

ДИПЛОМСКИ РАД

ЕЛЕКТРОНСКИ ТРАНСПОРТ У  
ЈЕДНОДИМЕНЗИОНАЛНИМ  
МОДЕЛИМА ОРГАНСКИХ КРИСТАЛА

Стефан Миленковић

Физички Факултет, Београд

1. јул 2011.

# Садржај

<b>1</b>	<b>Увод</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Теоријски принципи</b>	<b>4</b>
2.1	Хамилтонијан . . . . .	4
2.2	Богољубовљева теорема . . . . .	5
2.3	Унитарна трансформација . . . . .	6
2.3.1	Фермионски оператори . . . . .	7
2.3.2	Бозонски оператори . . . . .	8
2.4	Трансформисани Holstein-ов Хамилтонијан и једначине $f$ -коэффицијената . . . . .	8
2.4.1	Електронски члан $H_e$ . . . . .	8
2.4.2	Фононски члан $H_{ph}$ . . . . .	9
2.4.3	Интеракциони члан $H_{e-ph}$ . . . . .	9
2.4.4	Једначине $f$ -коэффицијената . . . . .	10
2.5	Једначине $f$ -коэффицијената за нелокалну електрон-фонон интеракцију . . . . .	12
2.5.1	Трансформација нелокалне електрон-фонон интеракције . . . . .	12
2.5.2	Једначине $f$ -коэффицијената . . . . .	13
2.6	Покретљивост . . . . .	14
2.6.1	Струја и покретљивост за Holstein-ов Хамилтонијан . . . . .	14
2.6.2	Струја и покретљивост за нелокалну електрон-фонон интеракцију . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Нумерички резултати</b>	<b>18</b>
3.1	$f$ -коэффицијенти за Holstein-ов Хамилтонијан . . . . .	18
3.2	$f$ -коэффицијенти за нелокалну електрон-фонон интеракцију . . . . .	21
3.3	Покретљивост носилаца . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Закључак</b>	<b>26</b>

*Овај дипломски рад—рађен у Лабораторији за примену рачунара у науци, на Институту за физику—бих посветио породици и пријатељима којима дугујем неизмерну захвалност за подршку коју су ми пружили током студирања. Желео бих да се захвалим и свом ментору Др Ненаду Вукмировићу на труду и стрпљењу које је уложио током израде овог рада и од кога сам у протеклих неколико месеци заиста пуно научио о решавању проблема у физици, као и самој физици уопште.*

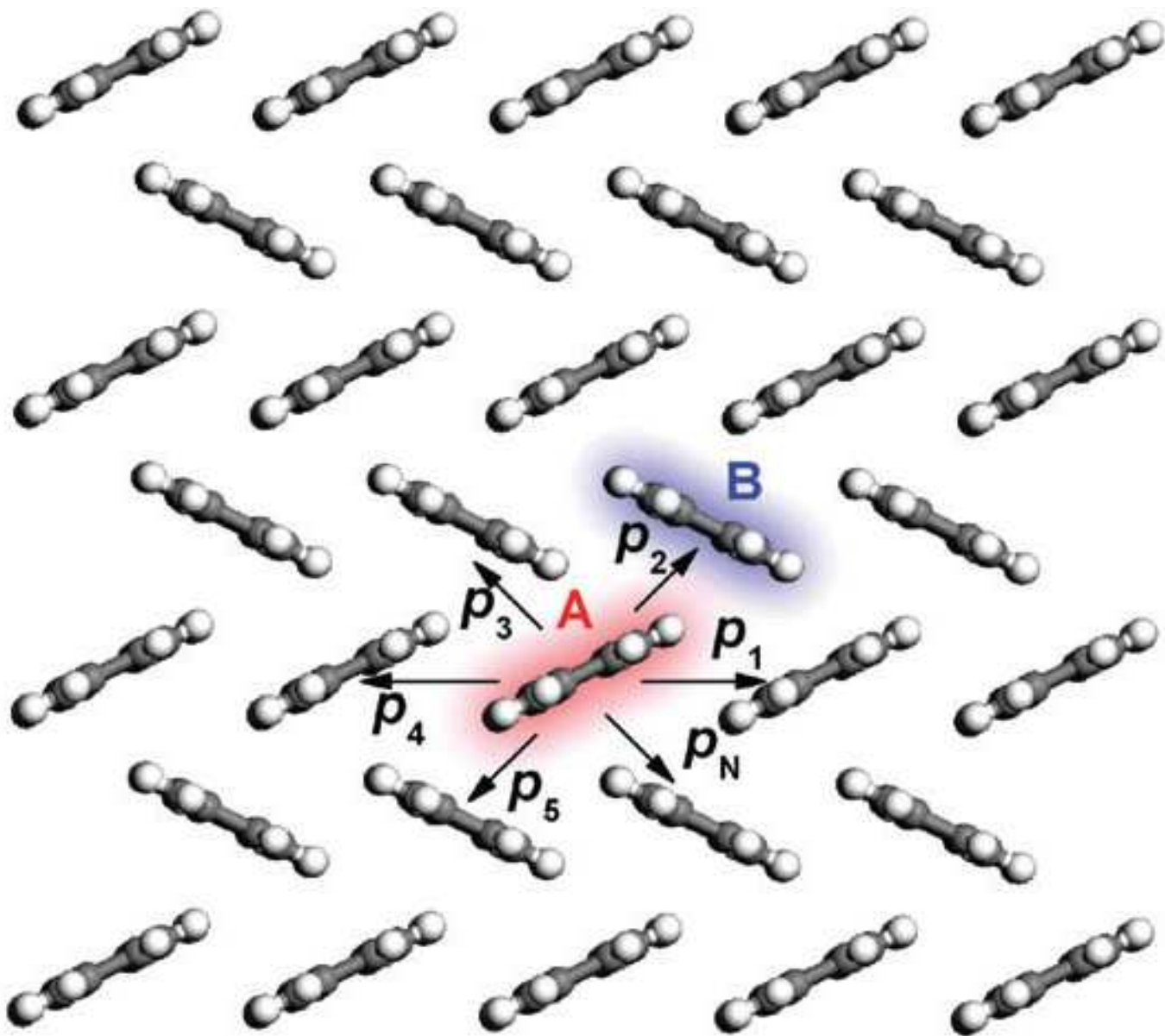
# 1 Увод

Вођен обећавајућим технолошким применама, научни интерес за органске полупроводнике континуално расте. Нове електронске компоненте базиране на органским материјалима (органске LED диоде, органске соларне ћелије...), су се покзале као потенцијална замена конвенционалних неорганских компоненти. Упркос многим скорашњим експерментима комплетно теоријско разумевање и интерпретација неколико кључних својстава ових материјала још увек изостаје. Наиме, електронски транспорт у органским полупроводницима често приказује веома другачије понашање у поређењу са конвенционалним полупроводницима. Стандардни модели, као што је зонски транспорт, који успешно описују неорганске кристале у овом случају не могу бити директно примењени на органске кристале [3], па се мора приступити новим теоријским и нумеричким концептима погоднијим за решавање овог проблема.

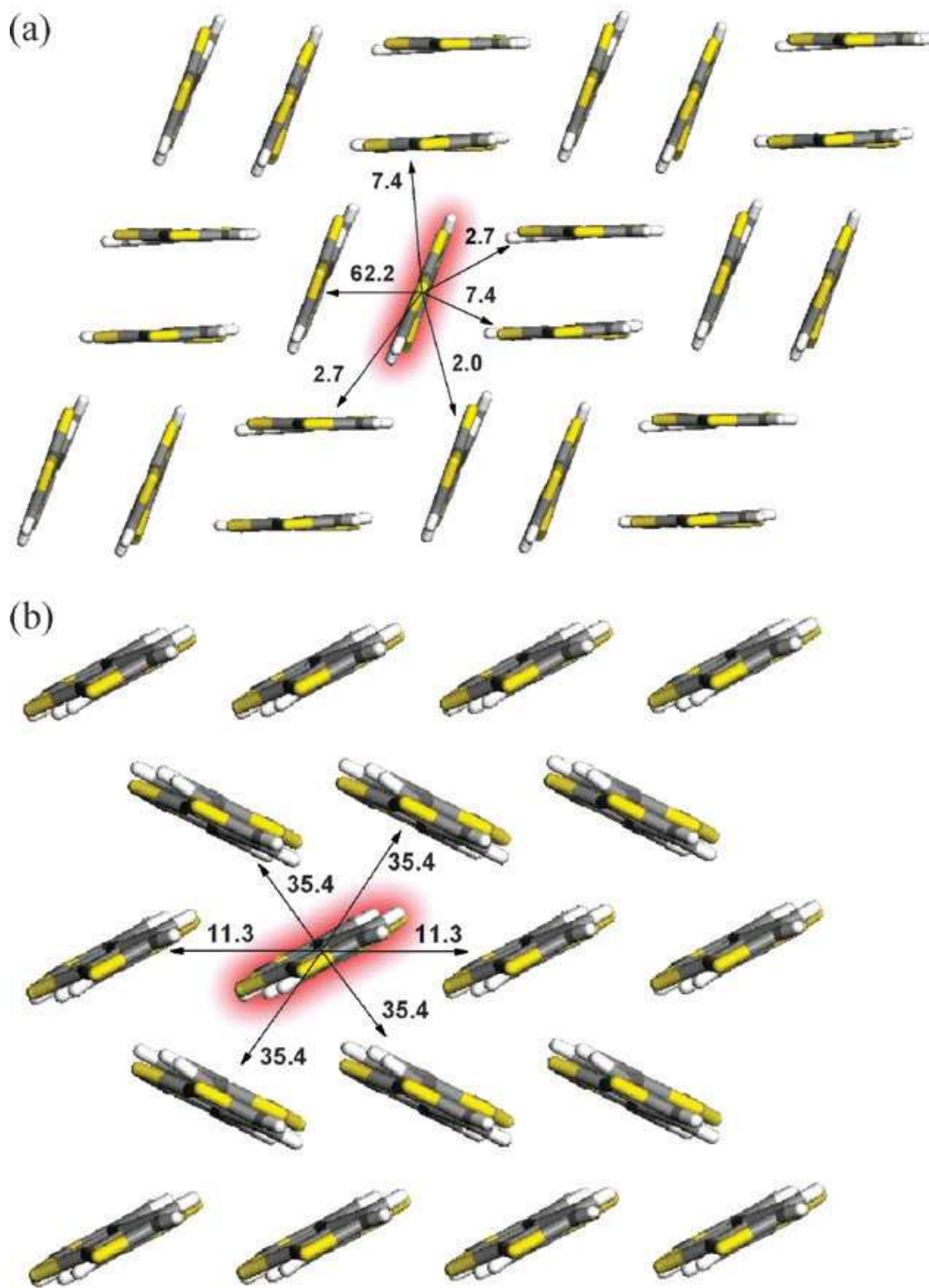
Концепт који је широко прихваћен у разматрању транспортних појава је тзв. концепт *поларона* [6], који описује квази честицу сачињену од носиоца наелектрисања и поларизационог облака решетке, везаног за носиоца. Величина поларона је, дакле, врло важан параметар у опису транспортних феномена. Наиме, познато је да је ковенционална band-теорија примењива само ако је електрон-фонон интеракција занемарљива (нема поларона) или јако мала (велики поларони) у поређењу са интегралом преклапања, док, напротив, код органских кристала електрон-фонон интеракција има доминантну улогу (мали поларон). Ова два супротна гранична случаја нису успела да покрију најинтересантније органске полупроводнике са јаком електронском спрегом, што је и разлог некомплетног разумевања транспорта наелектрисања у органским кристалима, те се о механизму транспорта још увек расправља. Дилему је још више продубио експеримент Варте и Карла[?], који је показао да механизам транспорта зависи од температуре: зонски транспорт на ниским температурама и hopping-транспорт на високим температурама. Прелаз са једног механизма на други се дешава на собној температури, а од есенцијалног је значаја да баш на тој температури познајемо покретљивост у органским материјалима.

