



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI
FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



DUALNI PRISTUPI U TEORIJSKOJ FIZICI KONDENZOVANOG STANJA

-DOKTORSKA DISERTACIJA-

Mentor:
dr Petar Mali

Kandidat:
Sonja Gombar

Novi Sad, 2021.

Predgovor

Još jedno raskršće nazire se na Luninom nepreglednom putu. Jedno poglavlje njenog života završeno je, ali čitav svet otvara se pred njom jer put nikada ne prestaje. Nastavlja se i širi svoje razgranate staze, pozivajući željna srca da njime hode uprkos umornim tabanima. A Lunina duša oduvek je čeznula za novim prostorima. Uske utabane staze vodile su je do nekih novih neistraženih puteva. A šta je čeka iza ćoška? Koju stazu će sada odabrati? Teški izbori nalaze se pred njom. Da li će to biti već poznati puteljak, koji će je podsetiti na dom i naterati je da se oseti sigurnom na svetu, ili pak neka nova prečica do glavnog puta, koja je mami poput pozivnice za avanturu, još uvek nije sigurna. Stoga hrabro hodi već poznatim putem, radujući se svakoj novoj pustolovini i spoznaji.

Baš kao i u Luninom životu, i moj život je došao do završetka jednog poglavlja. Bio je to dug put, pri čemu se svaka sledeća stepenica postojano nadovezivala na prethodnu. Naravno, samo putovanje ne bi bilo potpuno, niti dovelo do ovakvog završetka, da nije bilo ispunjeno ljudima kojima ovom prilikom želim da se zahvalim. Tu je svakako porodica, koja je bila deo moje svakodnevice i sa mnom prolazila kroz lepe, ali i brojne tužne momente u životu, koji su nas izgradili u osobe kakve smo danas i učinili nerazdvojnog celinom. Zatim se tu nalaze svi prosvetni radnici koji su tokom mog osnovnog obrazovanja našli način da ohrabre radoznalost i motivišu me da se upustim u naučne vode, ali i pobude moju ljubav prema književnosti i jezicima. Cela priča ne bi bila kompletna bez tri gracije, koje su često ukazivale na moje kvalitete, čak i kad ih sama nisam primećivala.

Zahvalnost dugujem i ljudima koji su mi tokom čitavog toka studiranja pružali podršku prilikom borbe sa raznim zadacima, teorijama i laboratorijskim vežbama, pošto su i sami razumeli celokupan proces razvojnog puta jednog mladog naučnika. Osim toga, zahvalila bih se i profesorima Katedre za teorijsku fiziku koji su pregledali razne radove u čijem sam pisanju učestvovala, stalno nalazeći načina za njihovo unapređivanje. Na samom kraju, najveću zahvalnost za preneto znanje i nesebično zalaganje dugujem mentoru, koji me je uveo u problematiku doktorske teze. Njegove korisne sugestije znatno su uticale na poboljšanje doktorske teze kako u pogledu njenog sadržaja tako i u kontekstu naučnog jezika. Ne treba zaboraviti ovde spomenuti i da je prilikom gotovo čitavog toka mog studiranja predstavljao svesrdnu pomoć, a povremeno i svojevrsnog psihoterapeuta, te je time omogućio da ne budem prva osoba koja strada u okrutnim Igrama gladi.

Sadržaj

Uvod	1
1 Eksitonska disperzija aromatičnih ugljovodonika	3
1.1 Veza između teorijskog modela Frenkelovih eksitona i Hajzenbergovog modela	5
1.2 Disperzija neinteragujućih eksitona	7
1.2.1 Disperzija neinteragujućih eksitona u pentacenu	10
1.2.2 Davidovljevo cepanje u organskim molekulskim strukturama	14
1.2.3 Disperzija neinteragujućih eksitona u pentacenu i tetracenu u skladu sa uočenim Davidovljevim cepanjem	16
1.2.4 Disperzija neinteragujućih eksitona u picenu i hrizenu	18
1.3 Uticaj eksiton-eksiton interakcija na disperzioni zakon	21
1.3.1 Simetrija Hajzenbergovog feromagnetnog hamiltonijana	22
1.3.2 Efektivni lagranžijan i hamiltonijan feromagneta u spoljašnjem magnetnom polju	23
1.3.3 Poređenje disperzije neinteragujućih eksitona i disperzije slobodnog hamiltonijana magnonskih polja	25
1.3.4 Uticaj eksiton-eksiton interakcija na disperziju pentacena	27
2 Kvantna zamršenost i kvantna koherentnost u modelima spinskih lanaca	32
2.1 Kvantna zamršenost	34
2.1.1 Osobine dobre mere kvantne zamršenosti. Konkurentnost	36
2.2 Kvantna koherentnost	38
2.2.1 Osobine dobre mere kvantne koherentnosti. Relativna entropija koherentnosti	39
2.3 Ideja o povezanosti kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti	40
2.4 Model XY spinskih lanaca sa dva oblika anizotropije	41
2.5 Poređenje konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti u sistemima sa bazom od tri spina	46
2.5.1 XY model sa DM interakcijom i simetričnom anizotropijom	46
2.5.2 XY model sa DM interakcijom i asimetričnom anizotropijom	48
2.6 Uopštenje ustanovljene veze na veće sisteme	49
2.6.1 XY model sa DM interakcijom i simetričnom anizotropijom	50
2.6.2 XY model sa DM interakcijom i asimetričnom anizotropijom	53
3 Mogućnosti primene generalizovanog Frenkel-Kontorova modela u realnim fizičkim problemima	58
3.1 Svojstva Frenkel-Kontorova modela	59
3.2 Dinamika Frenkel-Kontorova modela podvrgnutog uticaju ac i dc sila	61
3.2.1 Jednačine kretanja Frenkel-Kontorova modela sa neharmonijskom međučestičnom interakcijom	65
3.2.2 Odzivne funkcije generalizovanog Frenkel-Kontorova modela sa neharmonijskom međučestičnom interakcijom	66
3.3 Najveći Ljapunovljev eksponent kao sredstvo za detekciju Šapirovih stepenika	68
3.3.1 Odsustvo haosa u sistemu sa neharmonijskom međučestičnom interakcijom	70

