustav. No, prije same rasprave o vezi SSH i Holsteinovog hamiltonijana čini se korisnim ukratko skicirati konstrukciju ovoga prvoga. To ćemo učiniti na primjeru trans-poliacetilena.

5.2 Trans-poliacetilen i SSH hamiltonijan

5.2.1 Uvod

Trans-poliacetilen čini lanac CH skupina koje su međusobno povezane jednostrukom ili dvostrukom vezom. Broj π elektrona (p_z orbitale) koji u parovima formiraju dvostruku vezu, u odsustvu dopiranja, ogovara broju CH skupina. Na slici 22 prikazana je dimerizirana rešetka trans-poliacetilena. Razlika u dužini jednostruke i dvostruke veze mala je veličina naspram dimenzije konstante rešetke



Slika 22: Potpuno dimerizirana rešetka trans-poliacetilena.

d, i očekujemo da fononska pobuđenja koja ćemo kasnije promatrati dovode do pomaka CH skupina istog reda veličine. Tako se za energiju rešetke može koristiti harmonička aproksimacija

$$H_{SSH,fn} = \frac{1}{2}\, M \sum_n \dot{u}_n^2 + \frac{1}{2}\, K_r \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 \quad . \tag{26}$$

u_n je operator pomaka n-te CH skupine iz točke ravnoteže nedimeriziranog stanja. Zgodno je pisati

$$u_n = (-)^n\, u_0 + \chi_n \;, \tag{27}$$

pa je χ_n pridružen fononima potpuno dimerizirane rešetke.

π elektroni opisani su u aproksimaciji čvrste veze i aproksimaciji prvih susjeda,

[30] Vidjeti npr. [17].
[31] Vidjeti npr. [18].

$$\begin{aligned} H_{SSH,el-int} &= -\sum_n t_{n+1,n}(c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}) \\ t_{n+1,n} &= t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n) \; . \end{aligned} \tag{28}$$

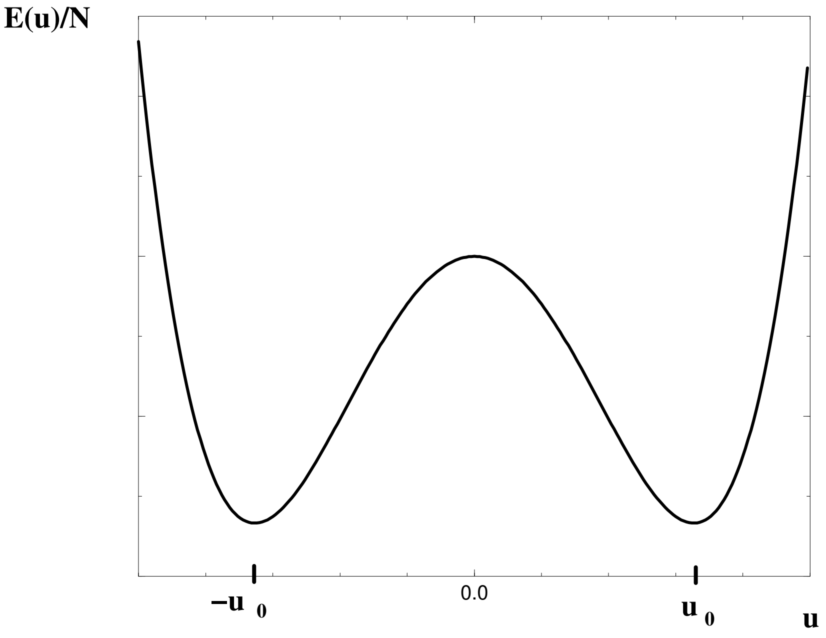
t_0 je integral preklopa za nedimeriziranu rešetku, dok $-\alpha(u_{n+1}-u_n)$ predstavlja njegovu popravku zbog pomaka CH skupina iz ravnotežnog položaja. SSH model ne tretira eksplicitno Coulombovo međudjelovanje između π elektrona, već ono ulazi u model posredno preko zasjenjenih vrijednosti t_0, α.

5.2.2 Osnovno stanje nedopiranog trans-poliacetilena

Nedopirani trans-poliacetilen je u osnovnom stanju potpuno dimeriziran. U adijabatskoj granici zanemarujemo nul-modove titranja rešetke, $\chi_n = 0$, pa je osnovnom stanju pridružen efektivni elektronski hamiltonijan

$$H_{SSH,ad}(u) = 2NK_r u^2 - \sum_n (t_0 - (-)^n 2\alpha u)(c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}) \; .$$

$H_{SSH,ad}$ izražen je kao funkcija amplitude dimerizacije u. Postupak pronalaženja konkretne vrijednosti u_0 može se naći u [20], i nama u ovoj analizi nije od praktičnog značaja. u u točkama $\pm u_0$ minimizira energiju sustava što je ilustrirano slikom 23.



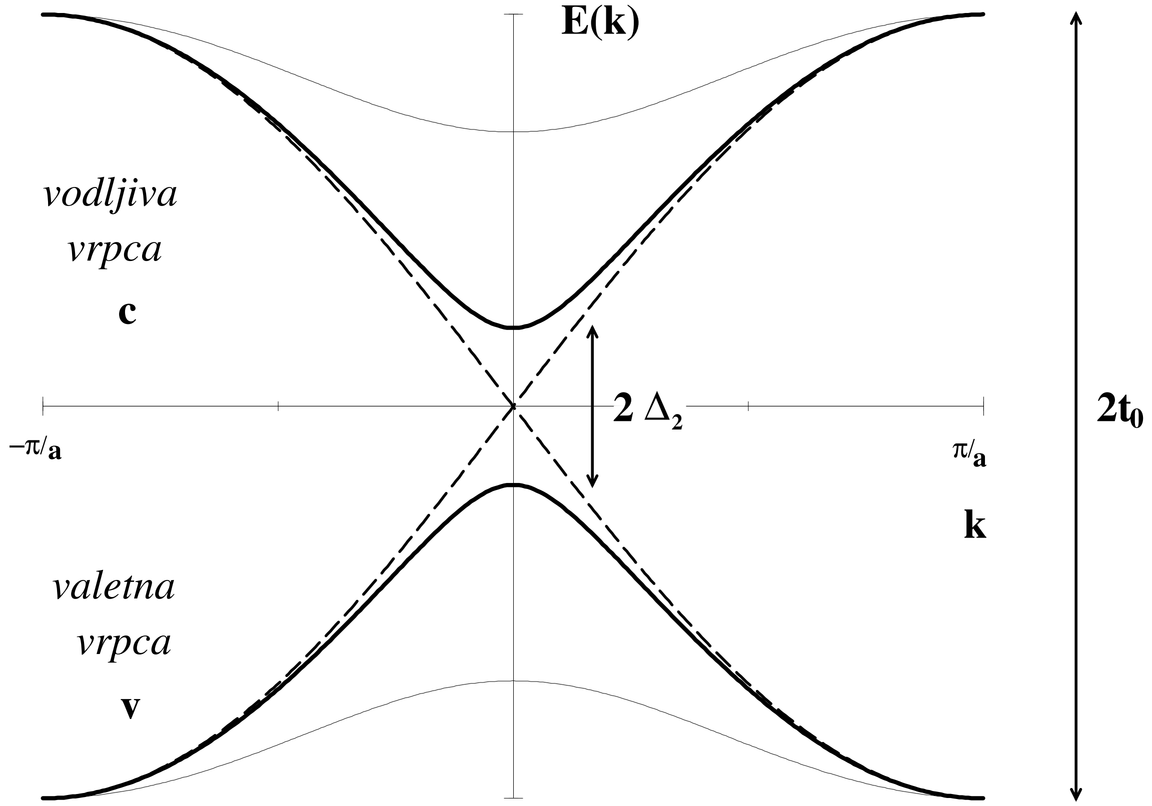
Slika 23: Energija osnovnog stanja u ovisnosti o amplitudi dimerizacije u.

Spektar elektrona dobiva se analitički[32]

$$E_k = \pm\sqrt{(2t_0 \sin(kd))^2 + (2\Delta \cos(kd))^2} \; ,$$

gdje je $\Delta = 2\alpha u_0$. Elektroni popunjavaju prvih N stanja, onosno valetnu vrpcu. Elektronski spektar prikazan je na slici 24.

[32] Vidjeti dijagonalizaciju $H_{d,el}$ u 7.6.3.



energija dimerizacije	vrsta linije
$\Delta_1/t_0 = 0$	crtkana puna linija
$\Delta_2/t_0 = 0.2$	debela puna linija
$\Delta_3/t_0 = 0.7$	tanka linija

Slika 24: Elektronski spektar u ovisnosti o energiji dimerizacije Δ_i.

5.3 Veza između SSH i Holsteinovog hamiltonijana

5.3.1 Elektron-fonon međudjelovanje

U dosadašnjoj analizi trans-poliacetilena zanemarili smo fononska pobuđenja dimerizirane rešetke, te pripadno elektron-fonon međudjelovanje. Ovom je međudjelovanju pridružen hamiltonijan, $H_{d,int}$, čiji je opći oblik u impulsnoj reprezentaciji dan slijedećim izrazom[33]

$$\begin{aligned} H_{d,int} &= \frac{\alpha}{\sqrt{N}} \sum_{k,q} \{ c^\dagger_{k+q,v} c_{k,v} \, [(b_{q,a} + b^\dagger_{-q,a}) \, W_{vva}(k,q) + (b_{q,o} + b^\dagger_{-q,o}) \, W_{vvo}(k,q)] \\ &+ c^\dagger_{k+q,c} c_{k,c} \, [(b_{q,a} + b^\dagger_{-q,a}) \, W_{cca}(k,q) + (b_{q,o} + b^\dagger_{-q,o}) \, W_{cco}(k,q)] \\ &+ c^\dagger_{k+q,v} c_{k,c} \, [(b_{q,a} + b^\dagger_{-q,a}) \, W_{vca}(k,q) + (b_{q,o} + b^\dagger_{-q,o}) \, W_{vco}(k,q)] \\ &+ c^\dagger_{k+q,c} c_{k,v} \, [(b_{q,a} + b^\dagger_{-q,a}) \, W_{cva}(k,q) + (b_{q,o} + b^\dagger_{-q,o}) \, W_{cvo}(k,q)] \} \, . \end{aligned} \tag{29}$$

Prva dva člana opisuju međudjelovanje valetnih (v) odnosno vodljivih (c) elektrona s akustičnim (a) i optičkim (o) fononima, a druga dva člana opisuju njihove prijelaze iz vodljive u valetnu vrpcu, odnosno iz valetne u vodljivu. Prva dva člana "mješaju" elektrone unutar istih vrpci, dok druga dva člana dovode do elektronskog mješanja između vrpci.