Органски кристали, сами по себи, најчешће чине 2D-слојеве као на сликама 1 и 2. У тим слојевима може се издвојити доминантан 1D правац, те је циљ овог рада разматрање утицаја, најпре локалне, а касније и не-локалне електрон-фонон интеракције на транспортне појаве баш у 1D органским кристалима. Најпре ће, у одељку 2.1 бити дата формална анализа Хамилтонијана који описује овакве системе, а у одељку 2.2 бити изложена Богољубовљева теорема. У одељцима 2.3 и 2.4 репрезентовани су аналитички резултати претходних радова [1] за оптималне поларонске коефицијенте, а потом, у одељку 2.5 по први пут су изведене једначине за те коефицијенте у присуству нелокалне електрон-фонон интеракције. У одељку 2.6 изведен је аналитички израз за покретљивост у Holstein-овом Хамилтонијану полазећи од Кубоове формуле, док је у 2.7 аналитички изведен израз за стужу у Хамилтонијану са нелокалном електрон-фонон интеракцијом.

У одељцима 3.1 и 3.2 су дати нумерички резултати добијени у случају локалне и нелокалне интеракције, док су у 3.3 наведени и коментарисани резултати добијени у раду [1]



Слика 1: Органски кристали.



Слика 2: Органички кристали.

## 2 Теоријски принципи

Теорије конструисане да опишу транспорт су биле успешне само за специјалне јачине електрон-фонон интеракције, док је општа теорија примењива за све параметре још увек недоступна. Недавно, проблему се приступило на следећи начин[4]: вибрације су третиране класично, а затим је решавана временски зависна Шредингерова једначина. Овако добијени резултати успешно су репродуковали тренд температурно зависне покретљивости у ОМК међутим, пошто су вибрације третиране класично они су били валидни само на високим температурама где је термална енергија већа од средње фононске фреквенце. Јасно је да, комплетно разумевање проблема транспорта у ОМК може бити добијено само микроскопском теоријом која третира Хамилтонијан самоусагласно.

Микроскопски модели који експлицитно укључују електрон-фонон интеракцију у Хамилтонијан, са физичке тачке гледишта нуде много боље резултате. Први овакав модел дао је Holstein[6] и овај модел је широко коришћен да опише транспортне појаве и размену енергије између молекула у чворовима решетке. Овај модел је био у стању да репродукује резултате за јаку и слабу електрон-фонон интеракцију али је прелазни режим остао нејасан.

Варијациони приступ, предложен од Yarkony-а и Silbey-а [7], проблему транспорта, понудио је обећавајући правац у решавању проблема јер може да обезбеди оптималну партиципу Хамилтонијана на основни и пертурбацију, чинећи оправданом пертурбацију у интермедијалном режиму. Лоша страна Yarkony-Silbey метода је коришћење само једног варијационог коефицијента и самим тим, мањак флексибилности. Као побољшање, ми ћемо модификовати Holstein-ов Хамилтонијан, а затим показати да Богољубовљева теорема може бити основ за варијациони приступ и заједно са Merrifield-овом трансформацијом[1], послужити за израчунавање оптималног стања поларона. На крају, ћемо извести изразе за покретљивост и то за локалну, а потом и нелокалну електрон-фонон интеракцију.

### 2.1 Хамилтонијан

Holstein-ов[6] модел Хамилтонијана који је, као што је речено, широко коришћен за описивање транспорта у ОМК састоји се од електронског, фононског и интерагујућег дела који опсује линеарно и локално купловане електроне и фононе. Због једноставности посматраћемо само један молекул по чвору решетке описан Einstein-овим моделом фонона без дисперзије, који добро објашњава интрамолекуларне моде у ОМК . Овај Хамилтонијан у репрезентацији друге квантизације је дат са( $\hbar=1$ )

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (2.1)$$

где су

$$H_e = \sum_{n,m} J_{nm} a_n^\dagger a_m \quad (2.2)$$

$$H_{ph} = \omega \sum_n a_n^+ a_n \quad (2.3)$$

и

$$H_{e-ph} = g\omega \sum_n a_n^+ a_n (b_n^+ + b_n) \quad (2.4)$$

Овде су  $a_n^+$  и  $a_n$  креациони и анихилациони оператори електронских екситација (електрон или шупљина) на  $n$ -том чвору,  $\omega$  је фононска фреквенца,  $b_n^+$  и  $b_n$  оператори креације и анихилације за фононе на одговарајућем чвору. Такође, претпоставићемо да је концентрација носилаца наелектрисања мала, па можемо радити у једночестичном потпростору.  $J_{nm}$  су интегрални преклапања између локализованих електронских стања на чворовима  $n$  и  $m$ . Треба нагласити да због транслационе симетрије  $J_{nm}$  зависи само од  $|n - m|$ .

Последњи члан у Хамилтонијану представља електрон-фонон интеракцију чија је јачина одређена бездимензионом константом  $g$ . Као што је речено, претпоставља се да електрон интерагује локално и линеарно са фононима. Очигледно је да се комплетно разумевање проблема може постићи само ако се и локална и нелокална интеракција узму у обзир. Одговарајући облик нелокалне интеракције добићемо ако претпоставимо да хопинг интегрални линеарно зависе од помераја молекула тј. да су облика

$$J = J_0 + \alpha(u_{n+1} - u_n) \quad (2.5)$$

где у  $u_n$  померај молекула од равнотежног положаја. Када се оператори помераја запишу преко оператора креације и анихилације фонона добијамо

$$H_{nonloc} = \phi\omega/2 \sum_n (a_n^+ a_{n-1} + a_{n-1}^+ a_n - a_{n+1}^+ a_n - a_n^+ a_{n+1})(b_n^+ + b_n). \quad (2.6)$$

Као што се види, нелокални члан узима у обзир само интеракцију са најближим чворовима решетке. Да би прешли на варијациони рачун у следећем поглављу ћемо дефинисати горњу границу на слободну енергију генералног електрон-фонон система.

## 2.2 Богољубовљева теорема

Слободна Хелмхолцова енергија  $F$  за систем дефинисан Хамилтонијаном  $H$  на температури је дата са

$$F_H = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (2.7)$$

где је  $\beta = 1/k_B T$ . За интерагујуће електрон-фонон системе рачунање слободне енергије је тежак задатак. Срећом, следећа неједнакост важи због конвексности експоненцијалне функције.

*Богољубовљева теорема:* Ако су  $H$  и  $H'$  два хермитска оператора таква да су трагови  $\text{Tr} e^{-\beta H}$  и  $\text{Tr} e^{-\beta H'}$  коначни за све вредности  $\beta > 0$ , тада је, за све вредности  $\beta > 0$ ,



$$-\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta H} \leq -\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta H'} + \langle H - H' \rangle_{H'} \equiv F_H^B(H') \quad (2.8)$$

где се усредњавање врши по пробном Хамилтонијану  $H'$

$$\langle H - H' \rangle_{H'} = \frac{\text{Tr} [(H - H') e^{-\beta H'}]}{\text{Tr} e^{-\beta H'}}. \quad (2.9)$$

Богољубовљева теорема обезбеђује ограничење са горње стране  $F_H^B(H')$  на слободну енергију  $F_H$  на основу пробног Хамилтонијана  $H'$ . Ако пробни Хамилтонијан садржи подесиве варијационе параметре, можемо добити оптималну поделу на основни и пертурбујући део минимизацијом Богољубовљеве границе по овим параметрима.

Узимајући у обзир, да је слободна енергија инваријантна на унитарне трансформације Хамилтонијана, варијациони пробни Хамилтонијан систематски можемо добити усвајањем унитарне трансформације која садржи варијационе параметре. Нека унитарна трансформација  $U(U^\dagger U = 1)$  делује на хамилтонијан  $H$  тако да је  $\tilde{H} = U^\dagger H U \equiv \tilde{H}_0 + \tilde{V}$  где је  $H_0$  основни део чији експонент  $e^{-\beta \tilde{H}_0}$  може бити израчунат, Богољубовљеве ограничење постаје

$$F_H^B(H') = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta \tilde{H}_0} + \langle \tilde{V} \rangle_{\tilde{H}_0}. \quad (2.10)$$

Дакле, на основу Богољубовљеве теореме, конструишемо коначно-температурну варијациону теорију која нам даје оптимални основни део Хамилтонијана за електрон-фонон системе.