3.4	Amplitudne zavisnosti kritične sile, širine prvog harmonijskog stepenika i maksimalnog Ljapunovljevog eksponenta	72
3.4.1	Uticaj neharmonijske međučestične interakcije na amplitudne zavisnosti . . .	73
3.5	Dinamičko zaključavanje u oba smera kretanja čestica	75
3.6	Realni sistemi na koje je moguće primeniti generalizovani Frenkel-Kontorova model sa neharmonijskim međučestičnim potencijalima	77
3.6.1	Talasi gustine naboja	77
3.6.2	Sistemi Džozefsonovih spojeva	79
3.6.3	Koloidni sistemi	80
Zaključak	82
Prilozi	84
Prilog A	84
A.1	Razdvajanje slobodnog i interakcionog dela efektivnog lagranžijana	84
A.2	Dijagrami sa jednom petljom	86
Prilog B	87
B.1	Redukovana matrica gustine. Parcijalni trag	87
Prilog C	89
C.1	Runge-Kuta metod četvrtog reda	89
Literatura	92
Kratka biografija	107
Ključna dokumentacijska informacija	108

Uvod

U srži rešavanja realnih fizičkih problema nalaze se brojne aproksimacije i modeli. Određene situacije, u cilju lakšeg rešavanja datog problema, a ponekad i kao nužno sredstvo da bi se oni uopšte rasvetlili, zahtevaju upotrebu pojedinih metoda i modela razvijenih za neke druge oblasti teorijske fizike kondenzovanog stanja. Ovakvo rezonovanje poznato je i kao dualni pristup. Fokus doktorata biće na upotrebi dualizma kao sredstva za istraživanje tri realna fizička sistema sa mogućnošću praktične primene kako u naučnom tako i u tehnološkom smislu.

Prvi segment doktorata posvećen je analizi eksitonske disperzije četiri aromatična ugljovodonika - pentacena, tetracena, picena i hrizena. Iako je ranija literatura isticala Frenkelove eksitone kao najznačajniji tip eksitona (vezanih parova elektrona i šupljina) u organskim molekulima, pojedina istraživanja sprovedena u protekle dve decenije sugerisala su da je uloga ovih struktura manja od pretpostavljene i da je za potrebe postizanja korektnog slaganja teorijskih i eksperimentalnih rezultata suštinski neophodno uključiti i *charge-transfer* eksitone u razmatranje. Oprečnost stavova inspirisala je upotrebu eksitonskog hamiltonijana baziranog striktno na Frenkelovim eksitonima radi provere da li se ovako formirana slika može zadovoljavajuće uklopiti sa eksperimentalno dostupnim podacima. S obzirom na postojanje jednoznačne korespodencije između Paulijevih operatora, koji figurišu u ovim hamiltonijanima, i spinskih operatora, celom problemu pristupa se dualnim putem. Drugim rečima, sa eksitonskog hamiltonijana može se preći na anizotropni Hajzenbergov hamiltonijan u prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja i iskoristiti čitav spektar alata koji spinski hamiltonijani sa sobom povlače. Tu će svakako od interesa biti bozonizacija spinskih hamiltonijana, diskretna Furijeova transformacija, ali i perturbativni pristup razvijen specijalno za Hajzenbergove hamiltonijane.

Drugo poglavlje doktorata bavi se ispitivanjem korespodencije između dva entiteta kvantne informatike - kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti, kao i njihove povezanosti sa identifikacijom kvantnih faznih prelaza modela. Naime, kvantna informatika jedna je od mlađih izdanaka kvantne fizike i njen razvoj mogao bi dovesti do znatnog unapređenja i ubrzanja brojnih aspekata ljudskog bitisanja. Jedna od vodećih tehnologija za implementaciju kvantnih računara bazirana je na kvantnim tačkama okupiranim elektronima koji međusobno interaguju. Interesantno je da se ovakvi sistemi mogu uspešno opisati posredstvom Hajzenbergovih hamiltonijana, koji se najčešće koriste za ispitivanje svojstava magnetnih jedinjenja. Ovom prilikom parametri modela ne predstavljaju konstante, već se mogu podešavati kako eksperimentalno tako i u teorijskim razmatranjima. Ovakav dualan pristup omogućava nalaženje optimalnog skupa vrednosti parametara modela pri kojima su kvantne osobine sistema maksimalno iskorišćene, ali i uočavanje kvantnih faznih prelaza. U nastavku doktorata je potencijalna veza između kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti ispitana na primeru XY modela sa Đalošinski-Morija interakcijom i dva tipa anizotropije. Tom prilikom je pristup zasnovan na elementima tenzorske algebre, dok je kvantna renormalizaciona grupa korišćena ne samo za uočavanje kvantnog faznog prelaza u sistemu nego i za utvrđivanje veze između dve kvantno-informatičke veličine u sistemima sa različitim brojem spinskih kubita.

Poslednji segment doktorata posvećen je ispitivanju realnih fizičkih sistema, poput talasa gustine naboja, sistema Džozefsonovih spojeva i koloidnih sistema, posredstvom generalizovanog Frenkel-Kontorova modela podvrgnutog dejstvu spoljašnjih periodičnih sila. Naime, standardni Frenkel-Kontorova model i Frenkel-Kontorova model sa harmonijskom međučestičnom interakcijom i različitim oblicima deformacionog supstratnog potencijala već su se pokazali

podesnim sredstvima za opis spomenutih problema, te je u ovom doktoratu fokus na modelu sa sinusoidalnim supstratnim potencijalom i dva neharmonijska konveksna oblika međučestičnog potencijala. Naravno, kako je harmoničnost prilično retka pojava u prirodi, smisleno je proveriti na koji način će uplitanje neharmonijske interakcije uticati na potencijalni dualizam sa realnim fizičkim problemima i modelima pomoću kojih se oni obično opisuju. U doktoratu je izvršeno poređenje sa dostupnim eksperimentalnim podacima, ali i sa standardnim modelom kako bi se utvrdilo koje novitete neharmonijski izbor interakcije sa sobom donosi. Ispitani su odzivna funkcija, ponašanje maksimalnog Ljapunovljevog eksponenta, Poankareovi preseki i amplitudne zavisnosti kritične sile, širine prvog harmonijskog stepenika i maksimalnog Ljapunovljevog eksponenta. Kao osnovni alat korišćeni su Runge-Kuta metod četvrtog reda i Sprotov algoritam za numeričko računanje maksimalnog Ljapunovljevog eksponenta.