Mjenjanjem broja elektrona, ravnotežni položaji čvorova rešetke sistema više ne odgovaraju onima za nedopiranu rešetku. Rešetka se deformira u odnosu na njezino dimerizirano stanje. Svi elektroni, i valetni i vodljivi, međudjeluju s tom deformacijom preko elektron-fonon vezanja, pa pronalaženje osnovnog stanja takvog sistema zahtjeva direktno uključivanje $H_{d,int}$ u hamiltonijan. U slijedećem poglavlju obratit ćemo pažnju na sistem s jednim dopiranim elektronom.

5.3.2 Osnovno stanje sistema s jednim dopiranim elektronom

U dugovalnoj granici, za rešetku gdje je energija dimerizacije jaka, $\Delta \lesssim t_0$, matrični elementi međudjelovanja elektrona i akustičnih fonona, W_{jja}, teže nuli[34], kao i matrični elementi koji dovode do prijelaza elektrona iz vrpce u vrpcu, $W_{v,c,j}, W_{c,v,j}$.

Problem traženja osnovnog stanja sistema kojemu je valetna vrpca potpuno popunjena, a u vodljivoj vrpci imamo samo jedan dopirani elektron s malim valnim vektorom k, može se onda u spomenutim uvjetima svesti na pronalaženje osnovnog stanja hamiltonijana

$$\begin{aligned} H &= \sum_k R_k \, c^\dagger_{k,c} c_{k,c} + \sum_q \omega_{q,o} \, b^\dagger_{q,o} b_{q,o} \\ &+ \frac{\alpha}{\sqrt{N/2}} \sum_{k,q} W_{cco}(k,q) \, c^\dagger_{k+q,c} c_{k,c} \, (b^\dagger_{-q,o} + b_{q,o}) \ . \end{aligned} \tag{30}$$

R_k je energija elektrona u vodljivoj vrpci, $\omega_{q,o}$ energija optičkog fonona, a W_{cco} matrični element pridružen njihovom međudjelovanju. Hamiltonijan opisuje utjecaj dopiranog elektrona na dimeriziranu rešetku, koja se zbog njegovog prisustva deformira u odnosu na potpuno dimerizirano stanje. To je poslijedica elektron-fonon međudjelovanja, $W_{cco} \neq 0$, odnosno optičkih fonona koji su se vezali uz elektron.

U izrazu (30) nije teško prepoznati Holsteinov hamiltonijan. Naime, u dugovalnoj granici[35], supstituirajući

$$\begin{aligned} R_{k\approx 0} &\Rightarrow \frac{t_0}{4}(t_0/\Delta - \Delta/t_0) \ \to \ J \\ \omega_{q=0,o} &= \sqrt{2(K_1+K_2)/M} \ \to \ \omega \\ \alpha \, W_{c,c,o}(k=0,q=0) &= 2\sqrt{2}\alpha \ \to \ \lambda \, , \end{aligned} \tag{31}$$

dobivamo upravo (2). Primjetimo još na kraju da valna funkcija elektrona i deformacije rešetke pridružena konkretnim vrijednostima J, ω, λ, mora biti konzistetna dugovalnoj aproksimaciji koju smo koristili, odnosno mora biti delokalizirana. U suprotnom dobiveni rezultati MCM-a ne bi se mogli koristiti pri analiziranju SSH modela.

[33] Eksplicitni izraz za $H_{d,int}$, odnosno W_{jjj}, izračunati su u dodatku E.
[34] Vidjeti izraze (41).
[35] Izrazi u (31) za ω i λ se podudaraju s onima dobivenima u [22].

5.3.3 Zaključak

Treba ipak naglasiti da paralela između SSH modela i MCM-a zahtjeva daljnju teoretsku analizu s obzirom na aproksimacije koje su pri izvodu uvođene.

S druge strane, SSH model je često u literaturi razmatran u adijabatskoj aproksimaciji i dugovalnoj granici, kako za nedopirane sisteme tako i za dopirane. U ovom smo radu pokazali da te dvije aproksimacije u MCM-u zahtjevaju dosta oštra ograničenja na parametarski prostor J, ω, λ, što onda može biti slučaj i u SSH modelu. Stoga, proučavajući MCM i njegovu vezu s SSH modelom, može se između ostaloga utvrditi točnost korištenih aproksimacija i dobivenih rezultata za SSH model.

6 Zaključak

Traženo je osnovno stanje Holsteinovog hamiltonijana pomoću raznih aproksimativnih metoda. Numerička metoda dala je najbolje rezultate u usporedbi s rezultatima računa smetnje za slabu vezu, adijabatske aproksimacije i varijacionih metoda s jednim, dva i tri varijaciona parametra, u području parametarskog prostora za koji vrijedi $J, \lambda \lesssim 25\ \omega$. Za veće J, λ, zbog velikih memorijskih zahtjeva na računalo numeričke metode pri analizi polarona s većim brojem fonona i većim efektivnim protezanjem nije dala dobre rezultate. Tu se najboljom pokazala VV varijaciona valna funkcija, s iznimkom područja $\omega \ll \lambda \ll J$ gdje je to adijabatska aproksimacija.

Zatim je diskutirana mogućnost primjene molekularno-kristalnog modela na problem dopiranog elektrona u vodljivoj vrpci sistema opisanog SSH modelom. Pokazalo se da bi u određenim uvijetima rezultati ovih dvaju modela mogli međusobno korespondirati.

7 Dodaci

7.1 Dodatak A

Želimo izračunati izraz

$$I_1(\Delta) = 1/N \sum_q \frac{e^{-iqa\Delta}}{E_k - \omega - E_{k+q}} \ ,$$

gdje q ide po prvoj Brillouinovoj zoni, a $E_k = 2J\cos k$. Koristit ćemo slijedeće supstitucije

$$\begin{aligned} L &= Na = 1 \\ 1/N\sum_q &\rightarrow a/2\pi L \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq \\ b &= -\cos ka - \omega/2J \\ Q &= k + q \\ z &= e^{iQa} \ . \end{aligned}$$

Tako za $\Delta < 0$, imamo

$$\begin{aligned} I_1(\Delta < 0) &= \frac{a}{2\pi L}\,\frac{1}{2J}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq\,\frac{e^{iqa|\Delta|}}{-\cos ka - \omega/2J + \cos{(k+q)a}} \\ &= \frac{a}{4J\pi}\,e^{-ika|\Delta|}\int_{-\pi/a+k}^{\pi/a+k} dQ\,\frac{e^{iQa|\Delta|}}{\cos Qa + b} \\ &= \frac{1}{4J\pi}\,e^{-ika|\Delta|}\oint_{|z|=1} dz\,\frac{-2i\,z^{|\Delta|}}{z^2+2bz+1} \\ &= \frac{-i}{2J\pi}\,e^{-ika|\Delta|}\oint_{|z|=1} dz\,\frac{z^{|\Delta|}}{(z-z_1)(z-z_2)} \ , \end{aligned}$$

gdje je $z_{1,2} = -b \pm \sqrt{b^2-1}$. Koristeći uvjet (6) može se lako vidjeti da je za naše potrebe uvijek $z_2 < 1$, a $z_1 > 1$. Tada preko teorema residuâ dobivamo

$$\begin{aligned} I_1(\Delta < 0) &= \frac{-i}{2J\pi}\,e^{-ika|\Delta|}\cdot 2\pi i \cdot Res[f(z)]_{z=z_2} \\ &= \frac{1}{J}\,e^{-ika|\Delta|}\cdot\frac{(-b-\sqrt{b^2-1})^{|\Delta|}}{-2\sqrt{b^2-1}} \\ &= -\frac{1}{2J}\,e^{-ika|\Delta|}\cdot\frac{(\cos ka + \omega/2J - \sqrt{(\cos ka+\omega/2J)^2-1})^{|\Delta|}}{\sqrt{(\cos ka+\omega/2J)^2-1}} \ . \end{aligned}$$

Što se tiče slučaja kada je $\Delta > 0$, lako se uvjeriti, koristeći u gornjim izrazima zamjenu $Q \rightarrow -Q$, da vrijedi

$$I_1(\Delta > 0) = -\frac{1}{2J}\,e^{ika|\Delta|}\cdot\frac{(-b-\sqrt{b^2-1})^{|\Delta|}}{-2\sqrt{b^2-1}} \ .$$

Stoga, možemo pisati

$$I_1(\Delta) = -\frac{1}{2J}\,e^{ika\Delta}\cdot\frac{(\cos ka + \omega/2J - \sqrt{(\cos ka+\omega/2J)^2-1})^{|\Delta|}}{\sqrt{(\cos ka+\omega/2J)^2-1}} \ .$$

7.2 Dodatak B: Koherentna stanja

7.2.1 Uvod

U ovom dodatku pokušat ćemo ukratko izložiti formalizam i svojstva koherentnih stanja. Naime, operator $S_j(\xi)$, koji je pridružen nekom koherentnom stanju ξ, često se koristi unutar ovog rada. Kada je tome slučaj, svojstva koherentnih stanja prenose se na svojstva dobivenih rezultata, pa ih se čini zgodnim skupiti i obrazložiti na jednom mjestu.