## 2.3 Унитарна трансформација

Као што смо већ рекли Holstein-ов Хамилтонијан је дат са

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}. \quad (2.11)$$

Овај Хамилтонијан има егзактна решења у два гранична случаја :

- Када је константа електрон-фонон везе нула,  $H$  је дијагоналан у  $k$ -простору решетке, са зонском енергијом  $E(k) = \sum_{n' \neq 0} J_{n'} e^{ikn'}$ . Ова репрезентација одговара слободном електрону.
- Када су интегрални преклапања једнаки нули ( $J = 0$ ) Хамилтонијан може бити дијагонализован тзв. трансформацијом малог поларона .

Дакле за јаку и слабу спрегу пертурбациони приступ је оправдан и прецизан. Међутим, за интермедијални режим немамо мале параметре по којима би могли да развијемо пертурбацију. Да би добили смислену поделу Хамилтонијана на основни и пертурбујући део применићемо Merrifield-ову трансформацију,

$$U = e^{\sum_n a_n^\dagger a_n \sum_m f_m (b_{n+m} - b_{n+m}^\dagger)}, \quad (2.12)$$

где су  $f_m$  реални параметри које треба одредити варијационо. Овде  $m$  означава релативни чвор решетке. За кристале са симетријом на инверзију,  $f_m = f_{-m}$ . Оптимална трансформација дефинисана са  $f_m$  може зависити од температуре због варијационе процедуре. Приметимо да за  $f_m = \delta_m \cdot f$  трансформација постаје локална и добијамо једнопараметарски Yarkony-Silbey[7] метод, док се за  $f_m = \delta_m \cdot g$  враћамо на трансформацију малог поларона. Дакле, Merrifield-ова трансформација је уопштење трансформације малог поларона која укључује нелокалне помераје фонона око електрона.

### 2.3.1 Фермионски оператори

Да би трансформисали Хамилтонијан најпре морамо наћи трансформационе законе фермионских и бозонских оператора. У ову сврху искористићемо Baker-Hausdorff-ову лему

$$e^{\tilde{B}} \tilde{A} e^{-\tilde{B}} = \tilde{A} + [\tilde{B}, \tilde{A}] + \frac{1}{2!} [\tilde{B}, [\tilde{B}, \tilde{A}]] \dots \quad (2.13)$$

Најпре посматрамо фермионске операторе, чије су комутационе релације

$$\{a_n, a_m^\dagger\} = \delta_{nm}.$$

Примењујемо Baker-Hausdorff-ову лему

$$A_n^\dagger = U^\dagger a_n^\dagger U = a_n^\dagger + \left[ \sum_m a_m^\dagger a_m \sum_{n'} f_{n'-m} (b_{n'}^\dagger - b_{n'}), a_n^\dagger \right] + \dots$$

Посматрајмо члан првог реда. Као што се види бозонски део можемо извући испред комутатора те остаје

$$\begin{aligned} \left[ \sum_m f_{n'-m} a_m^\dagger a_m, a_n^\dagger \right] &= \sum_m f_{n'-m} a_m^\dagger a_m a_n^\dagger - a_n^\dagger \sum_m f_{n'-m} a_m^\dagger a_m \\ &= \sum_m f_{n'-m} a_m^\dagger (\delta_{nm} - a_n^\dagger a_m) - a_n^\dagger \sum_m f_{n'-m} a_m^\dagger a_m \\ &= \sum_m f_{n'-m} a_m^\dagger \delta_{mn} \\ &= f_{n'-n} a_n^\dagger. \end{aligned}$$

Пошто овај израз фигурише у свим комутаторима коначан израз је у ствари развој експоненцијалне функције

$$A_n^\dagger = a_n^\dagger - a_n^\dagger \sum_m f_{m-n} (b_m - b_m^\dagger) + \frac{a_n^\dagger}{2!} \left( \sum_m f_{m-n} (b_m - b_m^\dagger) \right)^2 \dots$$

$$A_n^\dagger = a_n^\dagger e^{-\sum f_{m-n}(b_m - b_m^\dagger)} \quad (2.14)$$

Аналгоно и за оператор анхилације

$$A = a e^{\sum f_{m-n}(b_m - b_m^\dagger)}.$$

### 2.3.2 Бозонски оператори

Исту процедуру примењујемо на бозонске операторе узимајући у обзир комутационе релације које важе за њих

$$[b_n, b_m^\dagger] = \delta_{nm}$$

$$B_n = b_n + \left[ \sum_m a_m^\dagger a_m \sum_{n'} f_{n'} (b_{m+n'}^\dagger - b_{m+n'}), b_n \right].$$

Посматрајмо члан првог реда

$$\begin{aligned} \sum_m a_m^\dagger a_m \sum_{n'} f_{n'} [b_{m+n'}^\dagger, b_n] &= - \sum_m a_m^\dagger a_m \sum_{n'} f_{n'} \delta_{m+n', n} \\ &= - \sum f_{n-m} a_m^\dagger a_m, \end{aligned}$$

из кога се види да су сви комутатори вишег реда нуле. Трансформационе једначине су онда

$$B_n = b_n - \sum f_{n-m} a_m^\dagger a_m, \quad (2.15)$$

и за оператор креације

$$B_n^\dagger = b_n^\dagger - \sum f_{n-m} a_m^\dagger a_m.$$

## 2.4 Трансформисани Holstein-ов Хамилтонијан и једначине $f$ -коэффицијената

Са познатим законима трансформације фермионских и бозонских оператора лако долазимо до закона трансформације Хамилтонијана. Кренимо редом:

### 2.4.1 Електронски члан $H_e$

Посматрајмо електронски део Хамилтонијана

$$H_e = \sum_{n,m} J_{nm} a_n^\dagger a_m$$

Када применимо Merrifield-ову трансформацију

$$\tilde{H}_e = U^\dagger H_e U$$

$$\tilde{H}_e = \sum_{n,m} J_{nm} a_n^\dagger e^{-\sum_{m'} f_{m'}(b_{n+m'} - b_{n+m'}^\dagger)} a_m e^{\sum_{m'} f_{m'}(b_{m+m'} - b_{m+m'}^\dagger)}$$

где ћемо означити  $\theta_n^\dagger = e^{-\sum_{m'} f_{m'}(b_{n+m'} - b_{n+m'}^\dagger)}$ . Оператори  $a_n$  се могу записати у  $k$ -репрезентацији као

$$a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k e^{-ikm}.$$

Узимајући ово у обзир електронски део Хамилтонијана је у  $k$ -репрезентацији дат са

$$\tilde{H}_e = \sum_{k_1, k_2} \sum_{n, m} J_{nm} e^{-ik_1 n} e^{ik_2 m} \theta_n^\dagger \theta_m. \quad (2.16)$$

### 2.4.2 Фононски члан $H_{ph}$

Аналогно, добијамо израз за фононски део Хамилтонијана

$$H_{ph} = \omega \sum_n b_n^\dagger b_n$$

$$\tilde{H}_{ph} = \omega \sum_n (b_n^\dagger - \sum_m f_{n-m} a_m^\dagger a_m) (b_n - \sum_m f_{n-m} a_m^\dagger a_m)$$

$$\tilde{H}_{ph} = \omega \left( \sum_n b_n^\dagger b_n - \sum_{n,m} f_{n-m} a_m^\dagger a_m (b_n^\dagger + b_n) + \sum_{m,m'} f_{n-m} a_m^\dagger a_m f_{n-m'} a_{m'}^\dagger a_{m'} \right)$$

где ћемо сада искористити апроксимацију малог броја честица која је математички формулисана као

$$a_m^\dagger a_m a_{m'}^\dagger a_{m'} \simeq a_m^\dagger a_m \delta_{mm'}.$$

Прелазом на  $k$ -репрезентацију добија се

$$\tilde{H}_{ph} = \omega \sum_q b_q^\dagger b_q - \frac{\omega}{\sqrt{N}} \sum_{k,q} f_q a_{k+q}^\dagger a_k (b_q^\dagger + b_{-q}) + \omega \sum_k \sum_m f_m^2 a_k^\dagger a_k \quad (2.17)$$

### 2.4.3 Интеракциони члан $H_{e-ph}$

Електрон-фонон интеракција

$$H_{e-ph} = g\omega \sum_n a_n^\dagger a_n (b_n^\dagger + b_n)$$

се трансформише на следећи начин

$$\tilde{H}_{e-ph} = g\omega \sum_n a_n^\dagger a_n (b_n^\dagger + b_n - 2 \sum_m f_{n-m} a_m^\dagger a_m)$$

Након апроксимације малог броја честица и преласка на  $k$ -репрезентацију

$$\tilde{H}_{e-ph} = g \frac{\omega}{\sqrt{N}} \sum_{k,q} a_{k+q}^\dagger a_k (b_q^\dagger + b_{-q}) \quad (2.18)$$

Комплетни Хамилтонијан можемо сада написати на следећи начин

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{V}$$

где је основни део  $\tilde{H}_0$  дијагоналан у  $k$ -репрезентацији

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \sum_k \left[ \omega \cdot \left( \sum_m f_m^2 - 2gf_0 \right) + \tilde{J}_k \right] a_k^\dagger a_k + \omega \sum_q b_q^\dagger b_q \\ &\equiv \tilde{H}_e^0 + \tilde{H}_{ph}^0. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Са  $\tilde{J}_k$  смо обележили ренормализовану енергију

$$\tilde{J}_k = \sum_{n,m} \cdot \langle \theta_n^\dagger \theta_m \rangle_0$$

са коначно-температурним ренормализационим факторима

$$\langle \theta_n^\dagger \theta_m \rangle_0 = e^{-1/2 \sum_{m'} (fm' - m - fm' - n)^2 \coth(\beta\omega/2)}.$$

Трансформисани интерагујући део је сложеног облика

$$\tilde{V}' = 1/N \sum_{k_1, k_2} \sum_{n, m} e^{-ik_1 n} e^{ik_2 m} \cdot J_{nm} \cdot (\theta_n^\dagger \theta_m - \langle \theta_n^\dagger \theta_m \rangle_0) a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \frac{\omega}{\sqrt{N}} \sum_{k,q} (g - f_q) \cdot a_{k+q}^\dagger a_k \cdot (b_q^\dagger + b_{-q})$$

где се усредњавање врши по фононским стањима. Приметимо да смо Хамилтонијан поделили на чист електронски део  $\tilde{H}_e^0$ , чист фононски део  $\tilde{H}_{ph}^0$  и пертурбациони део  $\tilde{V}'$ . Намерно смо члан  $\tilde{J}_k$  укључили у основни део и одузели га од интерагујућег да би добили да је средња вредност интеракција идентички једнака нули  $\langle \tilde{V}' \rangle_0$ .