Osnovni cilj sva tri poglavlja doktorata jeste koncizno predstavljanje blagodeti dualnosti u teorijskim proračunima u konkretnim primerima kroz brojne rezultate koje ovaj pristup čini mogućim. Svaka od tri celine sadrži kratak uvod u problematiku, a potom su predstavljeni rezultati istraživanja, koji se u originalnoj formi mogu naći u četiri objavljena rada:

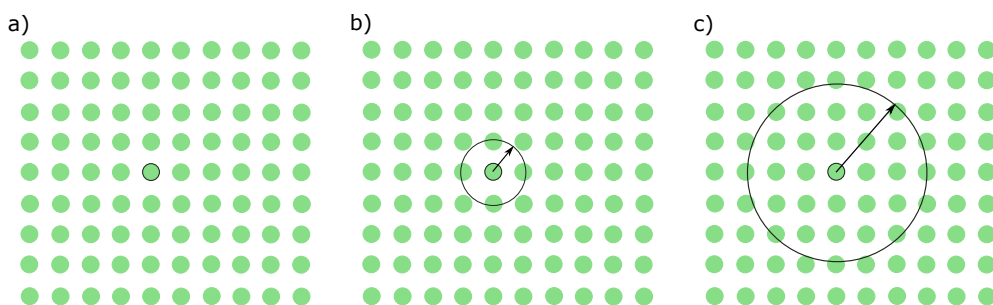
1. S. Gombar, P. Mali, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, S. Radošević, *Dynamics of Frenkel Excitons in Pentacene*, *Materials* **11**, 2219 (2018).
2. M. Rutonjski, P. Mali, S. Radošević, S. Gombar, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, *Exciton dynamics in different aromatic hydrocarbon systems*, *Chinese Physics B* **29**, 107103 (2020).
3. S. Gombar, P. Mali, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, S. Radošević, *Correlation between Quantum Entanglement and Quantum Coherence in the Case of XY Spin Chains with the Dzyaloshinskii–Moriya Interaction*, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **131**, 209 (2020).
4. S. Gombar, P. Mali, S. Radošević, J. Tekić, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, *Influence of anharmonic convex interparticle potential and Shapiro steps in the opposite direction of driving force*, *Physica Scripta* **96**, 035211 (2021).

Glava 1

Eksitonska disperzija aromatičnih ugljovodonika

Već nekoliko decenija posebna pažnja posvećena je istraživanju organskih kristala usled širokog spektra njihovih potencijalnih primena. S obzirom na standardnu upotrebu u proizvodnji poluprovodnika [1–5], ovi materijali uzimaju učešće u brojnim inovativnim optoelektronskim uređajima današnjice, poput fleksibilnih elektronskih komponenti [6], tranzistora [7], fotonaponskih ćelija [8,9], elektroluminiscentnih uređaja [10] i drugih [11,12]. Organske molekulske strukture se danas uz veoma malo napora proizvode različitim metodama depozicije, od kojih se izdvaja posebno zastupljena epitaksija molekularnim snopom, pogodna za formiranje veoma kvalitetnih i precizno definisanih monokristalnih filmova u visokom vakuumu [13]. Otuda se ovi materijali mogu naći u raznim formama, polazeći od tankih filmova pa sve do struktura od više slojeva i heterostruktura¹, ali je moguće i kombinovanje organskih i neorganskih poluprovodnih materijala [14]. Stoga je razumljivo zašto je nužno da se pronikne u samu srž mikroskopske prirode ovih materijala, a time i proučavanje najnižih pobuđenih stanja i ekscitacija odgovornih za širok raspon njihovih implementacija postaje bazični predmet brojnih studija.

Naime, elektronske ekscitacije bitne za objašnjenje različitih optičkih efekata, poput fotoemisije [15], fotoprovodljivosti [16] i fotoluminiscencije [17], u organskim i neorganskim dielektričnim i poluprovodnim kristalima, kao i za procese prikupljanja svetlosti prilikom fotosinteze u biljkama i pojedinim bakterijama [18], jesu eksitoni. Radi se o vezanim parovima elektrona-šupljina, obično generisanim apsorpcijom svetlosti ili relaksacijom slobodnih elektrona i šupljina [18]. S obzirom na činjenicu da su ove ekscitacije elektroneutralne, ne može se očekivati da doprinose električnoj provodljivosti, ali to svakako ne čini njihovu ulogu u materijalima beznačajnom jer u sebi nose ekscitacionu energiju, te uzimaju direktno učešće u transportu energije. Ova pobuđenja obično se svrstavaju u jednu od dve grupe: u grupu Frenkelovih eksitona (*Frenkel excitons*) ili Vanije-Motovih eksitona (*Wannier–Mott excitons*), u skladu sa veličinom rastojanja između elektrona i šupljine, ali se u poslednje vreme izdvajaju i takozvani *charge-transfer* (CT) eksitoni, kao blagi prelaz između dve navedene grupacije [18]. Simbolični prikaz tri različite vrste eksitona u kristalima dat je na slici 1.1.



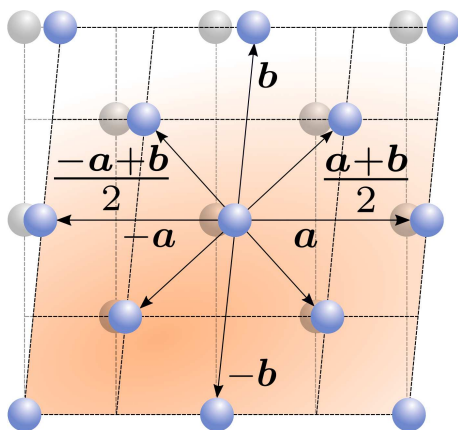
Slika 1.1: Ilustrativni prikaz tri različite vrste eksitona u kristalima: a) Frenkelovi eksitoni ili eksitoni malog radijusa, b) CT eksitoni i c) Vanije-Motovi eksitoni ili eksitoni velikog radijusa.