7.2.2 Koherentna stanja

S valnom funkcijom harmoničkog oscilatora standardno se opisuje titranje mase asocirane čvoru rešetke. Ako na masu asociranu nekom čvoru, recimo j, djeluje konstatna vanjska sila F, njoj je pridružen hamiltonijan

$$H_j \;=\; \frac{1}{2}\,M\dot{x}_j^2 + \frac{1}{2}\,K_r\,x_j^2 - F\,x_j - \frac{1}{2}\,. \tag{32}$$

Supstituirajući u (32)

$$\begin{aligned} x_j &= \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}\;\frac{b_j^\dagger + b_j}{\sqrt{2}} \\ \dot{x}_j &= -\sqrt{\frac{\hbar\omega}{M}}\;\frac{b_j^\dagger - b_j}{i\sqrt{2}}\,, \end{aligned}$$

gdje je $\omega = \sqrt{K_r/M}$, dobivamo, uz $\hbar = 1$,

$$\begin{aligned} H_j &= \omega\,b_j^\dagger b_j + \lambda\,(b_j^\dagger + b_j) \\ \lambda &= -\frac{F}{\sqrt{2M\omega}}\,. \end{aligned}$$

H_j možemo dijagonalizirati pomoću operatora $S_j(-\lambda/\omega)$, [23],

$$S_j(\xi) = e^{\xi\,b_j^\dagger - \xi^*\,b_j} \quad , \quad \xi = -\lambda/\omega$$

$$S_j^\dagger(-\lambda/\omega)\;H_j\;S_j(-\lambda/\omega) = \omega\;b_j^\dagger b_j - \frac{\lambda^2}{\omega}\,.$$

Osnovno stanje H_j odgovara definiciji koherentnog stanja i dano je s

$$S_j(\xi)\mid 0>_j = e^{\xi\,b_j^\dagger - \xi^*\,b_j}\mid 0>_j\,, \tag{33}$$

gdje je $\mid 0>_j$ valna funkcija harmoničkog oscilatora u osnovnom stanju, na čvoru j, u osustvu vanjske sile. Valna funkcija (33) opisuje titranje nepobuđenog harmoničkog oscilatora oko novog položaja ravnoteže x_λ, za koji vrijedi

$$x_\lambda = -\lambda/\omega\sqrt{\frac{2}{M\omega}} = F/K_r\,. \tag{34}$$

Iz toga se može zaključiti da operator $S_j(-\lambda/\omega)$ tek prostorno translatira valnu funkciju za x_λ. Naime ako s $\hat{p}_j$ označimo operator impulsa fonona, a s $\hat{T}_j(x)$ operator translacije, imamo

$$\begin{aligned} \hat{p}_j &= i\sqrt{\frac{M\omega}{2}}(b_j^\dagger - b_j) \\ \hat{T}_j(x_\lambda) &= e^{-i\,x_\lambda\,\hat{p}_j} \\ &= e^{-\frac{\lambda}{\omega}(b_j^\dagger - b_j)} \\ &= S_j(-\lambda/\omega)\,. \end{aligned}$$

Stoga, činjenica da je gustoća vjerojatnosti harmoničkog oscilatora u osnovnom stanju

$$\varrho(x) = {}_j\!< 0 \mid 0 >_j\,,$$

gaussijan oko ishodišta, povlaći za sobom da je ona gaussijan i za koherentno stanje

$$S_j(\xi)^\dagger\;\hat{x}\;S(\xi)_j = \hat{x} - x_\lambda\,.$$

Ako je dakle titranje mase nekog čvora rešetke j dano koherentnim stanjem $S_j(-\lambda/\omega)$, rešetka će u prosjeku biti na tom čvoru deformirana za x_λ. Gustoća vjerojatnosti pronalaženja mase oko te srednje vrijednosti bit će gaussijan sa središtem u njoj. Zbog ovog zadnjeg svojstva kažemo da je deformacija dana koherentnim stanjem gausijanska.

7.2.3 Neki korisni izrazi

Formalno, koherentno stanje može se definirati i kao svojstveno stanje operatora poništavanja b. Naime, koristeći prvu od donjih dviju jednakosti,

$$\begin{aligned} S_j^\dagger(\xi)\, b_j\, S_j(\xi) &= b_j + \xi \\ S_j^\dagger(\xi)\, b_j^\dagger\, S_j(\xi) &= b_j^\dagger + \xi^* \;, \end{aligned}$$

lako je pokazati da vrijedi

$$b_j\; S_j(\xi) \mid 0 >_j = \xi \;\mid 0 >_j \;\; .$$

Koristeći relacije

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}\; e^{\hat{B}}\; e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \;,$$

gdje su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ bilo kakva dva operatora, a $[\hat{A},\hat{B}]$ njihov komutator, možemo pisati

$$S_j(\xi) = e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2}\; e^{\xi b_j^\dagger}\; e^{-\xi^* b_j} \;\; .$$

Gornji izraz nam sada pak može poslužiti da $S_j(\xi) \mid 0 >_j$ izrazimo na način pogodan za računanje

$$\begin{aligned} S_j(\xi) \mid 0 >_j &= e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2}\; e^{\xi b_j^\dagger} \mid 0 >_j \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\xi\; b_j^\dagger]^m}{m!} \mid 0 >_j \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\xi]^m}{\sqrt{m!}} \mid m >_j \;\; . \end{aligned}$$

7.2.4 Oznake

U ovom radu ξ je ponekad funkcija nekog cjelobrojnog indeksa, npr. n. Tada se umjesto $S_j(\xi_n)$ radi kraćeg pisanja koristi $S_j(n)$.

7.3 Dodatak C: Izraz za varijacionu energiju VV funkcije

Radi kraćeg pisanja, uzet ćemo da je konstanta rešetke $a = 1$, te ćemo $\mid 0 >$ zamijeniti oznakom $>$. U ovom dodatku koristit ćemo slijedeću konvenciju s indeksima sumacije: ako granice sumacije nisu ispisane u slučaju da se sumira po m granice su 0 i ∞, inače $-\infty$ i ∞. Zgodno je još odmah najaviti da će Δ uvijek supstituirati $j - j'$.

Želimo izračunati energetski funkcional (varijacionu energiju) E zadan na slijedeći način

$$\begin{aligned} E &= \frac{< \Psi^K \mid H \mid \Psi^K >}{< \Psi^K \mid \Psi^K >} \\ \Psi^K &= 1/\sqrt{N} \sum_j e^{iKaj}\; (\sum_l \eta_l\; c_{j+l}^\dagger)\; \prod_n S_{j+n}(n) > \\ S_j(n) &= e^{\xi_n b_j^\dagger - \xi_n^* b_j} \\ \xi_n &= A\; B^{|n|}\; e^{i\varphi n} \\ \eta_l &= \rho_l\; e^{iKl} \\ \rho_l &= C\; G^{|l|} \;. \end{aligned}$$

A, B, C, G, φ, su varijacioni parametri. No, zbog normalizacije elektronskog dijela valne funkcije

$$\sum_l \eta_l^*\; \eta_l = 1 \;,$$

samo jedan od dva parametra C, G, je nezavisan, a zbog (36) isti je slučaj s A, B,

$$(\sum_n b_n)\ \Psi^K = (\sum_n \xi_n)\ \Psi^K = A\frac{1-B^2}{1-2B\cos\varphi+B^2}\ \Psi^K = -\lambda/\omega\ \Psi^K\ . \tag{35}$$

Izračunajmo odmah slijedeće matrične elemenate koji će nam trebati kasnije

$$\begin{aligned}
Z_0(n',n) &= < S_j^\dagger(n') S_j(n) > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ < b_j^{m'} b_j^{\dagger m} > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ \delta_{m',m} \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m} \frac{1}{m!}\ \xi_{n'}^{*m} \xi_n^m \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2-2\ \xi_{n'}^*\xi_n)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_1(n',n) &= < S_j^\dagger(n')\ b_j\ S_j(n) > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ < b_j^{m'}\ b_j\ b_j^{\dagger m} > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ \sqrt{m'+1}\ \delta_{m'+1,m} \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2-2\ \xi_{n'}^*\xi_n)}\ \xi_n \\
&= Z_0(n',n)\ \xi_n
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_2(n',n) &= < S_j^\dagger(n')\ b_j^\dagger\ S_j(n) > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ < b_j^{m'}\ b_j^\dagger\ b_j^{\dagger m} > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ \sqrt{m+1}\ \delta_{m',m+1} \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2-2\ \xi_{n'}^*\xi_n)}\ \xi_{n'}^* \\
&= Z_0(n',n)\ \xi_{n'}^*
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_3(n',n) &= < S_j^\dagger(n')\ b_j^\dagger\ b_j\ S_j(n) > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'} \xi_n^m\ < b_j^{m'}\ b_j^\dagger\ b_j\ b_j^{\dagger m} > \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2)} \sum_{m',m} \frac{1}{\sqrt{m'!\,m!}}\ \xi_{n'}^{*m'}\ \xi_n^m\ m\ \ \delta_{m',m} \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\xi_n|^2+|\xi_{n'}|^2-2\ \xi_{n'}^*\xi_n)}\ \xi_{n'}^*\ \xi_n \\
&= Z_0(n',n)\ \xi_{n'}^*\ \xi_n\ \ .
\end{aligned}$$

Definirajmo sada Y_Δ

$$Y_\Delta \quad = \quad \prod_n Z_0(n, n-\Delta)\ ,$$

i primjetimo da je: $Y_\Delta = Y_{-\Delta}^*$.