#### 2.4.4 Једначине $f$ -кофицијената

Конструисањем  $\langle \tilde{V}' \rangle_0$  Богољубовљева граница је једноставно  $A \leq -\beta^{-1} \ln \text{Tre}^{-\beta \tilde{H}_0} \equiv A_0$ . Пошто је основни део Хамилтонијана  $\tilde{H}_0 = \tilde{H}_e + \tilde{H}_{ph}$  дијагоналан следи

$$A_0 = -\beta^{-1} \ln \text{Tre}^{-\beta \tilde{H}_e} - \beta^{-1} \ln \text{Tre}^{-\beta \tilde{H}_{ph}}.$$

Надаље ћемо игнорисати незанимљиви фононски део и усредсредити се на допринос "одевених" електронских стања,

$$A_0^e = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta \tilde{H}_e} = -\beta^{-1} \ln \sum_k e^{-\beta \varepsilon_k} \quad (2.21)$$

где је енергија електронске зоне

$$\varepsilon_k = \omega \cdot \left( \sum_m f_m^2 - 2gf_0 \right) + \tilde{J}_k \quad (2.22)$$

Приметимо да је енергија електронске зоне температурно зависна. Ова зависност потиче од температурне зависности вариационих параметара  $\{f_m\}$  и фактора  $\langle \theta_n^\dagger \theta_m \rangle_0$ . Користећи апроксимацију најближих суседа за интеграле преклапања  $J_{nm} = J_0 \cdot \delta_{n,m\pm 1}$  добијамо израз за енергију зоне

$$\varepsilon_k = \omega \cdot \left( \sum_m f_m^2 - 2gf_0 \right) + 2J_{eff} \cos k \quad (2.23)$$

где је  $J_{eff}$

$$J_{eff} = J_0 e^{-\sum_m (f_m^2 - f_m f_{m+1}) \coth(\beta\omega/2)} \quad (2.24)$$

Богољубовљево ограничење се у 1D систему лако добија из једначине (2.23) ,

$$A_0^e = -\beta^{-1} \ln \left\{ \sum_k e^{-2J_{eff}\beta \cos k} \right\}$$

Преласком са суме на интеграл

$$A_0^e = -\beta^{-1} \ln N + \omega \left( \sum_m f_m^2 - 2gf_0 \right) - \beta^{-1} \ln I_0 \{ 2\beta J_{eff} \} \quad (2.25)$$

где је  $N$  величина система, а  $I_0(x)$  Bessel-ова функција прве врсте. За систем дефинисан датим сетом параметара  $(J_0, g, \omega, T)$  минимизујући  $A_0^e$  добијамо оптималан сет коефицијената  $\{f_m\}$ , тј. оптимално стање парцијално "одеведеног" поларона. Као резултат добија се сет једначина

$$f_m - g\delta_m + \frac{J_{eff}}{\omega} \times \frac{I_1(2\beta J_{eff})}{I_0(2\beta J_{eff})} \times (2f_m - f_{m+1} - f_{m-1}) \coth(\beta\omega/2) = 0 \quad (2.26)$$

Помоћу ових једначина рачунамо оптимални скуп  $\{f_m\}$  који минимизује Богољубовљево ограничење слободне енергије. Пошто  $J_{eff}$  зависи од  $f_m$  систем мора бити решен самоусаглашено. Такође  $A_0^e$  може имати више решења, па се морају поредити вредности  $A_0^e$  и одредити прави минимум  $\{f_m\}$ .

## 2.5 Једначине $f$ -коэффицијената за нелокалну електрон-фонон интеракцију

Поступак који смо применили, можемо продужити и на неелокалну електрон фонон интеракцију дату са

$$H_{nl} = \phi\omega/2 \sum_n (a_n^+ a_{n-1} + a_{n-1}^+ a_n - a_{n+1}^+ a_n - a_n^+ a_{n+1})(b_n^+ + b_n).$$

Дакле, најпре ћемо извршити Merrifield-ову трансформацију, а затим израчунати средњу вредност и одузети је од интеракционог, а додати основном делу трансформисаног Хамилтонијана. Након тога наћи ћемо једначине  $f$ -коэффицијената и одредити оптимални скуп истих, већ описаним поступком минимизације Богољубовљевог ограничења.

### 2.5.1 Трансформација нелокалне електрон-фонон интеракције

Као што смо навели на почетку теоријског разматрања, за нелокални члан интеракције узимамо

$$H_{nl} = \phi\omega/2 \sum_n (a_n^+ a_{n-1} + a_{n-1}^+ a_n - a_{n+1}^+ a_n - a_n^+ a_{n+1})(b_n^+ + b_n). \quad (2.27)$$

Оно што нас занима је

$$\tilde{H}_{nl} = U^\dagger H_{nl} U.$$

Користећи законе трансформације фермионских и бозонских оператора добијамо

$$\tilde{H}_{nl} = \phi\omega/2 \sum_n (a_n^+ a_{n-1} \theta_n^\dagger \theta_{n-1} + a_{n-1}^+ a_n \theta_{n-1}^\dagger \theta_n - a_n^+ a_{n+1} \theta_n^\dagger \theta_{n+1} - a_{n+1}^+ a_n \theta_{n+1}^\dagger \theta_n)(b_n^+ + b_n - 2 \sum_m f_{n-m} a_m^\dagger a_m). \quad (2.28)$$

Потребна нам је средња вредност по основном фононском стању, за чије ћемо израчунавање користити следеће формуле

$$\langle (b_a - b_a^\dagger)^{2k} \rangle = (-1/2)^k (\coth(\beta\omega/2))^k \frac{(2k)!}{k!} \quad (2.29)$$

и

$$\langle \theta_n^\dagger \theta_m (b_a - b_a^\dagger) \rangle = -(f_{a-n} - f_{a-m}) e^{-1/2 \sum_l (f_{l-n} - f_{l-m})^2 \coth(\beta\omega/2)} \quad (2.30)$$

Усредњавање ћемо извршити само за прве чланове, а затим, користећи пермутације индекса, проширити на цео нелокални део. Приметимо да  $e^{-1/2 \sum_l (f_{l-n} - f_{l-m})^2 \coth(\beta\omega/2)}$  зависи од релативног растојања  $|n - m|$  па га можемо написати као  $\theta(|n - m|)$ . Дакле, за први члан уз  $(b_n^+ + b_n)$

$$\langle \theta_n^\dagger \theta_{n-1} (b_n - b_n^\dagger) \rangle = -(f_0 - f_1) \theta(1) \quad (2.31)$$

$$\langle \theta_{n-1}^\dagger \theta_n (b_n - b_n^\dagger) \rangle = -(f_1 - f_0) \theta(1) \quad (2.32)$$

$$\langle \theta_n^\dagger \theta_{n+1} (b_n - b_n^\dagger) \rangle = -(f_0 - f_{-1}) \theta(1) \quad (2.33)$$

$$\langle \theta_{n+1}^\dagger \theta_n (b_n - b_n^\dagger) \rangle = -(f_{-1} - f_0) \theta(1). \quad (2.34)$$

При усредњавању чланова уз  $2 \sum_m f_{n-m} a_m^\dagger a_m$  користићемо апроксимацију малог броја честица. Први чан је дат са

$$\langle \sum_m f_{n-m} a_n^\dagger a_{n-1} a_m^\dagger a_m \rangle = f_1 a_n^\dagger a_{n-1} \theta(1)$$

тј. цео нелокални део је

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H}_{nl} \rangle_0 &= -\phi\omega/2 \sum_n \theta(1) [a_n^\dagger a_{n-1} (f_0 - f_1) + a_{n-1}^\dagger a_n (f_1 - f_0) - a_n^\dagger a_{n+1} (f_0 - f_{-1}) - \\ &\quad a_{n+1}^\dagger a_n (f_{-1} - f_0)] - \phi\omega \sum_n \theta(1) [a_n^\dagger a_{n-1} f_1 + a_{n-1}^\dagger a_n f_0 - a_n^\dagger a_{n+1} f_{-1} - a_{n+1}^\dagger a_n f_0] \\ &= -\phi\omega/2 \sum_n \theta(1) [a_n^\dagger a_{n-1} (f_0 + f_1) + a_{n-1}^\dagger a_n (f_1 + f_0) - a_n^\dagger a_{n+1} (f_0 + f_{-1}) - \\ &\quad a_{n+1}^\dagger a_n (f_{-1} + f_0)] \end{aligned} \quad (2.35)$$

У  $k$ -репрезентацији

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H}_{nl} \rangle_0 &= \phi\omega/2 \sum_k \theta(1) a_k^\dagger a_k [e^{ik} (f_0 + f_1) + e^{-ik} (f_1 + f_0) - e^{-ik} (f_0 + f_{-1}) - (f_0 + f_{-1})] \\ &= \phi\omega/2 \sum_k \theta(1) a_k^\dagger a_k [e^{ik} (f_1 - f_{-1}) + e^{-ik} (f_1 - f_{-1})] \\ &= -\phi\omega\theta(1) \sum_k a_k^\dagger a_k \cos k (f_1 - f_{-1}) \end{aligned} \quad (2.36)$$