Frenkelovi eksitoni obično se identifikuju kao parovi elektrona-šupljina malog radijusa [19–21], čija energija veze ima relativno veliku vrednost, reda veličine eV. Otuda je i razumljivo zašto se u teorijskim razmatranjima uzima da se elektron i šupljina u okviru jednog para praktično nalaze na istom čvoru rešetke. Sa druge strane, Vanije-Motovi eksitoni, poznati kao eksitoni ve-

¹Heterostrukture predstavljaju poseban tip struktura, obično poluprovodnih, u kojima se hemijski sastav menja sa pozicijom u materijalu.

likog radijusa, podrazumevaju mnogo veće rastojanje između elektrona i šupljine (i po nekoliko čvorova u rešetki), dok su energije veze nekoliko redova veličine manje, okvirno oko meV. CT eksitoni predstavljaju prelaznu vrstu između Frenkelovih i Vanije-Motovih eksitona i posebno su značajni za razdvajanje slobodnih nosilaca naelektrisanja iz Frenkelovih parova u procesu fotoprovodljivosti [18]. Frustracija koja je uslovljena takmičenjem između kuplovanja elektrona i šupljine unutar para i člana koji opisuje preskakanje elektrona i šupljine sa jedne lokacije na drugu (sa čvora na čvor u kristalu) određuje tip eksitona u određenom materijalu. Tako su Frenkelovi eksitoni tipski vid elektronskih ekscitacija u organskim kristalima, gde između molekula uglavnom vladaju slabe Van der Valsove veze, dok su Vanije-Motovi parovi uglavnom pripisani neorganskim kristalnim strukturama sa jakim jonskim ili kovalentnim vezama među molekulima ili atomima [14].

S obzirom na to da su centralna tema ovog segmenta disertacije četiri aromatična ugljovodonika, shodno prethodno izloženom, očekujemo da će prilikom ispitivanja mikroskopskih svojstava ovih struktura biti neophodno bazični model konstruisati polazeći od Frenkelovih eksitona, koji su u ovom slučaju najznačajniji. Metoda spektroskopije gubitka energije elektrona omogućila je sprovođenje direktnog i preciznog merenja eksitonskog spektra u aromatičnim ugljovodicima [22, 23] poput pentacena [24–26], tetracena [27], picena [28] i hrizena [29]. U skladu sa izvršenim eksperimentalnim opservacijama, javila se potreba za pružanjem podesne mikroskopske slike, koja bi se uklopila sa postojećom eksperimentalnom. Na taj način je i došlo do formiranja oprečnih stavova po pitanju značaja Frenkelovih eksitona u navedenim organskim jedinjenjima. Naime, dok se u fenacenicima (picenu i hrizenu) slika koju pružaju Frenkelovi eksitoni smatra sasvim dovoljnom za opis njihove eksitonske disperzije, neki radovi, poput [30], tvrde da je uticaj CT eksitona u slučaju acena (pentacena i tetracena) mnogo veći od dotad spominjanog u stručnoj literaturi. Stoga je prvi deo disertacije posvećen ispitivanju validnosti ove tvrdnje, odnosno poređenju slike formirane na bazi Frenkelovih eksitona i pripadnih efektivnih eksitonskih hamiltonijana, koji ne obuhvataju druge klase eksitona, sa dostupnim eksperimentalnim podacima.



Slika 1.2: Dvodomenzioni prikaz strukture analiziranih aromatičnih ugljovodonika: rešetka acena je obojena, dok osenčena rešetka prikazuje fenacenske strukture.

	a [Å]	b [Å]	γ [°]	Reference
pentacen	6.27	7.78	87.8	[31]
tetracen	6.06	7.84	85.8	[32]
picen	8.48	6.154	90	[28, 33]
hrizen	8.39	6.20	90	[29]

Tabela 1.1: Konstante rešetki i vrednosti odgovarajućeg ugla za elementarne ćelije analiziranih struktura.

U nastavku poglavlja biće predstavljeni rezultati istraživanja četiri aromatična ugljovodonika - pentacena, tetracena, picena i hrizena. Šematski prikaz strukture kristalnih rešetki ovih

molekula dat je na slici 1.2, dok su odgovarajući parametri rešetke dostupni u tabeli 1.1. Uočava se da aceni tetracen i pentacen kristališu u trikliničnoj formi, dok fenaceni picen i hrizen imaju monoklinične kristalne oblike. Međutim, usled znatno male verovatnoće preskakanja između čvorova u \mathbf{c}^* -pravcu [34], kristal pentacena može se sasvim dobro aproksimirati dvodimenzionom rešetkom sa slike 1.2, a analogno se može pretpostaviti i za preostale kristalne forme od interesa. Osim toga, kako se u tabeli 1.1 vidi da vrednosti ugla γ između osa \mathbf{a} i \mathbf{b} nisu mnogo manje od 90° u slučaju acena, dok u slučaju fenacena iznose tačno 90° , ubuduće će ovaj ugao biti aproksimiran upravo pravim uglom, te će za sva četiri kristala važiti $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$. Naravno, celokupno istraživanje ne bi bilo moguće bez postojanja širokog dijapazona dostupnih eksperimentalnih podataka dobijenih metodom spektroskopije gubitka energije elektrona, te je stoga u tabeli 1.2 istaknut pregled radova iz kojih su preuzeti podaci korišćeni u disertaciji, kao i osnovne karakteristike eksperimentalnih postavki, pri čemu su sva merenja vršena u recipročnoj $\mathbf{a}^*\mathbf{b}^*$ -ravni.

Referenca	Ugljovodonična struktura	Veličina uzorka	Eksperimentalna tehnika	Temperatura
[25]	pentacen	film debljine 100 nm	170 keV spektrometar	300 K
[26]	pentacen	film debljine 100 nm	170 keV spektrometar	20 K
[27]	tetracen	film debljine 100 nm	170 keV spektrometar	20 K
[23]	picen i hrizen	film debljine 100 nm	170 keV spektrometar	20 K

Tabela 1.2: Osnovne karakteristike eksperimentalnih postavki istraživanja čiji su podaci korišćeni u doktorskoj disertaciji.