Račun normalizacije

$$
\begin{aligned}
Nor &= <\Psi^K \mid \Psi^K> \\
&= 1/N \sum_{j,j'} e^{iK(j-j')} \sum_{l,l'} \eta^*_{l'}\ \eta_l\ <c_{j'+l'}\ c^\dagger_{j+l} \prod_{n,n'} S^\dagger_{j'+n'}(n') S_{j+n}(n)> \\
&= 1/N \sum_{j',\Delta,l,l'} \delta_{j'+l',j'+\Delta+l}\ e^{iK\Delta}\ \eta^*_{l'}\ \eta_l \prod_{n,n'} <S^\dagger_{j'+n'}(n') S_{j'+\Delta+n}(n)> \\
&= \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\rho_l \prod_{n,n'} <S^\dagger_{n'}(n') S_{\Delta+n}(n)> \\
&= \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\rho_l \prod_{n'} <S^\dagger_{n'}(n') S_{n'}(n'-\Delta)> \\
&= \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\rho_l \sum_{n'} Z_0(n',n'-\Delta) \\
&= \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\rho_l\ Y_\Delta \quad .
\end{aligned}
$$

Doprinos od $H_{el} = -J\sum_u c^\dagger_u\ (c_{u+1}+c_{u-1})$ energiji sistema

$$
\begin{aligned}
E_{el} &= <\Psi^K \mid H_{el} \mid \Psi^K> \\
&= -J/N \sum_{j,j',u} e^{iK(j-j')} \sum_{l,l'} \eta^*_{l'}\ \eta_l\ <c_{j'+l'}\ c^\dagger_u\ (c_{u+1}+c_{u-1})\ c^\dagger_{j+l} \prod_{n,n'} S^\dagger_{j'+n'}(n') S_{j+n}(n)> \\
&= -J/N \sum_{j',j,l,l',u} \delta_{j'+l',u}\ (\delta_{u+1,j+l}+\delta_{u-1,j+l})\ e^{iK\Delta}\ \eta^*_{l'}\ \eta_l \prod_{n,n'} <S^\dagger_{j'+n'}(n') S_{j+n}(n)> \\
&= -J/N \sum_{j',\Delta,l,l'} (\delta_{j'+l',j'+\Delta+l-1}+\delta_{j'+l',j'+\Delta+l+1})\ e^{iK\Delta}\ \eta^*_{l'}\ \eta_l\ Y_\Delta \\
&= -J \sum_{\Delta,l,l'} (\delta_{l',l+\Delta-1}+\delta_{l',l+\Delta+1})\ e^{iK\Delta}\ \eta^*_{l'}\ \eta_l\ Y_\Delta \\
&= -J \sum_{\Delta,l} e^{iK\Delta}\ (\eta^*_{l+\Delta-1}+\eta^*_{l+\Delta+1})\ \eta_l\ Y_\Delta \\
&= -J \sum_{\Delta,l} (\rho_{l+\Delta-1}\ e^{iK}+\rho_{l+\Delta+1}\ e^{-iK})\ \rho_l\ Y_\Delta \quad .
\end{aligned}
$$

Doprinos od $H_{fn} = \omega\sum_u b^\dagger_u\ b_u$ energiji sistema

$$
\begin{aligned}
E_{fn} &= <\Psi^K \mid H_{fn} \mid \Psi^K> \\
&= \omega/N \sum_{j,j',u} e^{iK(j-j')} \sum_{l,l'} \eta^*_{l'}\ \eta_l\ <c_{j'+l'}\ c^\dagger_{j+l} \prod_{n,n'} S^\dagger_{j'+n'}(n')\ b^\dagger_u\ b_u\ S_{j+n}(n)> \\
&= \omega/N \sum_{j',\Delta,u,l,l'} \delta_{j'+l',j'+\Delta+l}\ e^{iK\Delta}\ \eta^*_{l'}\ \eta_l\ <\prod_{n,n'} S^\dagger_{j'+n'}(n')\ b^\dagger_u\ b_u\ S_{j'+\Delta+n}(n)> \\
&= \omega \sum_{u,\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\ \rho_l\ <\prod_{n'} S^\dagger_{n'}(n')\ b^\dagger_u\ b_u\ S_{n'}(n'-\Delta)> \\
&= \omega \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\ \rho_l \sum_u Z_3(u,u-\Delta) \prod_{n'\neq u} Z_0(n',n'-\Delta) \\
&= \omega \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\ \rho_l \sum_u Z_0(u,u-\Delta)\ \xi^*_u\ \xi_{u-\Delta} \prod_{n'\neq u} Z_0(n',n'-\Delta) \\
&= \omega \sum_{u,\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\ \rho_l\ \xi^*_u\ \xi_{u-\Delta}\ Y_\Delta \quad .
\end{aligned}
$$

Doprinos od $H_{int} = \lambda\sum_u c^\dagger_u\ c_u\ (b^\dagger_u + b_u)$ energiji sistema

$$
\begin{aligned}
E_{int} &= < \Psi^K \mid H_{int} \mid \Psi^K > \\
&= \lambda/N \sum_{j,j',u} e^{iK(j-j')} \sum_{l,l'} \eta^*_{l'}\, \eta_l \;\; < c_{j'+l'}\, c^\dagger_u\, c_u\, c^\dagger_{j+l} \prod_{n,n'} S^\dagger_{j'+n'}(n')\, (b^\dagger_u + b_u)\, S_{j+n}(n) > \\
&= \lambda/N \sum_{j',\Delta,u,l,l'} \delta_{j'+l',u}\, \delta_{u,j'+\Delta+l}\, e^{iK\Delta}\, \eta^*_{l'}\, \eta_l \prod_{n'} < S^\dagger_{j'+n'}(n')\, (b^\dagger_u + b_u)\, S_{j'+n'}(n'-\Delta) > \\
&= \lambda \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\, \rho_l \prod_{n'} < S^\dagger_{n'}(n')\, (b^\dagger_{l+\Delta} + b_{l+\Delta})\, S_{n'}(n'-\Delta) > \\
&= \lambda \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\, \rho_l\, [Z_1(l+\Delta,l) + Z_2(l+\Delta,l)] \prod_{n'\neq l+\Delta} Z_0(n',n'-\Delta) \\
&= \lambda \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\, \rho_l\, [Z_0(l+\Delta,l)\, \xi_l + Z_0(l+\Delta,l)\, \xi^*_{l+\Delta}] \prod_{n'\neq l+\Delta} Z_0(n',n'-\Delta) \\
&= \lambda \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\, \rho_l\, [\xi^*_{l+\Delta} + \xi_l]\, Y_\Delta \quad .
\end{aligned}
$$

Sada ćemo izračunati neke sume, koje nam trebaju za ukupni račun

$$
\begin{aligned}
\sum_n \xi^*_n\, \xi_n &= \sum_n \rho^2_n \\
&= A^2\, (2 \sum_m B^2 - 1) \\
&= A^2\, (\frac{2}{1-B^2} - 1) \\
&= A^2 \frac{1+B^2}{1-B^2} \\
&= N_{fn} \\
\sum_n \eta^*_n\, \eta_n &= \sum_n \rho_n\, \rho_n \\
&= C^2 \frac{1+G^2}{1-G^2} \\
&= 1 \\
\sum_n B^{|n|} B^{|n-\Delta|} &= 2B^{|\Delta|} \sum_m B^2 + \sum_{r=0}^{\Delta} B^{|\Delta|} - 2B^{|\Delta|} \\
&= B^{|\Delta|} (\frac{1+B^2}{1-B^2} + \mid \Delta \mid) \\
\sum_n \xi^*_n\, \xi_{n-\Delta} &= A^2\, e^{-i\varphi\Delta} \sum_n B^{|n|} B^{|n+\Delta|} \\
&= A^2\, e^{-i\varphi\Delta}\, B^{|\Delta|} (\frac{1+B^2}{1-B^2} + \mid \Delta \mid) \\
\sum_n \rho_n\, \rho_{n+\Delta} &= C^2\, G^{|\Delta|} (\frac{1+G^2}{1-G^2} + \mid \Delta \mid) \quad .
\end{aligned}
$$

Koristeći supstitucije $B = e^{-\nu}$, $G = e^{-\mu}$, dobivamo

$$
\begin{aligned}
N_{fn} &= A^2\, \coth \nu \\
C^2 &= \coth \mu \; .
\end{aligned}
$$

Naše izraze iskazivat ćemo zbog preglednosti preko ν, μ. Izrazimo Y_Δ

$$
\begin{aligned}
Y_\Delta &= \exp\left[-1/2(\mid \xi_n \mid^2 + \mid \xi_{n-\Delta} \mid^2 - 2\, \xi^*_n\, \xi_{n-\Delta})\right] \\
&= \exp\left[-N_{fn} + A^2\, e^{-i\varphi\Delta}\, B^{|\Delta|} (\frac{1+B^2}{1-B^2} + \mid \Delta \mid)\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \exp\left[-N_{fn} + N_{fn}\, e^{-i\varphi\Delta} e^{-\nu|\Delta|}(1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\nu)\right] \\
&= \exp\left[-N_{fn} + N_{fn}\, e^{-\nu|\Delta|}\; \cos(\varphi\Delta)(1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\nu)\right] \\
&\times \; \exp\left[-i\, N_{fn}\, e^{-\nu|\Delta|}\; \sin(\varphi\Delta)(1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\nu)\right] \; .
\end{aligned}
$$

Prvi faktor u zadnjem redu označimo s R_Δ, a drugi s I_Δ, pa vrijedi $Y_\Delta = R_\Delta I_\Delta$, i $Y^*_\Delta = R_\Delta I^*_\Delta$. Definirajmo P_Δ ovako: $I_\Delta = \exp(iP_\Delta)$.