### 2.5.2 Једначине $f$ -коефицијената

Основни део Хамилтонијана је онда

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \sum_k \left[ \omega \left( \sum_m f_m^2 - 2gf_0 \right) \right] + \sum_k 2J_{eff} \cos ka_k^\dagger a_k - \phi\omega\theta(1) \sum_k a_k^\dagger a_k \cos k (f_1 - f_{-1}) \\ &= \sum_k \left[ \omega \left( \sum_m f_m^2 - 2gf_0 \right) + 2\theta(1) (J_0 - \phi\omega/2 (f_1 - f_{-1})) \cos k \right] a_k^\dagger a_k. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Обележимо  $(J_0 - \phi\omega/2 (f_1 - f_{-1})) \theta(1)$  са  $X$ . Богољубовљева граница је дата са



$$A_0^e = -\beta^{-1} \ln N + \omega \sum (f_m^2 - 2gf_0) - \beta^{-1} \ln \{I_0(-2\beta X)\}, \quad (2.38)$$

па су једначине  $f$ -коефицијената

$$f_m - g\delta_m - 1/\omega \frac{I_1(2\beta X)}{I_0(2\beta X)} [(2f_m - f_{m+1} - f_{m-1}) \coth(\beta\omega/2)X - \theta(1)\phi\omega(\delta_{m,1} - \delta_{m,-1})] = 0. \quad (2.39)$$

## 2.6 Покретљивост

Експериментално мерљива покретљивост носилаца наелектрисања може се добити из корелационе функције струја. Она је дата Kubo-овом [2] формулом

$$\mu_{\alpha,\beta} = \frac{1}{e_0 N_c 2k_b T} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle j_\alpha(t) j_\beta \rangle_H, \quad (2.40)$$

која описује линеарни одзив струје система на спољашње поље. Овде су,  $N_c$  број носилаца,  $k_B$  Boltzmann-ова константа и  $e_0$  је елементарно наелектрисање. Тензор покретљивости  $\mu_{\alpha\beta}$  је мерљив у *time-of-flight* експериментима или транзисторима са ефектом поља где се наелектрисање креће на макроскопској скали већој од средњег слободног пута што одговара опсегу примењивости Kubo-ове формуле.

Да бисмо израчунали једначину (2.41) морамо знати корелациону функцију у сваком тренутку  $t$ . Оператор струје изведен је из поларизационог оператора  $P = e_0 \sum_m R_m a_m^\dagger a_m$  где смо са  $R_m$  дефинисали вектор растојање међу чворовима решетке,

$$\mathbf{j} = \frac{d\mathbf{P}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{P}, H]. \quad (2.41)$$

Примењујући Merrifield-ову трансформацију добијамо

$$\langle j_\alpha(t) j_\beta(0) \rangle_H = \langle e^{iHt/\hbar} j_\alpha e^{-iHt/\hbar} j_\beta \rangle_H = \langle e^{i\tilde{H}t/\hbar} \tilde{j}_\alpha e^{-i\tilde{H}t/\hbar} \tilde{j}_\beta \rangle_{\tilde{H}}. \quad (2.42)$$

Сада нам остаје да изведемо израз за струју, а затим и покретљивост најпре за Holstein-ов Хамилтонијан, а потом и за Хамилтонијан са нелокалном електрон-фонон интеракцијом.

### 2.6.1 Струја и покретљивост за Holstein-ов Хамилтонијан

Сада можемо извести струју за Holstein-ов Хамилтонијан претходно поменути начин. Узмајући у обзир да радимо у 1D систему, имамо

$$\begin{aligned} j &= \frac{dP}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [P, H] \\ &= \frac{e_0}{i\hbar} \sum_{m,n} J_{nm} (R_n - R_m) a_n^\dagger a_m. \end{aligned} \quad (2.43)$$

што, када се примене трансформациони закони фермионских и бозонских оператора и апроксимација најближих суседа, даје

$$\tilde{j} = \frac{e_0}{i\hbar} \sum_n J_0 R (a_{n+1}^\dagger a_n \theta_{n+1}^\dagger \theta_n - a_{n-1}^\dagger a_n \theta_{n-1}^\dagger \theta_n). \quad (2.44)$$

Да би израчунали покретљивост потребна нам је временска еволуција струје

$$\tilde{j}(t) = e^{it\tilde{H}/\hbar} \tilde{j}(0) e^{-it\tilde{H}/\hbar}.$$

Након еволуције средња вредност је

$$\begin{aligned} \langle \tilde{j}(t) \tilde{j}(0) \rangle_{\tilde{H}} &= -\left(\frac{e_0}{\hbar}\right)^2 \cdot J_0^2 R^2 \left\langle \sum_{n,m} \left( a_{n+1}^\dagger(t) a_n(t) a_{m+1}^\dagger a_m \theta_{n+1}^\dagger(t) \theta(t) \theta_{m+1}^\dagger \theta_m \right. \right. \\ &\quad - a_{n+1}^\dagger(t) a_n(t) a_{m-1}^\dagger a_m \theta_{n+1}^\dagger(t) \theta(t) \theta_{m-1}^\dagger \theta_m \\ &\quad - a_{n-1}^\dagger(t) a_n(t) a_{m+1}^\dagger a_m \theta_{n-1}^\dagger(t) \theta(t) \theta_{m+1}^\dagger \theta_m \\ &\quad \left. \left. + a_{n-1}^\dagger(t) a_n(t) a_{m-1}^\dagger a_m \theta_{n-1}^\dagger(t) \theta(t) \theta_{m-1}^\dagger \theta_m \right) \right\rangle_{\tilde{H}}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Усредњавање се врши по  $\tilde{H}$ , међутим ми ћемо га апроксимирати основним делом Хамилтонијана, после чега је закон временске еволуције фермионских оператора је у  $k$ -репрезентацији

$$e^{it\tilde{H}/\hbar} a_k^\dagger e^{-it\tilde{H}/\hbar} = a_k^\dagger e^{(it/\hbar)\tilde{\varepsilon}(k)}. \quad (2.46)$$

За израчунавање средње вредности ћемо искористити формулу

$$\begin{aligned} \langle \theta_n^\dagger(t_1) \theta_m(t_1) \theta_{n'}^\dagger(t_2) \theta_{m'}(t_2) \rangle &= e^{-(n_0+1/2) \sum_j (f_{j-n} - f_{j-m})^2 + (f_{j-n'} - f_{j-m'})^2} \\ &\quad \times e^{-(f_{j-n} - f_{j-m})(f_{j-n'} - f_{j-m'}) [(n_0+1)e^{i\omega(t_2-t_1)} + n_0 e^{-i\omega(t_2-t_1)}]}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Пређимо на  $k$ -репрезентацију и посматрајмо само први члан

$$\sum_{k_1, k_2} \sum_{k_3, k_4} \sum_{n, m} \langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} a_{k_3}^\dagger a_{k_4} \rangle \langle \theta_{n+1}^\dagger(t) \theta_n(t) \theta_{m+1}^\dagger \theta_m \rangle e^{ik_1(n+1)} e^{-ik_2 n} e^{ik_3(m+1)} e^{-ik_4 m} e^{(it/\hbar)\tilde{\varepsilon}(k_1)} e^{-(it/\hbar)\tilde{\varepsilon}(k_2)}.$$

Применимо Wick-ову теорему на фермионски део

$$\langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} a_{k_3}^\dagger a_{k_4} \rangle = \delta_{k_1, k_2} \delta_{k_3, k_4} n_{k_1} n_{k_3} + \delta_{k_1, k_4} \delta_{k_3, k_2} n_{k_1} (1 - n_{k_2}) \quad (2.48)$$

где ћемо због малог броја честица занемарити чланове реда  $n^2$  те нам остаје

$$\delta_{k_1, k_4} \delta_{k_3, k_2} n_{k_1}.$$

Средња вредност  $\theta$ -оператора,  $\langle \theta_{n+1}^\dagger(t)\theta_n(t)\theta_{m+1}^\dagger\theta_m \rangle$  је

$$\langle \theta_{n+1}^\dagger(t)\theta_n(t)\theta_{m+1}^\dagger\theta_m \rangle = \theta^2(1)e^{-\sum_j(f_{j-n-1}-f_{j-n})(f_{j-m-1}-f_{j-m})[(n_0+1)e^{i\omega t}+n_0e^{-i\omega t}]}. \quad (2.49)$$

Коначно

$$\begin{aligned} \langle \tilde{j}(t)\tilde{j}(0) \rangle_{\tilde{H}_0} &= -\left(\frac{e_0}{\hbar}\right)^2/N^2 \cdot J_0^2 R^2 \theta^2(1) \sum_{k_1, k_2} \sum_{n, m} F(t) e^{(it/\hbar)(\tilde{\varepsilon}(k_1) - \tilde{\varepsilon}(k_2))} n_{k_1} \\ &\times \left( e^{-\sum_j(f_{j-n-1}-f_{j-n})(f_{j-m-1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m+1)} e^{-ik_2(n-m-1)} \right. \\ &- e^{-\sum_j(f_{j-n-1}-f_{j-n})(f_{j-m+1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m+1)} e^{-ik_2(n-m+1)} \\ &- e^{-\sum_j(f_{j-n+1}-f_{j-n})(f_{j-m+1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m-1)} e^{-ik_2(n-m-1)} \\ &\left. + e^{-\sum_j(f_{j-n+1}-f_{j-n})(f_{j-m+1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m-1)} e^{-ik_2(n-m+1)} \right). \end{aligned} \quad (2.50)$$

За Holstein-ов Хамилтонијан  $\mu$  је дата са

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{1}{e_0 N 2k_b T} \left(\frac{e_0}{\hbar}\right)^2/N^2 \cdot J_0^2 R^2 \theta^2(1) \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{k_1, k_2} \sum_{n, m} F(t) e^{(it/\hbar)(\tilde{\varepsilon}(k_1) - \tilde{\varepsilon}(k_2))} n_{k_1} \\ &\times \left( e^{-\sum_j(f_{j-n-1}-f_{j-n})(f_{j-m-1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m+1)} e^{-ik_2(n-m-1)} \right. \\ &- e^{-\sum_j(f_{j-n-1}-f_{j-n})(f_{j-m+1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m+1)} e^{-ik_2(n-m+1)} \\ &- e^{-\sum_j(f_{j-n+1}-f_{j-n})(f_{j-m+1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m-1)} e^{-ik_2(n-m-1)} \\ &\left. + e^{-\sum_j(f_{j-n+1}-f_{j-n})(f_{j-m+1}-f_{j-m})} e^{ik_1(n-m-1)} e^{-ik_2(n-m+1)} \right) \end{aligned} \quad (2.51)$$