Alternativni pristup za stvaranje slike o mikroskopskim svojstvima navedenih kristala, u kom se polazi od mnogočestičnog hamiltonijana baziranog na operatorima elektrona i šupljina, moguć je i rezultati su dostupni u nekoliko relativno skorašnjih radova [33, 35–38]. Međutim, srž ove doktorske disertacije jeste prikaz problema koji se elegantno i koncizno mogu rešiti podesnim sredstvima razvijenim za neke druge oblasti ili probleme u teorijskoj fizici kondenzovanog stanja, takozvanim dualnim pristupom. U ovom konkretnom primeru, eksitonski pristup svakako ima izvesne pogodnosti zahvaljujući postojanju jednoznačne korespodencije između spinskih i Paulijevih operatora za $S = 1/2$, čime su otvorena vrata za upotrebu mnogobrojnih alata primenljivih u slučaju spinskih hamiltonijana. Rezultati predstavljeni u ovom delu disertacije mogu se naći u originalnoj formi u dva objavljena rada [39, 40].

1.1 Veza između teorijskog modela Frenkelovih eksitona i Hajzenbergovog modela

Koncept elektroneutralnih eksitonskih ekscitacija potekao je od izvornih radova Jakova Frenkela (*Yakov Frenkel*) iz 1931. godine [41, 42]. Frenkel uočava da postoji mogućnost da se iz apsorpcije svetlosti kreira izvesni ekscitacioni talas (kako ga on naziva), koji se, poput zvučnog, prostire materijalom u sebi noseći paket energije. Na ovaj način podesno je opisao prostiranje elektroneutralnog pobuđenja od molekula do molekula, pri čemu sam elektron ostaje u polaznom molekulu. Naravno, Frenkelovi eksitoni su samo jedan vid ekscitacija koji nastaje apsorpcijom svetlosti, ali su i te kako karakteristični za organske strukture koje će biti ispitivane u nastavku disertacije. Ova činjenica je upravo posledica specifične strukture organskih molekularnih kristala, koja je određena prisustvom Van der Valsovih sila (*Van der Waals forces*) [43]. Njihovo dejstvo privlačno je na velikim rastojanjima, a odbojno na malim. Odgovarajuća potencijalna energija dobro je opisana Lenard-Džonsovim potencijalom (*Lennard-Jones potential*) [43]:

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}, \quad (1.1)$$

gde su konstante A i B određene prirodom strukture. Na ovaj način omogućava se usklađeno uklapanje susednih molekula, odnosno molekulskih orbitala, što za posledicu ima pojavu specifičnih eksitonskih ekscitacija.

Hamiltonijan modela formira se tako da zadovoljava karakteristične uslove koje Frenkelovi eksitoni moraju zadovoljavati. Kako su elektron i šupljina jednog Frenkelovog eksitonskog para lokalizovani na istom čvoru, operatori kreacije trebalo bi da formiraju eksiton na datom čvoru, dok će operator anihilacije poništiti eksiton na odabranom čvoru. Strukture kojima se ova disertacija bavi mogu se efektivno predstaviti dvonivovskim teorijskim modelima usled toga što je razmak između energijskih nivoa osnovnog stanja i prvog pobuđenog stanja osetno manji u odnosu na razmak između prvog i ostalih pobuđenih stanja datog molekula. Posmatrajući situaciju na nivou molekula, ono što se dešava jeste kreiranje (ili anihilacija) elektrona na određenoj molekulskoj orbitali, što se efektivno registruje kao pojava molekula u osnovnom ili pobuđenim stanjima (u slučaju dvonivovskog sistema u pitanju je samo jedno pobuđeno stanje). Na ovaj način se kreira (ili anihilira) par elektrona-šupljine koji, u slučaju Frenkelovih eksitona, počiva na istom čvoru (molekulu). Dakle, za opisivanje ovakvog vida ekscitacija neophodna je samo jedna koordinata, koja određuje poziciju eksitonskog para. Osim toga, ne treba izgubiti iz vida da se na jednom čvoru istovremeno može naći samo jedan eksiton. Na osnovu ovako definisanih uslova, hamiltonijan koji opisuje dinamiku Frenkelovih eksitona u dvonivovskim sistemima može se zapisati u formi [18, 20, 43–46]:

$$H = H_0 + \Delta \sum_{\mathbf{n}} P_{\mathbf{n}}^{\dagger} P_{\mathbf{n}} - \frac{X}{2} \sum_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda}} P_{\mathbf{n}}^{\dagger} P_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}} - \frac{Y}{2} \sum_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda}} P_{\mathbf{n}}^{\dagger} P_{\mathbf{n}} P_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}^{\dagger} P_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\lambda}}, \quad (1.2)$$

gde su $P_{\mathbf{n}}^{\dagger}$ i $P_{\mathbf{n}}$ Paulijevi operatori, koji kreiraju ili anihiliraju eksiton na čvoru \mathbf{n} , $\{\boldsymbol{\lambda}\}$ označava vektore koji spajaju susedne čvorove, H_0 predstavlja slobodan član, Δ eksitonski gep, a X i Y su parametri koji opisuju preskakanje eksitona sa čvora na čvor i interakciju između eksitona na različitim čvorovima, respektivno. Može se uočiti da su svi parametri definisani nezavisno od čvora, što sugerise homogenost razmatrane strukture, ali je svakako moguće u obzir uzeti i parametre koji se menjaju od čvora do čvora. Paulijevi operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[P_{\mathbf{n}}, P_{\mathbf{m}}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} (1 - 2P_{\mathbf{m}}^{\dagger} P_{\mathbf{m}}), \quad [P_{\mathbf{n}}, P_{\mathbf{m}}] = [P_{\mathbf{n}}^{\dagger}, P_{\mathbf{m}}^{\dagger}] = 0, \quad (1.3)$$

kao i relaciju:

$$P_{\mathbf{n}}^2 = (P_{\mathbf{n}}^{\dagger})^2 = 0. \quad (1.4)$$

Dakle, na različitim čvorovima operatori komutiraju, podražavajući ponašanje bozonskih operatora, dok na istom molekulu imaju svojstva fermionskih operatora. Ukoliko se prisetimo da je rečeno da se razmatraju dvonivovski sistemi u kojima se može naći svega jedan eksiton na makar kom čvoru, ova činjenica postaje sasvim logična.