Sada možemo napisati konačni izraz za normalizaciju

$$
\begin{aligned}
Nor &= \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\rho_l\, Y_\Delta \\
&= 1 + \sum_{\Delta>0,l} (\rho_{l+\Delta}\rho_l\, Y_\Delta + \rho_{l-\Delta}\rho_l\, Y^*_\Delta) \\
&= 1 + \sum_{\Delta>0,l} R_\Delta \rho_{l+\Delta}\rho_l (I_\Delta + I^*_\Delta) \\
&= 1 + 2\sum_{\Delta>0} R_\Delta\, e^{-\mu\Delta}\; (1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\mu)\; \cos(P_\Delta) \; .
\end{aligned}
$$

Izraz za E_{el} nešto je teže dobiti, pa moramo definirati nove supstitucije

$$
\begin{aligned}
H_\Delta &= \rho_{n+|\Delta|+1}\; \rho_n \\
&= \rho_n\; \rho_{n-|\Delta|-1} \\
&= e^{-\mu(|\Delta|+1)}[1 + (\mid \Delta \mid +1)\; \tanh\mu)] \\
h_\Delta &= \rho_{n-|\Delta|+1}\; \rho_n \\
&= \rho_n\; \rho_{n+|\Delta|-1} \\
&= e^{-\mu(|\Delta|-1)}[1 + (\mid \Delta \mid -1)\; \tanh\mu)] \; .
\end{aligned}
$$

Nakon uvrštavanja dobiva se

$$
\begin{aligned}
E_{el} &= -J \sum_{\Delta,l} (\rho_{l+\Delta-1}\; e^{iK} + \rho_{l+\Delta+1}\; e^{-iK})\; \rho_l\; Y_\Delta \\
&= -J\{2e^{-\mu}[1 + \tanh\mu]\cos K \\
&\quad + \sum_{\Delta>0} R_\Delta\; [I_\Delta(H_\Delta e^{-iK} + h_\Delta e^{iK}) + I^*_\Delta(H_\Delta e^{iK} + h_\Delta e^{-iK})]\} \\
&= -2J\{\frac{\cos K}{\cosh\mu} + \sum_{\Delta>0} R_\Delta\; [(H_\Delta \cos(P_\Delta - K) + h_\Delta \cos(P_\Delta + K))]\} \; .
\end{aligned}
$$

Izraz za E_{fn}dobiva se lako pomoću do sada izvedenih izraza

$$
\begin{aligned}
E_{fn} &= \omega \sum_{u,\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\; \rho_l\; \xi^*_u\; \xi_{u-\Delta}\; Y_\Delta \\
&= N_{fn}\omega[1 + \sum_{\Delta>0} R_\Delta\; e^{-(\mu+\nu)\Delta}\; (1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\mu)(1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\nu)(e^{-i\varphi\Delta} I_\Delta + e^{i\varphi\Delta} I^*_\Delta)] \\
&= N_{fn}\omega[1 + 2\sum_{\Delta>0} R_\Delta\; e^{-(\mu+\nu)\Delta}\; (1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\mu)(1+ \mid \Delta \mid \; \tanh\nu)\; \cos(P_\Delta - \varphi\Delta)] \; .
\end{aligned}
$$

Izraz za E_{int} izračunajmo u više koraka. Prvo primjetimo da vrijedi

$$
\begin{aligned}
\sum_l \rho_l^2(\xi^*_l + \xi_l) &= -2\lambda\sqrt{N_{fn}\tanh\nu}\tanh\mu\; [1 + 2\sum_{l>1} e^{-(\nu+2\mu)l} \cos(\varphi l)] = U_0 \\
\sum_l \rho_l\; \rho_{l+\Delta}\; \xi_{l+\Delta} &= \sum_l \rho_{l+\Delta}\; \rho_l\; \xi^*_l \\
\sum_l \rho_l\; \rho_{l-\Delta}\; \xi_{l-\Delta} &= \sum_l \rho_{l-\Delta}\; \rho_l\; \xi^*_l \; ,
\end{aligned}
$$

pa sada lakše računamo E_{int},

$$
\begin{aligned}
E_{int} &= \lambda \sum_{\Delta,l} \rho_{l+\Delta}\ \rho_l\ [\xi^*_{l+\Delta} + \xi_l]\ Y_\Delta \\
&= \lambda \{\sum_l \rho_l^2 (\xi_l^* + \xi_l) + \sum_{\Delta>0,l} R_\Delta\ [I_\Delta\ \rho_{l+\Delta}\ \rho_l\ (\xi^*_{l+\Delta} + \xi_l) + I^*_\Delta\ \rho_{l-\Delta}\ \rho_l\ (\xi^*_{l-\Delta} + \xi_l)]\} \\
&= U_0 + 2\lambda \sum_{\Delta>0} R_\Delta \{\sum_m \rho_{m+\Delta}\ \rho_m\ [(I_\Delta\ \xi^*_{m+\Delta} + I^*_\Delta\ \xi_{m+\Delta}) + (I_\Delta\ \xi_m + I^*_\Delta\ \xi^*_m)] \\
&+ \sum_{l=0}^{\Delta} \rho_l\ \rho_{l-\Delta} (I_\Delta\ \xi_l^* + I^*_\Delta\ \xi_l) - \rho_0\ \rho_\Delta (\xi_0\ (I_\Delta + I^*_\Delta) + I_\Delta\ \xi^*_\Delta + I^*_\Delta\ \xi_\Delta)\} \\
&= -2\lambda \sqrt{N_{fn} \tanh\nu} \tanh\mu\ \{1 + 2\sum_{l>1} e^{-(\nu+2\mu)l} \cos(\varphi l) \\
&+ 2\sum_{\Delta>0} R_\Delta\ e^{-\mu\Delta}\ [e^{-\nu\Delta} \sum_m e^{-(\nu+2\mu)l} \cos(P_\Delta - \varphi(l+\Delta)) + \sum_m e^{-(\nu+2\mu)l} \cos(P_\Delta + \varphi l) \\
&+ \sum_{l=0}^{\Delta} e^{-\nu l} \cos(P_\Delta - \varphi l) - \cos(P_\Delta) - e^{-\nu\Delta} \cos(P_\Delta - \varphi\Delta)]\}\ .
\end{aligned}
$$

S ovim smo završili račun za traženi energetski funkcional, jer je

$$
E(N_{fn}, \nu, \mu, \varphi) = \frac{< \Psi^K \mid H \mid \Psi^K >}{< \Psi^K \mid \Psi^K >} = \frac{1}{Nor}(E_{el} + E_{fn} + E_{int})\ .
$$

Račun srednjeg broja fonona na udaljenosti Δ od elektrona sličan je onome matričnih elemenata koje smo izveli u računu energetskog funkcionala. Stoga se čini dovoljnim navesti krajnji rezultat

$$
\begin{aligned}
\Xi^K(\Delta) &= \frac{< \Psi^K \mid \sum_j c_j^\dagger c_j b^\dagger_{j+\Delta} b_{j+\Delta} \mid \Psi^K >}{< \Psi^K \mid \Psi^K >} \\
&= \frac{N_{fn} \tanh\nu \tanh\mu}{Nor} \sum_n [e^{-2\mu|n|}\ e^{-2\nu|n+\Delta|} \\
&+ 2\sum_{l>0} R_l\ e^{-\mu|n|}\ e^{-\mu|n+l|}\ e^{-\nu|n+\Delta|}\ e^{-\nu|n+l+\Delta|} \cos(P_l - \varphi l)]\ .
\end{aligned}
$$

7.4 Dodatak D: Izraz za varijacionu energiju u dinamičkoj aproksimaciji

Sve varijacione valne funkcije, korištene u ovom radu, mogu se dobiti reduciranjem VV funkcije. Posebno, varijaciona valna funkcija u dinamičkoj aproksimaciji dana je slijedećim redukcijama VV funkcije

$$
\begin{aligned}
\xi_n &: \quad A\ B^{|n|} e^{i\varphi n a} \to A\ B^{|n|} e^{iKna} \\
\eta_l &: \quad C\ G^{|l|}\ e^{iKla} \to \delta_{l,0}\ ,
\end{aligned}
$$

s kojima je onda lako dobiti, iz varijacionog izraza za energiju VV funkcije, varijacioni izraz za energiju u dinamičkoj aproksimaciji[36]

$$
\begin{aligned}
E_D &= -2J\ \exp[-N_{fn} + N_{fn}\ e^{-\nu}\ \cos(Ka)(1 + \tanh\nu)] \\
&\quad \times \cos[N_{fn}\ e^{-\nu}\ \sin(Ka)(1 + \tanh\nu) + Ka] \\
&+ \ \omega\ A^2 \frac{1 + B^2}{1 - B^2} + \lambda\ A\ .
\end{aligned}
$$

[36] N_{fn} i ν su definirani kao funkcije $A, B,$ u dodatku C.

7.5 Dodatak G: Formulacija općeg oblika polaronske valne funkcije

U ovom dodatku koristeći međusobnu komutativnost operatora $H, \hat{K}, b_{q=0}$, formuliran je opći oblik polaronske valne funkcije.

Ako polaron s valnim vektorom K označimo s $\mid K>$, možemo koristeći jednakost (3) pisati

$$
\begin{aligned}
\mid K> &= \sum_n c_n^\dagger c_n e^{-i\hat{K}na} e^{i\hat{K}na} \mid K> \\
&= \sum_n e^{iKna} c_n^\dagger (c_n \exp -i \sum_k knac_k^\dagger c_k)(\exp -i \sum_q qnab_q^\dagger b_q) \mid K> \\
&= \sum_n e^{iKna} c_n^\dagger (e^{-i\sum_q qnab_q^\dagger b_q}) c_0 \mid K> \quad .
\end{aligned}
$$

Fononska valna funkcija: $c_0 \mid K>$, projekcija je polaronske valne funkcije na elektronsku valnu funkciju u ishodidištu. Operator: $\exp\left[-i\sum_q qnab_q^\dagger b_q\right]$, samo translatira tu projekciju za na. Tako se valna funkcija polarona koja je ujedno svojstveni vektor impulsa polarona, uvijek može prikazati u obliku ravnog vala elektrona i pridružene mu fononske valne funkcije. Naš problem može se svesti na pronalaženje osnovnog stanja fononskog hamiltonijana $\hat{H}_{ph}$, [24],

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{ph} &\equiv c_0 \; H \; c_0^\dagger \\
&= -J(e^{iKa} e^{-i\sum_q qab_q^\dagger b_q} + e^{-iKa} e^{i\sum_q qab_q^\dagger b_q}) + \omega \sum_q b_q^\dagger b_q - \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \sum_q (b_q^\dagger + b_q) \\
\hat{H}_{ph} \; c_0 \mid K> &= c_0 H \; c_0^\dagger c_0 \mid K> \\
&= E_K \; c_0 \mid K> \; .
\end{aligned}
$$

No, točno rješenje sistema može zbog (4) biti i svojstvena valna funkcija operatora $b_{q=0}$ sa svojstvenom vrijednošću $-\frac{1}{\sqrt{N}}\lambda/\omega$, [6],

$$
\sqrt{N} \; b_{q=0} \mid K> = \sum_j b_j \mid K> = -\lambda/\omega \mid K> \quad . \tag{36}
$$

Stoga, opći oblik fononskog dijela valne funkcije može biti dan s

$$
\begin{aligned}
c_0 \mid K> &= [\sum_n g_n \prod_j e^{-1/2|\xi_{n,j}|^2} e^{\xi_{n,j} b_j^\dagger}] \mid 0> \\
\sum_j \xi_{n,j} &= -\lambda/\omega \\
\sum_n g_n g_n^* &= 1 \; ,
\end{aligned} \tag{37}
$$

gdje su g_n i $\xi_{n,j}$ neke općenite kompleksne funkcije svojih indeksa koje treba odrediti dijagonalizaciom hamiltonijana, $\hat{H}_{ph}$. Kako je valna funkcija polarona konstruirana tako da bude svojstveno stanje impulsa, ona mora biti invarijantna na istovremenu prostornu i vremensku inverziju. To nam daje dodatan uvijet na $\xi_{n,j}, \xi_{n,-j}, g_n$.