где је

$$F(t) = e^{[(n_0+1)e^{i\omega t}+n_0e^{-i\omega t}]}$$

## 2.6.2 Струја и покретљивост за нелокалну електрон-фонон интеракцију

Поступак, аналоган претходно приложеном, можемо применити и на Хамилтонијан који укључије нелокалну електрон-фонон интеракцију. Користећи добијени резултат за  $[\mathbf{P}, H]f$  и рачунајући

$$[\mathbf{P}, H_{nl}]$$

добијамо, разматрајући најпре први члан

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{P}, H_{nl}] &= \frac{\phi\omega e_0}{2i\hbar} \left[ \sum_{n, m} R_m a_m^\dagger a_m, a_n^\dagger a_{n-1} \right] (b_n^\dagger + b_n) \\ &= \frac{\phi\omega e_0}{2i\hbar} \sum_{n, m} R_m (a_m^\dagger a_m a_n^\dagger a_{n-1} - a_n^\dagger a_{n-1} a_m^\dagger a_m) (b_n^\dagger + b_n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\phi\omega e_0}{2i\hbar} \sum_n (R_n - R_{n-1}) a_n^\dagger a_{n-1} (b_n^\dagger + b_n) \\
&\text{што је када се саберу сви чланови} \\
&= \frac{\phi\omega e_0}{2i\hbar} (R_{n,n-1} a_n^\dagger a_{n-1} + R_{n-1,n} a_{n-1}^\dagger a_n \\
&\quad - R_{n,n+1} a_n^\dagger a_{n+1} - R_{n+1,n} a_{n+1}^\dagger a_n) (b_n^\dagger + b_n)
\end{aligned} \tag{2.52}$$

из чега следи да је струја дата са

$$j = \frac{e_0}{i\hbar} \left( \sum_{nm} R_{nm} J_{nm} a_n^\dagger a_m + \frac{\phi\omega}{2} \sum_n (R_{n,n-1} a_n^\dagger a_{n-1} + R_{n-1,n} a_{n-1}^\dagger a_n - R_{n,n+1} a_n^\dagger a_{n+1} - R_{n+1,n} a_{n+1}^\dagger a_n) (b_n^\dagger + b_n) \right). \tag{2.53}$$

Ако сада применимо Merrifield-ову трансформацију добијамо

$$\begin{aligned}
j &= \frac{e_0}{i\hbar} \left( \sum_{nm} R_{nm} J_{nm} a_n^\dagger a_m \theta_n^\dagger \theta_m + \frac{\phi\omega}{2} \sum_n (R_{n,n-1} a_n^\dagger a_{n-1} \theta_n^\dagger \theta_{n-1} + R_{n-1,n} a_{n-1}^\dagger a_n \theta_{n-1}^\dagger \theta_n \right. \\
&\quad \left. - R_{n,n+1} a_n^\dagger a_{n+1} \theta_n^\dagger \theta_{n+1} - R_{n+1,n} a_{n+1}^\dagger a_n \theta_{n+1}^\dagger \theta_n) (b_n^\dagger + b_n - 2 \sum_m f_{n-m} a_m^\dagger a_m) \right).
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Након примене, већ поменутих, апроксимације најближих суседа и апроксимације малог броја честица,

$$\begin{aligned}
j &= \frac{e_0}{i\hbar} R \left( \sum_n J_0 (a_{n+1}^\dagger a_n \theta_{n+1}^\dagger \theta_n + a_n^\dagger a_{n+1} \theta_n^\dagger \theta_{n+1}) + \frac{\phi\omega}{2} \sum_n (a_n^\dagger a_{n-1} \theta_n^\dagger \theta_{n-1} + a_{n-1}^\dagger a_n \theta_{n-1}^\dagger \theta_n \right. \\
&\quad \left. - a_n^\dagger a_{n+1} \theta_n^\dagger \theta_{n+1} - a_{n+1}^\dagger a_n \theta_{n+1}^\dagger \theta_n) (b_n^\dagger + b_n) + \phi\omega \sum_n (f_1 a_n^\dagger a_{n-1} \theta_n^\dagger \theta_{n-1} + f_0 a_{n-1}^\dagger a_n \theta_{n-1}^\dagger \theta_n \right. \\
&\quad \left. - f_{-1} a_n^\dagger a_{n+1} \theta_n^\dagger \theta_{n+1} - f_0 a_{n+1}^\dagger a_n \theta_{n+1}^\dagger \theta_n) \right).
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Приметимо да се при рачунању корелационе функције

$$\langle \tilde{j}(t) \tilde{j}(0) \rangle_{\hbar_0}$$

мора вршити усредњавање оператора облика

$$\theta_n(t_1) \theta_m(t_1) \theta_{n'}(t_2) \theta_{m'}(t_2) (b_n^\dagger + b_n)$$

и

$$\theta_n(t_1) \theta_m(t_1) \theta_{n'}(t_2) \theta_{m'}(t_2) (b_{n'}^\dagger + b_{n'})$$

што је аналитички врло сложен задатак, те неће бити тема овог рада.

### 3 Нумерички резултати

Нумерички део прорачуна урађен је у програмском језику Fortran. Сада ћемо приказати решења једначина до којих смо дошли, графике који из њих следе и продискутовати о физичком смислу резултата.

#### 3.1 $f$ -коэффициенти за Holstein-ов Хамилтонијан

Систем једначина који смо добили минимизацијом Богољубовљевог ограничења Holstein-овог Хамилтонијана

$$f_m - g\delta_m + \frac{J_{eff}}{\omega} \times \frac{I_1(2\beta J_{eff})}{I_0(2\beta J_{eff})} \times (2f_m - f_{m+1} - f_{m-1}) \coth(\beta\omega/2) = 0,$$

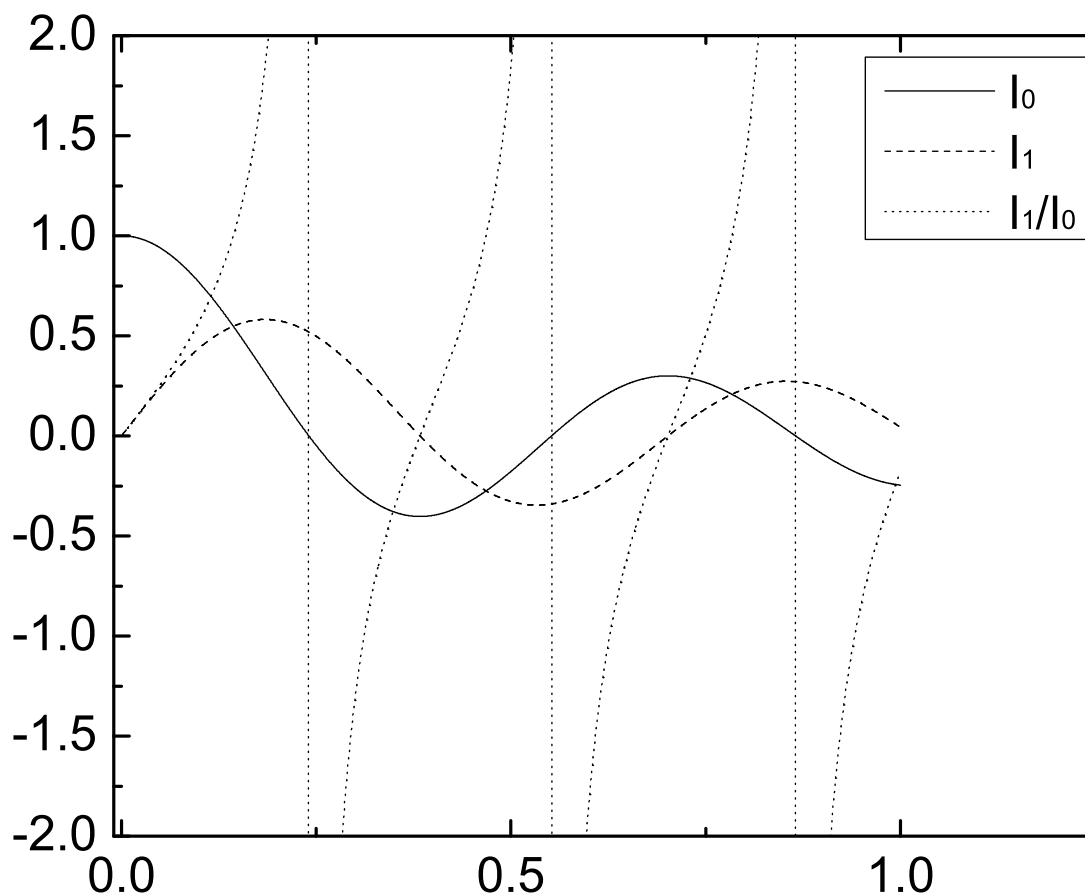
не може се решити аналитички. Важно је истаћи да може постојати више решења, те се сет оптималних  $f$ -коэффициената добија након рачунања Богољубовљеве границе и узимања њене минималне вредности. Оно што се на први поглед примећује је, да је ово систем нелинеарних једначина те је наша првобитна замисао била да га запишемо на следећи начин

$$f(m) = h(f_{-m} \dots f_m) \tag{3.56}$$

и решимо итеративно, али тај покушај није уродио плодом, јер је давао резултате сам за случај јаког  $g$ , тј за јако мали опсег нама интересантних вредности. Следећа идеја била је да ово представимо као систем линеарних једначина, који би решавали итеративно, тако што би коэффициенти зависили од предходног сета вредности  $f$ -коэффициената. Матрица коэффициената је тридијагонална и може се записати на следећи начин

$$A = \begin{bmatrix} 1 + 2h & -h & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -h & 1 + 2h & -h & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -h & 1 + 2h & -h & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & h & 1 + 2h & -h \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & h & 1 + 2h \end{bmatrix}$$

Испоставило се, да ни на овај начин ситуација није постала повољнија, па се прионуло на анализу самих једначина. Главни разлог не конвергирања решења је сингуларно понашање количника Beseel-ових функција које је графички приказано на слици 3:



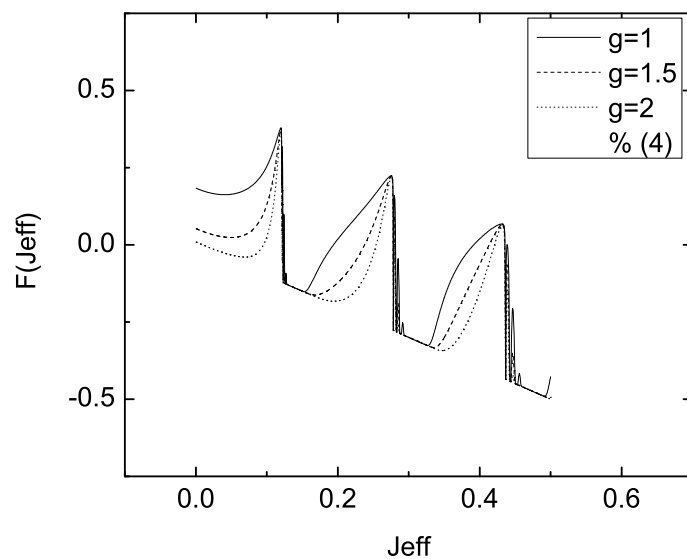
Слика 3: Приказан је однос Bessel-ове функција прве врсте.