Kao što je nagovešteno, dalji pristup rešavanju problema (nalaženju izraza za eksitonsku disperziju) baziraće se na alatima razvijenim za neke druge sfere teorijske fizike kondenzovanog stanja. Samo poreklo naziva Paulijevih operatora sugerise na dalji korak u postupanju. Naime, Paulijevi operatori naziv su dobili iz analogije sa algebrom spinskih operatora za $S = 1/2$. U našem primeru dvonivovskog eksitonskog sistema postoji jednoznačna korespodencija između Paulijevih i spinskih operatora [18, 47], te se, usled formalne ekvivalentnosti modela, lako može preći na anizotropni Hajzenbergov hamiltonijan. Naime, na osnovu transformacija [47]:

$$S_{\mathbf{n}}^{-} = P_{\mathbf{n}}^{\dagger}, \quad S_{\mathbf{n}}^{+} = P_{\mathbf{n}}, \quad S_{\mathbf{n}}^z = \frac{1}{2} \mathbb{1} - P_{\mathbf{n}}^{\dagger} P_{\mathbf{n}}, \quad (1.5)$$

eksitonski hamiltonijan (1.2) poprima oblik anizotropnog XXZ Hajzenbergovog hamiltonijana

u spoljašnjem polju:

$$H = -\frac{I^x}{2} \sum_{n,\lambda} S_n^- S_{n+\lambda}^+ - \frac{I^z}{2} \sum_{n,\lambda} S_n^z S_{n+\lambda}^z - \mu\mathcal{H} \sum_n S_n^z. \quad (1.6)$$

Kako bismo našli vezu između parametara dva modela, neophodno je spinske operatore u (1.6) zameniti Paulijevim pomoću transformacija (1.5). Dakle, polazimo od:

$$H = -\frac{I^x}{2} \sum_{n,\lambda} P_n^\dagger P_{n+\lambda} - \frac{I^z}{2} \sum_{n,\lambda} \left(\frac{1}{2} \mathbb{1} - P_n^\dagger P_n \right) \left(\frac{1}{2} \mathbb{1} - P_{n+\lambda}^\dagger P_{n+\lambda} \right) - \mu\mathcal{H} \sum_n \left(\frac{1}{2} \mathbb{1} - P_n^\dagger P_n \right) \quad (1.7)$$

i nakon kratkog računa dobijamo:

$$H = -\frac{I^x}{2} \sum_{n,\lambda} P_n^\dagger P_{n+\lambda} - \frac{I^z}{2} \frac{1}{4} z_1 N \mathbb{1} + \frac{I^z}{2} \frac{1}{2} 2z_1 \sum_n P_n^\dagger P_n - \frac{I^z}{2} \sum_{n,\lambda} P_n^\dagger P_n P_{n+\lambda}^\dagger P_{n+\lambda} - \mu\mathcal{H} \frac{N}{2} \mathbb{1} + \mu\mathcal{H} \sum_n P_n^\dagger P_n, \quad (1.8)$$

gde je N ukupran broj čvorova rešetke, a z_1 broj prvih suseda. Nakon poređenja sa hamiltonijanom (1.2) dolazimo do sledećih veza između modelnih parametara:

$$I^x = X, \quad I^z = Y, \quad \mu\mathcal{H} = \Delta - \frac{Y z_1}{2}, \quad (1.9)$$

kao i njihovih inverznih relacija:

$$X = I^x, \quad Y = I^z, \quad \Delta = \frac{I^z z_1}{2} + \mu\mathcal{H}, \quad H_0 = -\frac{I^z z_1 N}{8} - \frac{\mu\mathcal{H} N}{2}. \quad (1.10)$$

Može se uočiti da je, u skladu sa polaznom eksitonskom slikom (1.2) i vezama između dva modela (1.9), anizotropni odabir integrala izmene usklađen sa potrebom da se u izraz uključi preskakanje eksitona sa čvora na čvor, kao i interakcija između eksitona na različitim čvorovima (odnosno parametri X i Y koji ne moraju imati istu vrednost).

Dakle, usled izomorfizma spinskih i paulionskih Hilbertovih prostora na svakom čvoru rešetke, polazni problem eksitonske dinamike opisan jednačinom (1.2) može se u potpunosti preslikati na ekvivalentan efektivni spinski model (1.6). Treba obratiti pažnju na činjenicu da ovom prilikom nije posvećena posebna pažnja razjašnjavanju značenja pojedinačnih parametara spinskog modela jer ga u ovom kontekstu oni i nemaju. Veza između relacija (1.2) i (1.6) je puka formalnost i stoga je jedini značaj apstrakovanih parametara I^x , I^z i $\mu\mathcal{H}$ u njihovoj vezi sa polaznim parametrima eksitonskog hamiltonijana (1.9). Međutim, iako formalan, ovaj dualni pristup stavlja nam na raspolaganje širok asortiman alata trenutno raspoloživih u spinskim sistemima [47–57]. Dakle, sa prostora još uvek nedovoljno eksploatisanih Paulijevih operatora prešli smo na prostor spinskih operatora bogat brojnim mogućnostima. Posebno će se pogodnim ovakav formalizam pokazati u pogledu ispitivanja uticaja eksiton-eksiton interakcija pomoću perturbativne teorije koja je za Hajzenbergove hamiltonijane razvijena u [56, 57]. Stoga će se dalji račun bazirati na dualnom pristupu shodno razmatranju spinskog hamiltonijana (1.6), pri čemu treba imati u vidu vezu modelnih parametara sa polaznim eksitonskim (1.9).