Posljedica jednakosti (36) je neovisnost ukupne srednje deformacije rešetke o J. Naime, ako uvrstimo u (36) valnu funkciju (37), kombinirajući to s (34) dobivamo

$$
< x_{all} > = < \sum_j x_j > = \sqrt{\frac{1}{M\omega}} \sum_{n,j} g_n g_n^* \frac{\xi_{n,j} + \xi_{n,j}^*}{\sqrt{2}} = -\lambda/\omega \sqrt{\frac{2}{M\omega}} \; .
$$

7.6 Dodatak E: Transformacija SSH Hamiltonijana

7.6.1 Uvod

Sistem elektrona i fonona opisan je SSH hamiltonijanom. Potpun skup elektronskih i fononskih stanja pridruženih nedeformiranoj rešetki u odsustvu elektron-fonon međudjelovanja prikazat ćemo preko potpunog skupa elektronskih i fononskih stanja pridruženih potpuno dimeriziranoj rešetki. U novodefiniranoj bazi, nazovimo je bazom “dimerizirane rešetke”, reprezentirat ćemo elektron-fonon međudjelovanje, [25].

7.6.2 Fononski dio hamiltonijana

Koristeći (27), te konvenciju s indeksima

n parno	$n \to [\ m = n/2,\ l\ ]$
n neparno	$n \to [\ m = (n-1)/2,\ d\ ]$

,

u novim koordinatama, $\chi_{m,i}$, fononskom dijelu SSH-ovog hamiltonijana $H_{SSH,fn}$, (26), možemo pridružiti izraz

$$\begin{aligned} H_{d,fn} &= N(K_1+K_2)u_0^2 + \frac{1}{2}M\sum_m[\dot{\chi}_{m,l}^2 + \dot{\chi}_{m,d}^2] \\ &+ \frac{1}{2}K_1\sum_m[\chi_{m,d}-\chi_{m,l}]^2 + \frac{1}{2}K_2\sum_m[\chi_{m+1,l}-\chi_{m,d}]^2 \ , \end{aligned}$$

gdje se K_1, K_2, mogu aproksimirati s K_r[37]. Na ovaj način, fonone promatramo kao pobuđenja dimerizirane rešetke, za razliku od (26) gdje su oni shvaćeni kao pobuđenja nedimerizirane rešetke.

Ako supstituiramo[38]

$$\chi_{q,j}(t) = \frac{1}{\sqrt{N/2}}\sum_m e^{i(qma-\omega_q t)}\ \chi_{m,j} \ ,$$

jednadžbe gibanja

$$\begin{aligned} M\ddot{\chi}_{m,l}(t) &= K_1[\chi_{m,d}(t)-\chi_{m,l}(t)] + K_2[\chi_{m-1,d}(t)-\chi_{m,l}(t)] \\ M\ddot{\chi}_{m,d}(t) &= K_1[\chi_{m,l}(t)-\chi_{m,d}(t)] + K_2[\chi_{m+1,l}(t)-\chi_{m,d}(t)] \ , \end{aligned}$$

vode na sistem dviju linearnih jednadžbi

$$\begin{aligned} -\omega^2 M\chi_{q,l} &= K_1(\chi_{q,d}-\chi_{q,l}) + K_2(\chi_{q,d}\ e^{-iqa}-\chi_{q,l}) \\ -\omega^2 M\chi_{q,d} &= K_1(\chi_{q,l}-\chi_{q,d}) + K_2(\chi_{q,l}\ e^{iqa}-\chi_{q,d}) \ . \end{aligned}$$

Njihovim rješavanjem dobivamo disperzivnu relaciju

$$\begin{aligned} M\omega_{q,\pm}^2 &= K_1+K_2 \pm S_q \\ S_q &= \sqrt{(K_1+K_2)^2 - 2K_1K_2(1-\cos{(qa)})} \ , \end{aligned}$$

i skup rješenja dan s

$$\begin{aligned} \chi_{q,a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\ \chi_{q,d} + \frac{K_1+K_2\ e^{-iqa}}{\sqrt{S_q}}\ \chi_{q,l}\right) & \omega_{q,a} = \omega_{q,-} \\ \chi_{q,o} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{K_1+K_2\ e^{iqa}}{\sqrt{S_q}}\ \chi_{q,d} + \ \chi_{q,l}\right) & \omega_{q,o} = \omega_{q,+} \end{aligned} \tag{38}$$

Indeks a označava akustičnu granu, dok indeks o optičku granu. Obje su prikazane na slici 25.

U bazi operatora stvaranja i poništavanja

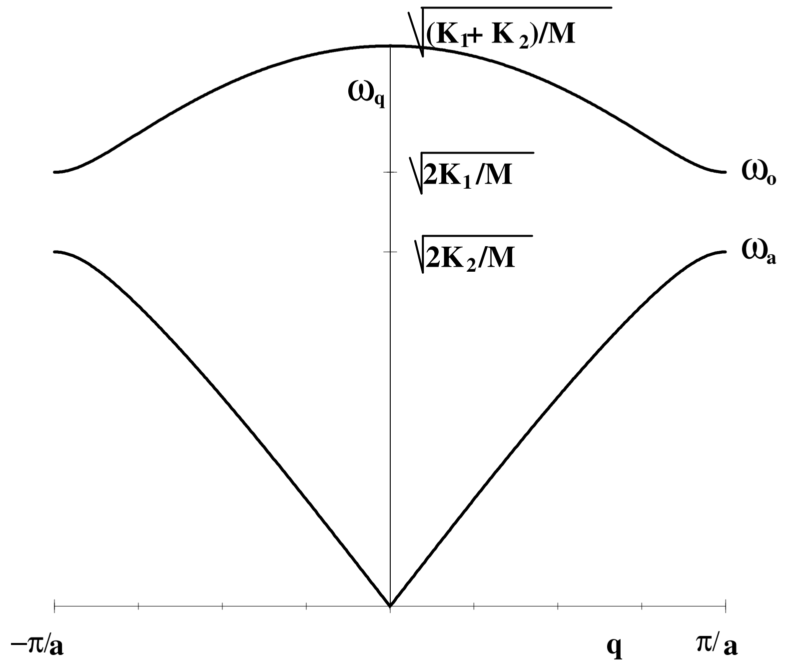
$$\chi_{q,j} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{q,j} + b_{-q,j}^\dagger) \ ,$$

$H_{d,fn}$ pridružen je izraz

$$H_{d,fn} = \sum_q(\omega_{q,a}\ b_{q,a}^\dagger b_{q,a} + \omega_{q,o}\ b_{q,o}^\dagger b_{q,o}) + konst \ .$$

[37] K_1 i K_2 su efektivne konstante elastičnosti za dvostruku i jednostruku vezu, redom, koje se dobiju renormalizacijom konstante elastičnosti K_r u aproksimaciji slučajnih faza (RPA), [26]. Unutar adijabatske aproksimacije K_1 i K_2 su isti.

[38] N je broj CH skupina.



Slika 25: Akustična i optička grana fononskog spektra, $K_1 = 3/2\ K_2$.

7.6.3 Elektronki dio SSH-ovog hamiltonijana i elektron-fonon međudjelovanje

Koristeći (27), te konvenciju s indeksima koju smo uveli u 7.6.2, za $H_{SSH,el-int}$, (28), možemo pisati

$$\begin{aligned} H_{SSH,el-int} &= H_{d,el} + H_{d,int} \\ H_{d,el} &= -\sum_m \{(t_0+\Delta)(c^\dagger_{m,l}c_{m,d} + c^\dagger_{m,d}c_{m,l}) + (t_0-\Delta)(c^\dagger_{m+1,l}c_{m,d} + c^\dagger_{m,d}c_{m+1,l})\} \\ H_{d,int} &= \alpha\sum_m \{(\chi_{m,d}-\chi_{m,l})(c^\dagger_{m,l}c_{m,d} + c^\dagger_{m,d}c_{m,l}) \\ &\quad +(\chi_{m+1,l}-\chi_{m,d})(c^\dagger_{m+1,l}c_{m,d} + c^\dagger_{m,d}c_{m+1,l})\}\ . \end{aligned} \tag{39}$$

Supstituirajući

$$\begin{aligned} c^\dagger_{k,j} &= \frac{1}{\sqrt{N/2}}\sum_m (-)^m\, e^{ikma}\, c^\dagger_{m,j} \\ \chi_{q,j} &= \frac{1}{\sqrt{N/2}}\sum_m e^{iqma}\, \chi_{m,j}\ , \end{aligned}$$

za $H_{d,el}$ se dobiva

$$\begin{aligned} H_{d,el} &= -\sum_k (\Lambda_k\ c^\dagger_{k,l}c_{k,d} + \Lambda^*_k\ c^\dagger_{k,d}c_{k,l}) \\ \Lambda_k &= e^{-ikd}\,(\Delta_k + i\ t_k) \qquad \Delta_k = 2\Delta\cos(kd) \qquad t_k = 2t_0\sin(kd)\ . \end{aligned}$$

$H_{d,el}$ dijagonalizira

$$c^\dagger_{k,v} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\Lambda^*_k}{R_k}c^\dagger_{k,d} + c^\dagger_{k,l}\right) \qquad R_k = \sqrt{\mid \Lambda_k \mid}$$

$$c^\dagger_{k,c} \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}(c^\dagger_{k,d} - \frac{\Lambda_k}{R_k} c^\dagger_{k,l}) \; . \tag{40}$$

Odnosno dobiva se

$$H_{d,el} = \sum_k R_k (c^\dagger_{k,c} c_{k,c} - c^\dagger_{k,v} c_{k,v}) \; .$$

Ovaj elektronski spektar, primjetimo, već smo upoznali na slici 24.