Даље смо, у решавању проблема, наставили у следећем правцу: Када фиксирамо  $J_{eff}$  решавамо систем линеарних једначина, тј добијамо да  $f = f(J_{eff})$  што када се врати у израз за  $J_{eff}$  постаје нелинеарна једначина облика

$$F(J_{eff}) = 0 \quad (3.57)$$

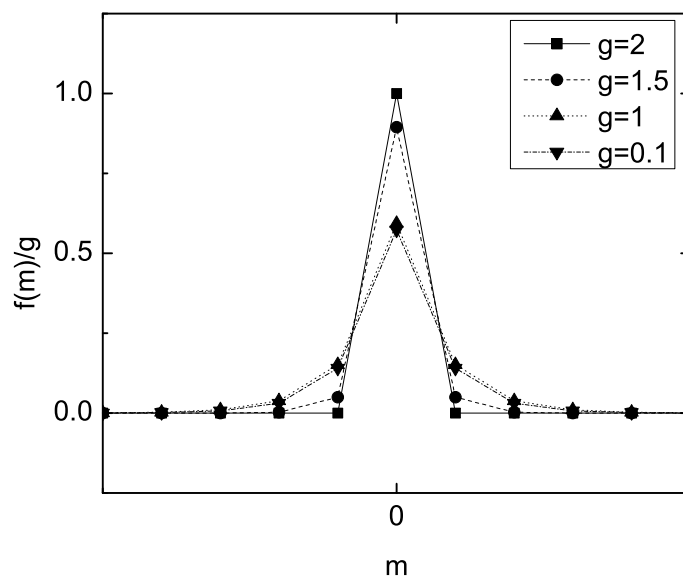
$$J_{eff} = J_0\theta(1)$$

$F(J_{eff}) = 0$  чије решење стављамо у систем линеарних једначина и добијамо жељене коефицијенте. Постоји више решења, па се оно право добија рачунањем Богољубовљеве границе и узимањем сета за који Богољубовљева граница има минимум. На слици 4 је дат график нелинеарне функције  $F(J_{eff})$  на коме се врло лако примећује допринос сингуларних делова количника функција.



Слика 4: Функције су дате за различите вредности константе везе  $g$

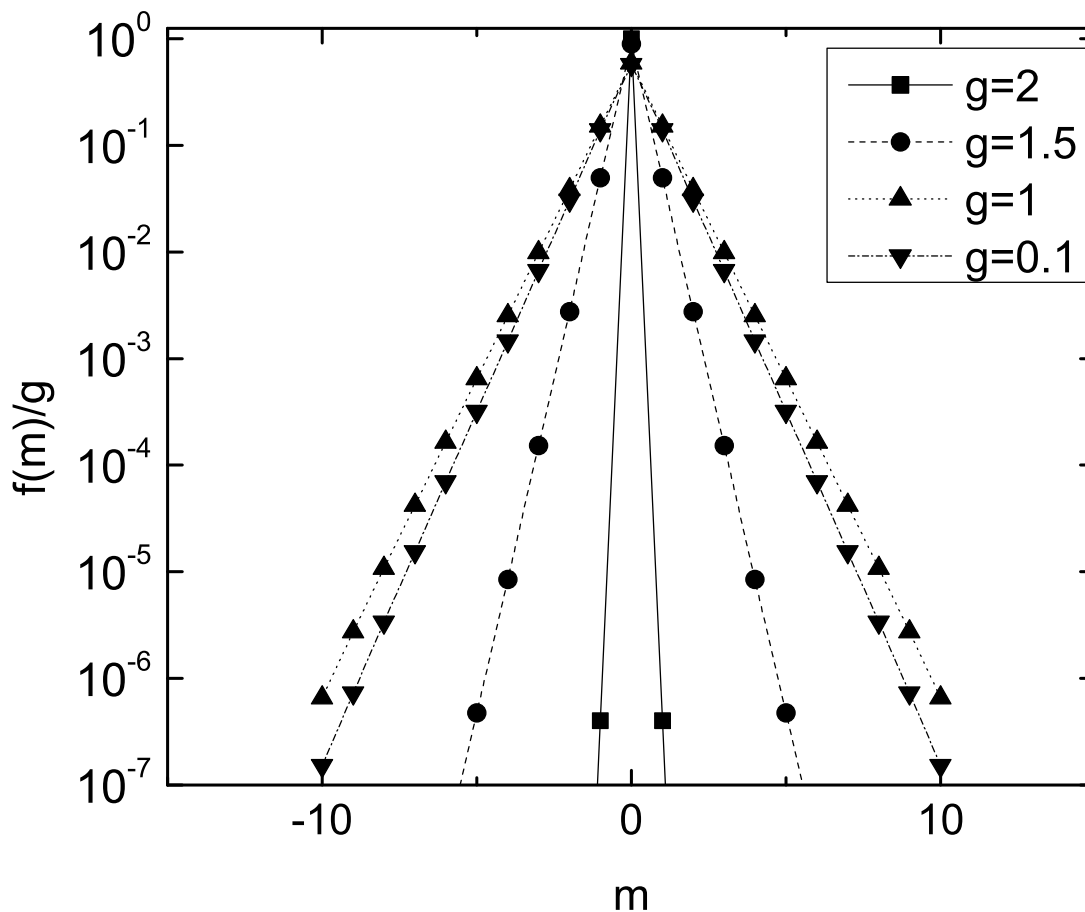
Показало се да овај метод ради у жељеном опсегу параметара те су вредности  $f$ -кофицијената дате на слици 5



Слика 5:  $f$ -кофицијенти за различите вредности константе везе  $g$ .  $\beta\omega = 10$ ,  $J_0 = 1/2$

Са слике 5 се јасно види како локализација електрона зависи од константе везе, што нам даје увид у такозвани self-trapping прелаз, тј прелаз са малог на велико поларонско стање при смањењу константе интеракције.

Ако ову зависност прикажемо на логаритамској скали



Слика 6:  $f$  коефицијенти на логаритамској скали.  $\beta\omega = 10, J_0 = 1/2$ .

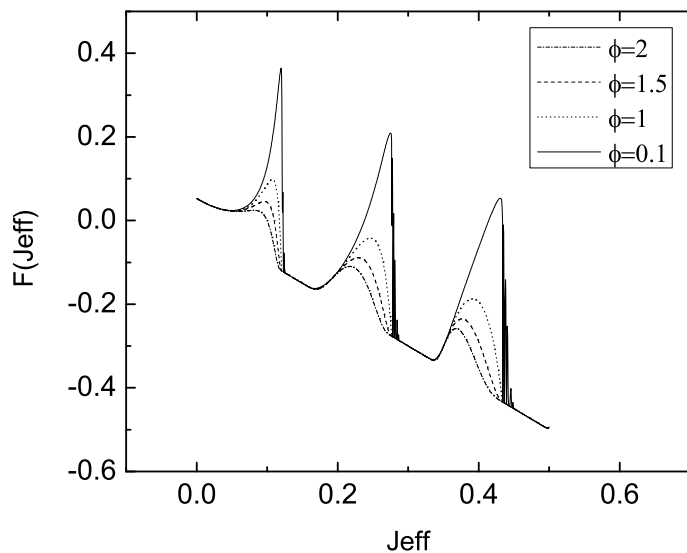
видимо како  $f$ -кефицијенти зависе од растојања.