7.6.4 $H_{d,int}$ u bazi dimerizirane rešetke

Želimo prikazati $H_{d,int}$, (39), u reprezentaciji dimerizirane rešetke. Zato će nam trebati slijedeće transformacije koje se dobiju inverzijom (38) i (40)

$$\chi_{q,l} \;=\; L_{q,a} \;\; \chi_{q,a} + L_{q,o} \;\; \chi_{q,o} \qquad\qquad \chi_{q,d} \;=\; D_{q,a} \;\; \chi_{q,a} + D_{q,o} \;\; \chi_{q,o}$$

$$L_{q,a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{K_1 + K_2 \; e^{iqa}}{S_q} \qquad\qquad D_{q,a} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$L_{q,o} = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad\qquad D_{q,o} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{K_1 + K_2 \; e^{-iqa}}{S_q}$$

$$c^\dagger_{k,l} \;=\; A^*_{k,v} \;\; c^\dagger_{k,v} + A^*_{k,c} \;\; c^\dagger_{k,c} \qquad\qquad c^\dagger_{k,d} \;=\; B^*_{k,v} \;\; c^\dagger_{k,v} + B^*_{k,c} \;\; c^\dagger_{k,c}$$

$$A^*_{k,v} = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad A^*_{k,c} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Lambda^*_k}{R_k} \qquad\qquad B^*_{k,v} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Lambda_k}{R_k} \qquad B^*_{k,c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \; .$$

Sada možemo izraziti $W_{jjj}(k,q)$, iz općeg izraza (29), pomoću upravo definiranih koeficijenata

$$\begin{aligned}
W_{vva}(k,q) &= (D_{q,a} - L_{q,a})(A^*_{k+q,v} B_{k,v} + B^*_{k+q,v} A_{k,v}) \\
&+ (D_{q,a} - L_{q,a} e^{iqa})(B^*_{k+q,v} A_{k,v} e^{ika} + A^*_{k+q,v} B_{k,v} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{vvo}(k,q) &= (D_{q,o} - L_{q,o})(A^*_{k+q,v} B_{k,v} + B^*_{k+q,v} A_{k,v}) \\
&+ (D_{q,o} - L_{q,o} e^{iqa})(B^*_{k+q,v} A_{k,v} e^{ika} + A^*_{k+q,v} B_{k,v} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{cca}(k,q) &= (D_{q,a} - L_{q,a})(A^*_{k+q,c} B_{k,c} + B^*_{k+q,c} A_{k,c}) \\
&+ (D_{q,a} - L_{q,a} e^{iqa})(B^*_{k+q,c} A_{k,c} e^{ika} + A^*_{k+q,c} B_{k,c} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{cco}(k,q) &= (D_{q,o} - L_{q,o})(A^*_{k+q,c} B_{k,c} + B^*_{k+q,c} A_{k,c}) \\
&+ (D_{q,o} - L_{q,o} e^{iqa})(B^*_{k+q,c} A_{k,c} e^{ika} + A^*_{k+q,c} B_{k,c} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{cva}(k,q) &= (D_{q,a} - L_{q,a})(A^*_{k+q,c} B_{k,v} + B^*_{k+q,c} A_{k,v}) \\
&+ (D_{q,a} - L_{q,a} e^{iqa})(B^*_{k+q,c} A_{k,v} e^{ika} + A^*_{k+q,c} B_{k,v} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{cvo}(k,q) &= (D_{q,o} - L_{q,o})(A^*_{k+q,c} B_{k,v} + B^*_{k+q,c} A_{k,v}) \\
&+ (D_{q,o} - L_{q,o} e^{iqa})(B^*_{k+q,c} A_{k,v} e^{ika} + A^*_{k+q,c} B_{k,v} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{vca}(k,q) &= (D_{q,a} - L_{q,a})(A^*_{k+q,v} B_{k,c} + B^*_{k+q,v} A_{k,c}) \\
&+ (D_{q,a} - L_{q,a} e^{iqa})(B^*_{k+q,v} A_{k,c} e^{ika} + A^*_{k+q,v} B_{k,c} e^{-i(k+q)a}) \\
W_{vco}(k,q) &= (D_{q,o} - L_{q,o})(A^*_{k+q,v} B_{k,c} + B^*_{k+q,v} A_{k,c}) \\
&+ (D_{q,o} - L_{q,o} e^{iqa})(B^*_{k+q,v} A_{k,c} e^{ika} + A^*_{k+q,v} B_{k,c} e^{-i(k+q)a}) \; .
\end{aligned}$$

Analizirajmo slijedeće izraze s elektronskim koeficijentima

$$\Lambda_k \;=\; (\cos kd - i \sin kd)(2\Delta \cos kd + i 2 t_0 \sin kd)$$

$$
\begin{aligned}
&= 2\Delta\cos^2 kd + 2t_0\sin^2 kd + i(t_0-\Delta)2\sin kd\cos kd \\
&= R_k\, e^{i\gamma_k} \\
\tan\gamma_k &= \tan kd\,\frac{t_0/\Delta - 1}{1+t_0/\Delta\ \tan^2 kd}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Lambda_k\Lambda_{k+q} &= e^{-i(2k+q)d}\,[\Delta_k\Delta_{k+q} - t_k t_{k+q} + i(t_k\Delta_{k+q} + t_{k+q}\Delta_k)] \\
\varphi_{k,q} &= (2k+q)d \\
\Delta_k\Delta_{k+q} - t_k t_{k+q} &= 4\Delta^2\cos\varphi_{k,q} - 4[t_0^2-\Delta^2]\sin kd\ \sin(k+q)d \\
t_k\Delta_{k+q} + t_{k+q}\Delta_k &= 4t_0\Delta\sin\varphi
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\sqrt{\frac{\Lambda_k\Lambda_{k+q}}{R_kR_{k+q}}} &= e^{-i\varphi_{k,q}}e^{i\Theta_{k,q}} \\
\tan\Theta_{k,q} &= \frac{t_0}{\Delta}\ \tan\varphi_{k,q}\,\frac{1-\tan kd\ \tan(k+q)d}{1-[\frac{t_0}{\Delta}]^2\tan kd\ \tan(k+q)d}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
A^*_{k+q,v}B_{k,v} + B^*_{k+q,v}A_{k,v} &= \frac{1}{2}[e^{-i\gamma_k} + e^{i\gamma_{k+q}}] = \frac{1}{2}\ V_1(k,q) \\
B^*_{k+q,v}A_{k,v}\ e^{ika} + A^*_{k+q,v}B_{k,v}\ e^{-i(k+q)a} &= \frac{e^{-iqd}}{2}[e^{i(\varphi_{k,q}+\gamma_{k+q})} + e^{-i(\varphi_{k,q}+\gamma_k)}] \\
&= \frac{e^{-iqd}}{2}\ V_2(k,q) \\
A^*_{k+q,c}B_{k,c} + B^*_{k+q,c}A_{k,c} &= -\frac{1}{2}[e^{-i\gamma_{k+q}} + e^{i\gamma_k}] = -\frac{1}{2}\ V_1^*(k,q) \\
B^*_{k+q,c}A_{k,c}e^{ika} + A^*_{k+q,c}B_{k,c}e^{-i(k+q)a} &= -\frac{e^{-iqd}}{2}[e^{-i(\varphi_{k,q}+\gamma_{k+q})} + e^{i(\varphi_{k,q}+\gamma_k)}] \\
&= -\frac{e^{-iqd}}{2}\ V_2^*(k,q) \\
A^*_{k+q,c}B_{k,v} + B^*_{k+q,c}A_{k,v} &= \frac{1}{2}[1-e^{i(\varphi_{k,q}-\Theta_{k,q})}] = \frac{1}{2}\ V_3(k,q) \\
B^*_{k+q,c}A_{k,v}e^{ika} + A^*_{k+q,c}B_{k,v}e^{-i(k+q)a} &= \frac{e^{-iqd}}{2}[e^{i\varphi_{k,q}} - e^{-i\Theta_{k,q}}] = \frac{e^{-iqd}}{2}\ V_4(k,q) \\
A^*_{k+q,v}B_{k,c} + B^*_{k+q,v}A_{k,c} &= \frac{1}{2}[1-e^{i(\Theta_{k,q}-\varphi_{k,q})}] = \frac{1}{2}\ V_3^*(k,q) \\
B^*_{k+q,v}A_{k,c}e^{ika} + A^*_{k+q,v}B_{k,c}e^{-i(k+q)a} &= \frac{e^{-iqd}}{2}[e^{-i\varphi_{k,q}} - e^{i\Theta_{k,q}}] = \frac{e^{-iqd}}{2}\ V_4^*(k,q)\quad .
\end{aligned}
$$

Izračunajmo izraze s fononskih koeficijentima. Radi jednostavnosti pretpostavit ćemo da je $K_1 = K_2 = K_r$,

$$
S_q = 2K_r\cos qd
$$

$$
L_{q,a} = \frac{e^{iqb}}{\sqrt{2}} \qquad L_{q,o} = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad D_{q,a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad D_{q,o} = -\frac{e^{-iqb}}{\sqrt{2}}
$$

$$
\begin{aligned}
D_{q,a} - L_{q,a} &= -i\sqrt{2}\,e^{iqd/2}\ \sin qd/2 \\
D_{q,o} - L_{q,o} &= -\sqrt{2}\,e^{-iqd/2}\ \cos qd/2 \\
e^{-iqd}\,(D_{q,a} - L_{q,a}\,e^{iqa}) &= -i\sqrt{2}\,e^{iqd/2}\ \sin 3qd/2 \\
e^{-iqd}\,(D_{q,o} - L_{q,o}\,e^{iqa}) &= -\sqrt{2}\,e^{-iqd/2}\ \cos 3qd/2\ .
\end{aligned}
$$

Tako za matrične elemente $W_{jjj}(k,q)$ dobivamo

$$
W_{vva}(k,q) \quad = \quad -\frac{i}{\sqrt{2}}\,e^{iqd/2}\{\sin(qd/2)\ V_1(k,q) + \sin(3qd/2)\ V_2(k,q)\}
$$