### 3.2 $f$ -коефицијенти за нелокалну електрон-фонон интеракцију

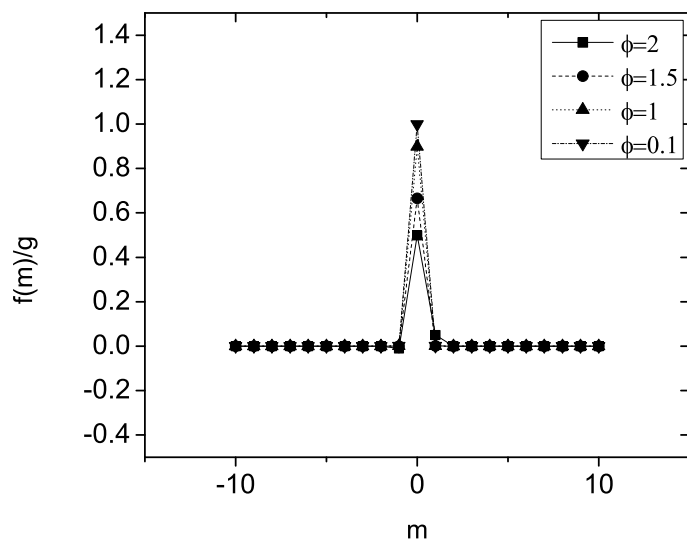
Почени претходним искуством, систем једначина за нелокалну електрон-фонон интеракцију, иако сложенији, решавамо аналогно. Оно што ћемо приказати је надовезивање на рад где је обрађен Хамилтонијан и чије смо резултате поновили у предходном делу. Посматраћемо



односе константи локалне и нелокалне интеракције, где нам константа локалне интеракције узима вредности  $g = 2$  и  $g = 1.5$ . Наведимо прво слике нелинеарних функција

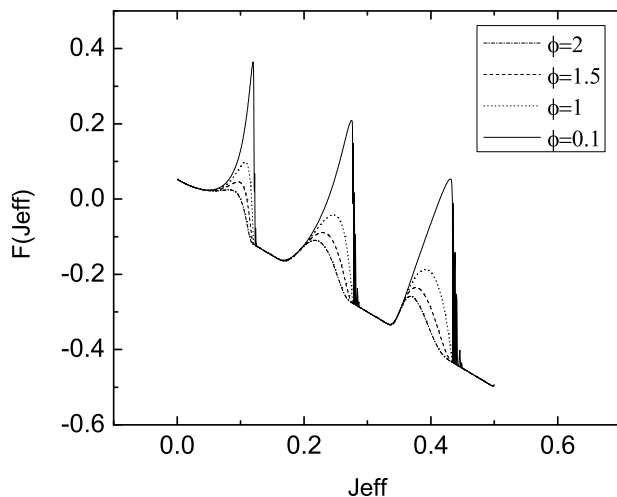


Слика 7: Нелинеарне функције  $F(J_{eff})$  за  $g = 2$  и различите вредности  $\phi$ .  $\beta\omega = 10$ .



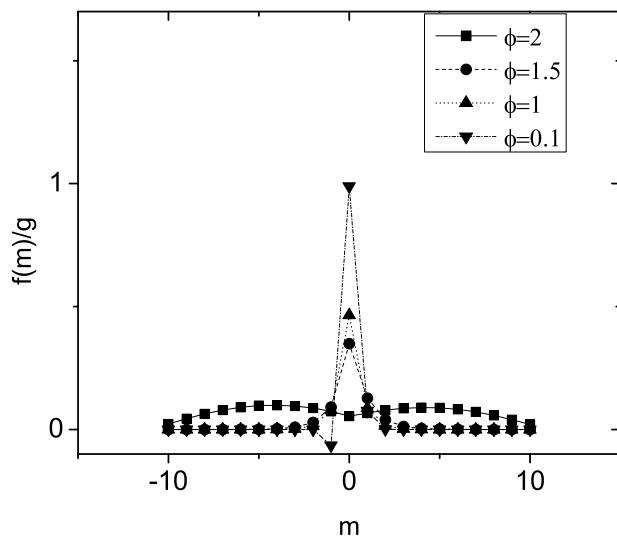
Слика 8: Нелинеарне функције  $F(J_{eff})$  за  $g = 1.5$  и различите вредности  $\phi$ .  $\beta\omega = 10$ .

Примећујемо на слици 7, да за  $g = 2$  функције за све вредности  $\phi$  имају решење (минимум енергије) на истом месту, што нас наводи на закључак да у случају јаке локалне спреге нелокална електрон фонон интеракција слабо утиче на локализацију. На слици 9 читавамо да се при смањивању вредности  $\phi$  враћамо на случај Holstein-овог Хамилтонијана.



Слика 9:  $f$ -коэффициенти за  $g = 2$  и различите вредности  $\phi \cdot \beta \omega = 10$ .

Аналогну ситуацију имамо и за случај  $g = 1.5$  што видимо на слици 10

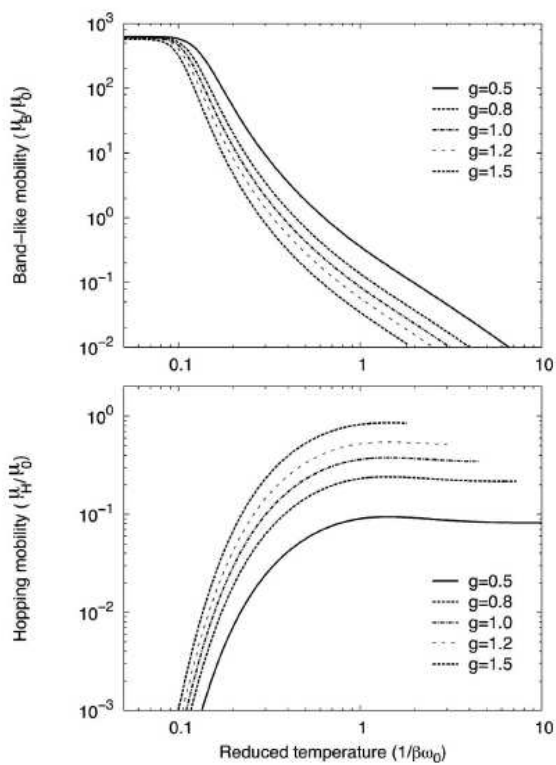


Слика 10:  $f$  коэффициенти за  $g = 1.5$  и различите вредности  $\phi \cdot \beta \omega = 10$ .

При додавању нелокалне електрон-фонон интеракције симетричан облик решења се губи због антисиметричности нелокалног члана након извршене унитарне трансформације као што видимо на слици 10. Куриозитета ради, на слици 10 дат је нефизички случај када је константа нелокалне интеракције већа од константе локалне интеракције, по коме видимо да долази до делокализације у складу са интуитивним очекивањима.

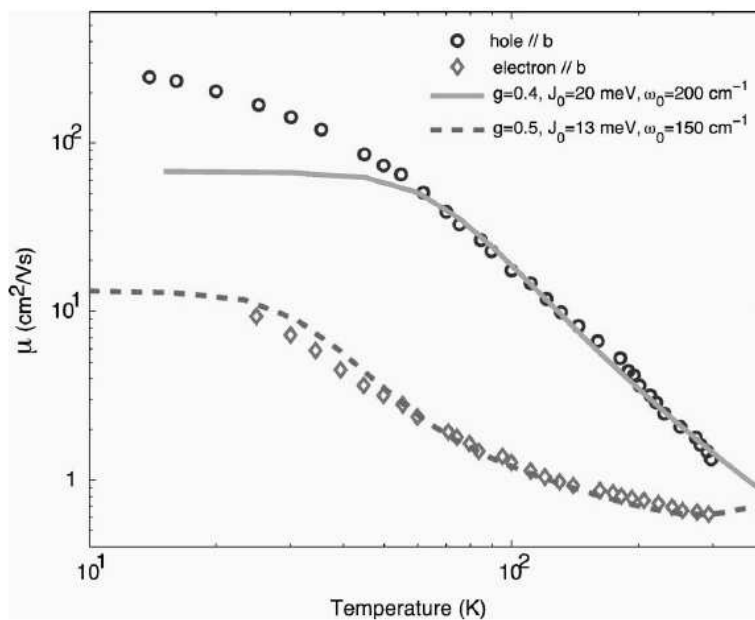
### 3.3 Покретљивост носилаца

Да би сада проучили како константа везе утиче на покретљивост наводимо резултате рада[1] из којих видимо да у вариационом приступу прелаз на мали поларон није директно повезан са прелазом са hopping-режима на зонски режим. Гладак прелаз који се добија међу механизмима транспорта не одговара прелазу у поларонској структури, тачније дешава се на нижој температури. Сада ћемо дати на сликама 11 и 12 покретљивости за различите механизме транспорта



Слика 11: 1D Band-покретљивост и Hopping-покретљивост за различите константе спреге.  $J_0/\omega_0 = 1/2$

На крају наводимо резултате рада добијене за покретљивост упоређене са експерименталним резултатима



Слика 12: Поређење теоријских резултата са експерименталним мерењима на ултрачистом нафталенском кристалу.

## 4 Закључак

У овом раду смо анализирали једнодимензионе моделе органских кристала, као и њихове последице на транспортне особине система. Дакле, користили смо коначно температурни формализам базиран на Meriffield-овој трансформацији и Богољубовљевој теореме да би добили оптимални базис интерагујућег електрон-фонон система у који смо урачанао и нелокалну електрон-фонон интеракцију. Најважнији резултат је квантитативни опис прелаза са малог на велико поларонско стање у зависности од константи интеракције, који смо добили нумеричким решавањем једначина dressing-коэффициената. Аналитички смо извели струје за локалну и као побољшање за нелокалну електрон-фонон интеракцију. Аналитички смо извели израз за покретљивост Holstein-овог Хамилтонијана користећи Кубоову формулу док су аналитички резултати покретљивости за Хамилтонијан са нелокалном електрон фонон интеракцијом изостали и свакако су циљ у скоријој будућности, као и нумерички резултати за покретљивост у систему са нелокалном електрон-фонон интеракцијом. На крају смо дали преглед неких од постојећих резултата у оквиру наелтрисања којом се квантитативно може описати транспорт наелектрисања у ОМК. Кључно побољшање је да све температурно зависне теоретске криве предвиђају гладак прелаз са hopping-режима на зонски режим изузев када је у питању мали поларон, што нас охрабрује да је избор унитарне трансформације био адекватан.

## Литература

- [1] Y.C Cheng and R.J Silbey, JCP **128**, 114713 (2008).
- [2] F. Ortmann, F. Bechstedt and K Hannevald, Phys. Rev. B **79**, 235206(2009).
- [3] A. Troisi and G. Orlandi, Phys. Rev. Lett. **96**, 086601 (2006).
- [4] M. Hultell and S. Stafstrom, Chem. Phys. Lett. **428**, 446 (2006).
- [5] B. Jackson and R. J. Silbey, J. Chem. Phys. **75**, 3293 (1981).
- [6] T. Holstein, Ann. Phys. (N.Y). 8, 325 (1959).
- [7] D. R. Yarkony and R. J. Silbey, J. Chem. Phys. **67**, 5818 (1977).
- [8] R. J. Silbey and R. W. Munn, J. Chem. Phys. **72**, 2763 (1980).
- [9] R. E. Merrifield, J. Chem. Phys. **40**, 445 (1964).