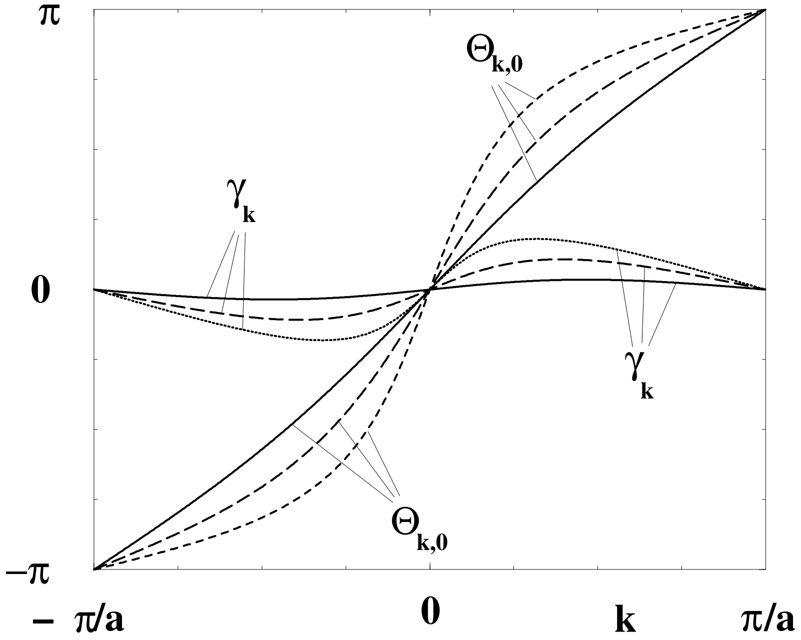
$$
\begin{aligned}
W_{vvo}(k,q) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-iqd/2}\{\cos{(qd/2)}\; V_1(k,q) + \cos{(3qd/2)}\; V_2(k,q)\} \\
W_{cca}(k,q) &= \frac{i}{\sqrt{2}}\, e^{iqd/2}\{\sin{(qd/2)}\; V_1^*(k,q) + \sin{(3qd/2)}\; V_2^*(k,q)\} \\
W_{cco}(k,q) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-iqd/2}\{\cos{(qd/2)}\; V_1^*(k,q) + \cos{(3qd/2)}\; V_2^*(k,q)\} \\
W_{cva}(k,q) &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\, e^{iqd/2}\{\sin{(qd/2)}\; V_3(k,q) + \sin{(3qd/2)}\; V_4(k,q)\} \\
W_{cvo}(k,q) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-iqd/2}\{\cos{(qd/2)}\; V_3(k,q) + \cos{(3qd/2)}\; V_4(k,q)\}\} \\
W_{vca}(k,q) &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\, e^{iqd/2}\{\sin{(qd/2)}\; V_3^*(k,q) + \sin{(3qd/2)}\; V_4^*(k,q)\} \\
W_{vco}(k,q) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-iqd/2}\{\cos{(qd/2)}\; V_3^*(k,q) + \cos{(3qd/2)}\; V_4^*(k,q)\} \ .
\end{aligned}
$$

Pogledajmo na slikama {26} i {27} ponašanje φ_k i $\Theta_{k,q}$ u ovisnosti o energiji dimerizacije. Vidimo da vrijedi

$$
\begin{aligned}
\lim_{\Delta\to t_0} \gamma_k &= 0 \\
\lim_{\Delta\to t_0} \Theta_{k,q} &= \varphi_{k,q} \ ,
\end{aligned}
$$

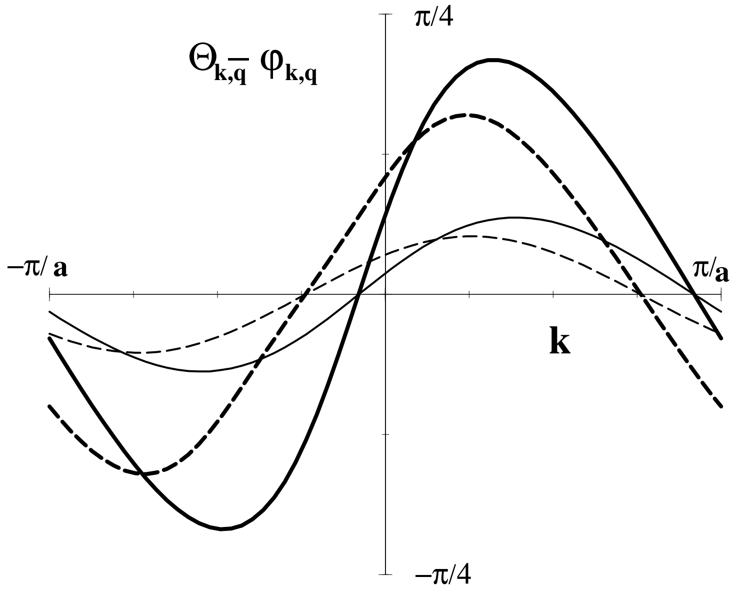
odnosno da za dovoljno dimeriziranu rešetku možemo upotrijebiti slijedeće aproksimacije

$$
\begin{aligned}
W_{vva}(k,q) &\approx -i\sqrt{2}\, e^{iqd/2}\{\sin{(qd/2)} + \sin{(3qd/2)}\ \cos{([2k+q]d)}\} \\
W_{vvo}(k,q) &\approx -\sqrt{2}\, e^{-iqd/2}\{\cos{(qd/2)} + \cos{(3qd/2)}\ \cos{([2k+q]d)}\} \\
W_{cca}(k,q) &\approx i\sqrt{2}\, e^{iqd/2}\{\sin{(qd/2)} + \sin{(3qd/2)}\ \cos{([2k+q]d)}\} \\
W_{cco}(k,q) &\approx \sqrt{2}\, e^{-iqd/2}\{\cos{(qd/2)} + \cos{(3qd/2)}\ \cos{([2k+q]d)}\} \\
W_{cva}(k,q) &\approx \sqrt{2}\, e^{iqd/2}\ \sin{(3qd/2)}\ \sin{([2k+q]d)} \\
W_{cvo}(k,q) &\approx -i\sqrt{2}\, e^{-iqd/2}\ \cos{(3qd/2)}\ \sin{([2k+q]d)} \\
W_{vca}(k,q) &\approx -\sqrt{2}\, e^{iqd/2}\ \sin{(3qd/2)}\ \sin{([2k+q]d)} \\
W_{vco}(k,q) &\approx i\sqrt{2}\, e^{-iqd/2}\ \cos{(3qd/2)}\ \sin{([2k+q]d)} \ .
\end{aligned} \tag{41}
$$



energija dimerizacije	vrsta linije
$\Delta_1/t_0 = 0.3$	točkasta linija
$\Delta_2/t_0 = 0.5$	crtkana linija
$\Delta_3/t_0 = 0.8$	puna linija

Slika 26: Ovisnost φ_k i $\Theta_{k,0}$, o k, gdje je Δ_i, energije dimerizacije, parametar.



energija dimerizacije	q	vrsta linije
$\Delta_1/t_0 = 0.5$	$qa = 0.5$	debela puna linija
$\Delta_1/t_0 = 0.5$	$qa = 1.5$	debela crtkana linija
$\Delta_2/t_0 = 0.8$	$qa = 0.5$	tanka puna linija
$\Delta_2/t_0 = 0.8$	$qa = 1.5$	tanka crtkana linija

Slika 27: Ovisnost $\Theta_{k,q}$, o k, gdje su Δ_i, energije dimerizacije, te q, parametri.

8 Literatura

[1] S. I. Pekar, "Untersuchungen über die Elektronentheorie der Kristalle." Akademie Verlag, Berlin, 1954.

[2] L. D. Landau, Physik. Z. Sowjetunion 3, (1933) 644.

[3] D. Emin, Phys. Today (1962) 34.

[4] H. Fröhlich, Advan. Phys. 3, (1954) 325.

[5] T. Holstein, Ann. Phys. 8 (1959), 325.

[6] D. Feinberg, S. Ciuchi and F. de Paquale, J. Mod. Phys. B 4 (1990) 1395.

[7] D. Emin, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 1544; D. Emin and M. S. Hillery, Phys. Rev. B 39 (1989) 6575.

[8] S. Nakajima, Y. Toyosawa and R. Abe, The physics of elementary excitations (Springer-Verlag) p. 263-84.

[9] H. B. Shore and L. M. Sander, Phys. Rev. B 7 (1973) 4537.

[10] A. Klamt, J. Phys. C 21 (1988) 1953.

[11] K. H. Höck, H. Nickisch and H. Thomas, Helv. Phys. Acta 56 (1983) 237.

[12] G. Wellein, H. Roder and H. Fehske, Phys. Rev. B 53 (1996) 9666.

[13] Y. Toyozawa, Prog. Theor. Phys. 26 (1961) 29.

[14] Numeričku metodu i pripadajući software razvio je I. Batistić.

[15] S. Pissanetzky, Sparse Matrix Technology (Academic press, London, 1984), p. 220.

[16] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations (Birkhäuser Boston, 1985).

[17] R. S. Kohlman, J. Joo and A. J. Epstein, in Physical properties of polymers handbook, edited by J. Mark (AIP press, in press).

[18] H. Huruki and S. Kurita, Phys. Rev. B 39 (1989) 5706.

[19] S. Barišić, J. Labbé and J. Friedel, Phys. Rev. Lett. 25 (1970) 919; S. Barišić, Phys. Rev. B 5 (1972) 932.

[20] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 1698; Phys. Rev. B 22 (1980) 2099.

[21] D. Baeriswyl and A. R. Bishop, J. Phys. C 21 (1988) 339.

[22] D. K. Campbell, A. R. Bishop and K, Fesser, Phys. Rev. B 26 (1982) 6862.

[23] G. D. Mahan, Many-particle physics (Plenum press, New York, 1990), p. 286.

[24] P. Gosar, J. Phys. C 12 (1975) 3584.

[25] Analizu SSH hamiltonijana u bazi dimerizirane rešetke predložio je S. Barišić.

[26] I. Batistić and A. R. Bishop, Phys. Rev. B 45 (1992) 5282.