1.2 Disperzija neinteragujućih eksitona

U nastavku rada polazna tačka biće spinski hamiltonijan (1.6). Da bismo došli do konkretnog izraza za disperziju eksitona u četiri aromatična ugljovodonika od interesa,

neophodno je u račun inkorporirati njihovu strukturu prikazanu na slici 1.2. Kao što se može uočiti, razmatraće se tri tipa suseda: dva suseda na pozicijama $\lambda_1 = \{-\mathbf{a}, \mathbf{a}\}$, dva suseda na pozicijama $\lambda_2 = \{-\mathbf{b}, \mathbf{b}\}$, kao i četiri suseda u tačkama na rastojanjima $\lambda_3 = \{\frac{\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}, \frac{-\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}, \frac{\mathbf{a}-\mathbf{b}}{2}, \frac{-\mathbf{a}-\mathbf{b}}{2}\}$. Ova činjenica dalje ukazuje na to da se naši, uslovno rečeno, integrali izmene I^x i I^z dele u tri podskupa, u skladu sa vrstom suseda o kojoj govorimo. Stoga će susedi razdvojeni vektorima λ_1 biti kuplovani integralima izmene I_1^x i I_1^z , susedi na rastojanjima λ_2 integralima izmene I_2^x i I_2^z , a susedi na pozicijama λ_3 integralima izmene I_3^x i I_3^z sa odabranim čvorom rešetke. Prilagođen strukturi rešetke sa slike 1.2, hamiltonijan (1.6) poprima oblik:

$$H = -\frac{I_1^x}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_1} S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}+\lambda_1}^+ - \frac{I_2^x}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_2} S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}+\lambda_2}^+ - \frac{I_3^x}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_3} S_{\mathbf{n}}^- S_{\mathbf{n}+\lambda_3}^+ \\ - \frac{I_1^z}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_1} S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\lambda_1}^z - \frac{I_2^z}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_2} S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\lambda_2}^z - \frac{I_3^z}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_3} S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\lambda_3}^z - \mu \mathcal{H} \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^z. \quad (1.11)$$

Sada se sa spinskih prelazi na bozonske operatore pomoću Blohove aproksimacije (*Bloch approximation*), koja se u slučaju $S = 1/2$ svodi na smene [20, 58]:

$$S_{\mathbf{n}}^- = B_{\mathbf{n}}^\dagger, \quad S_{\mathbf{n}}^+ = B_{\mathbf{n}}, \quad S_{\mathbf{n}}^z = \frac{1}{2} \mathbb{1} - B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}}, \quad (1.12)$$

gde su $B_{\mathbf{n}}^\dagger$ i $B_{\mathbf{n}}$ bozonski operatori kreacije i anihilacije magnona (elementarnih ekscitacija lokalizovanih spinova) na čvoru \mathbf{n} , respektivno. Aproksimacija odgovara linearnoj teoriji spinskih talasa pošto zanemaruje njihovu međusobnu interakciju, tj. ne uključuje članove sa više od dva bozonska operatora [59]. Stoga se može zaključiti da aproksimacija daje rezultate koji su u saglasju sa eksperimentima onda kada je sistem slabo pobuđen. Osim toga, spinske komutacione relacije se u ovom kontekstu ne održavaju u potpunosti, te ne može biti reči o reprezentaciji u njenom punom značenju².

Hamiltonijan je sad forme:

$$H = -\frac{I_1^x}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_1} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}+\lambda_1} - \frac{I_2^x}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_2} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}+\lambda_2} - \frac{I_3^x}{2} \sum_{\mathbf{n}, \lambda_3} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}+\lambda_3} - \frac{I_1^z}{2} \frac{2}{4} N \mathbb{1} \\ + 2 \frac{I_1^z}{2} \frac{2}{2} \sum_{\mathbf{n}} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}} - \frac{I_2^z}{2} \frac{2}{4} N \mathbb{1} + 2 \frac{I_2^z}{2} \frac{2}{2} \sum_{\mathbf{n}} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}} - \frac{I_3^z}{2} \frac{4}{4} N \mathbb{1} + 2 \frac{I_3^z}{2} \frac{4}{2} \sum_{\mathbf{n}} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}} \\ - \mu \mathcal{H} \frac{N}{2} \mathbb{1} + \mu \mathcal{H} \sum_{\mathbf{n}} B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}} + \mathcal{O}(B_{\mathbf{n}}^\dagger B_{\mathbf{n}} B_{\mathbf{n}+\lambda}^\dagger B_{\mathbf{n}+\lambda}), \quad (1.13)$$

gde je u obzir uzet broj suseda određenog tipa, kao i činjenica da nas najpre zanima ponašanje sistema neinteragujućih eksitona. Da bismo došli do konačnog izraza za disperziju, iskoristićemo Furijeove transformacije:

$$B_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}}, \quad B_{\mathbf{n}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}}, \quad \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{n}}, \quad (1.14)$$

koje će nam omogućiti prelazak na impulsni prostor, u kom se disperzija direktno može očitati iz novog oblika hamiltonijana. Najpre je neophodno transformisati sledeći član, koji odgovara

²Prelaskom na bozonske operatore, pri čemu treba imati u vidu komutacione relacije tipa:

$$[B_{\mathbf{n}}, B_{\mathbf{m}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}, \quad [B_{\mathbf{n}}, B_{\mathbf{m}}] = [B_{\mathbf{n}}^\dagger, B_{\mathbf{m}}^\dagger] = 0,$$

postaje očito da su spinske komutacione relacije:

$$[S_{\mathbf{n}}^+, S_{\mathbf{m}}^-] = 2S_{\mathbf{n}}^z \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}, \quad [S_{\mathbf{n}}^\pm, S_{\mathbf{m}}^z] = \mp S_{\mathbf{n}}^\pm \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}$$

zadovoljene samo aproksimativno.

susedima prvog tipa:

$$\begin{aligned} \sum_{n,\lambda_1} B_n^\dagger B_{n+\lambda_1} &= \frac{1}{N} \sum_{n,\lambda_1,k,q} B_k^\dagger e^{-ik \cdot n} B_q e^{iq \cdot (n+\lambda_1)} = \sum_{\lambda_1,k} B_k^\dagger B_k e^{ik \cdot \lambda_1} = \\ &= \sum_k B_k^\dagger B_k (e^{ik \cdot \mathbf{a}} + e^{-ik \cdot \mathbf{a}}) = 2 \sum_k B_k^\dagger B_k \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}), \end{aligned} \quad (1.15)$$

a na istovetan način se i član koji odgovara susedima drugog tipa dobija u obliku:

$$\sum_{n,\lambda_2} B_n^\dagger B_{n+\lambda_2} = 2 \sum_k B_k^\dagger B_k \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}), \quad (1.16)$$

dok član koji odgovara susedima treće vrste nakon kraćeg računa:

$$\begin{aligned} \sum_{n,\lambda_3} B_n^\dagger B_{n+\lambda_3} &= \frac{1}{N} \sum_{n,\lambda_3,k,q} B_k^\dagger e^{-ik \cdot n} B_q e^{iq \cdot (n+\lambda_3)} = \sum_{\lambda_3,k} B_k^\dagger B_k e^{ik \cdot \lambda_3} = \\ &= \sum_k B_k^\dagger B_k (e^{ik \cdot \frac{\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}} + e^{ik \cdot \frac{-\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}} + e^{ik \cdot \frac{\mathbf{a}-\mathbf{b}}{2}} + e^{-ik \cdot \frac{\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}}) = \\ &= \sum_k B_k^\dagger B_k ((e^{\frac{ik \cdot \mathbf{a}}{2}} + e^{\frac{-ik \cdot \mathbf{a}}{2}})(e^{\frac{ik \cdot \mathbf{b}}{2}} + e^{\frac{-ik \cdot \mathbf{b}}{2}})) \end{aligned} \quad (1.17)$$

možemo zapisati u formi:

$$\sum_{n,\lambda_3} B_n^\dagger B_{n+\lambda_3} = 4 \sum_k B_k^\dagger B_k \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right). \quad (1.18)$$

Za dalji račun neophodno je transformisati i sledeći član:

$$\sum_n B_n^\dagger B_n = \frac{1}{N} \sum_{n,k,q} B_k^\dagger e^{-ik \cdot n} B_q e^{iq \cdot n} = \sum_k B_k^\dagger B_k. \quad (1.19)$$

Možemo uočiti da smo prilikom računa prešli na diskretan prostor impulsa, ali smo veoma lako mogli izabrati i kontinualni prostor pošto nas za početak interesuje samo izraz za disperziju. Osim toga, kao što je i naglašeno, uzeli smo da je broj prvog i drugog tipa suseda $z_1 = z_2 = 2$, dok je broj suseda treće vrste $z_3 = 4$.

Konačni oblik hamiltonijana je sada:

$$\begin{aligned} H = H'_0 - I_1^x \sum_k B_k^\dagger B_k \gamma_1(\mathbf{k}) - I_2^x \sum_k B_k^\dagger B_k \gamma_2(\mathbf{k}) - 2I_3^x \sum_k B_k^\dagger B_k \gamma_3(\mathbf{k}) \\ + I_1^z \sum_k B_k^\dagger B_k + I_2^z \sum_k B_k^\dagger B_k + 2I_3^z \sum_k B_k^\dagger B_k + \mu \mathcal{H} \sum_k B_k^\dagger B_k, \end{aligned} \quad (1.20)$$

gde je slobodni član dat izrazom:

$$H'_0 = -\frac{(I_1^z + I_2^z + 2I_3^z)N}{4} - \frac{\mu \mathcal{H} N}{2}, \quad (1.21)$$

a geometrijski faktori su:

$$\gamma_1(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}), \quad \gamma_2(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}), \quad \gamma_3(\mathbf{k}) = \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right). \quad (1.22)$$

Poređenjem sa generalnijom relacijom:

$$H = H'_0 + \sum_k E(\mathbf{k}) B^\dagger(\mathbf{k}) B(\mathbf{k}), \quad (1.23)$$

možemo uočiti da disperzija neinteragujućih eksitona ima sledeći oblik:

$$E(\mathbf{k}) = I_1^x \left(\frac{I_1^z}{I_1^x} - \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \right) + I_2^x \left(\frac{I_2^z}{I_2^x} - \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \right) + 2I_3^x \left(\frac{I_3^z}{I_3^x} - \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right) \right) + \mu\mathcal{H}, \quad (1.24)$$

odnosno:

$$E(\mathbf{k}) = \Delta - I_1^x \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) - I_2^x \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) - 2I_3^x \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right), \quad (1.25)$$

gde je eksitonski gep definisan relacijom:

$$\Delta = I_1^z + I_2^z + 2I_3^z + \mu\mathcal{H}. \quad (1.26)$$

S obzirom na polaznu vezu između Hajzenbergovog i eksitonskog hamiltonijana (1.9), odnosno činjenicu³ da je $I_1^z = Y_1$, $I_2^z = Y_2$ i $I_3^z = Y_3$, jasno je da je dobijena disperzija neinteragujućih eksitona analogna relaciji dobijenoj iz *tight-binding* opisa [25]:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + t_a \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) + t_b \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) + 2t_{ab} \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right), \quad (1.27)$$

sa parametrima t_a , t_b i t_{ab} , koji opisuju interakciju između sva tri tipa suseda razmatrana na slici 1.2.

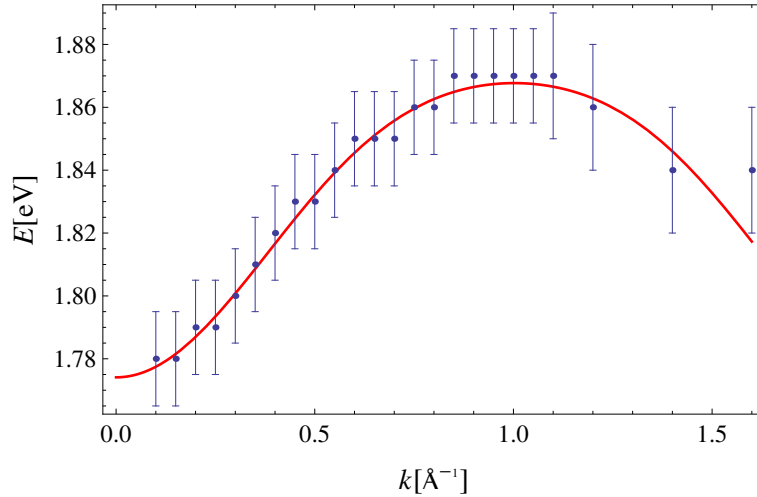
Takođe, iz izraza za eksitonski gep (1.26) uočava se značaj člana sa magnetnim poljem $\mu\mathcal{H}$. Naime, kako parametri I_1^z , I_2^z i I_3^z po svojoj prirodi imaju male vrednosti, formalno uvedeno magnetno polje $\mu\mathcal{H}$ ima zadatak da proizvede veliki eksitonski gep, u zavisnosti od eksperimentalnih podataka za datu strukturu. Dakle, ovako uvedeno magnetno polje nije realni parametar, niti je sistem eksitona izložen njegovom dejstvu, već je njegova uloga striktno postizanje izvesne vrednosti eksitonskog gega Δ , koji predstavlja realni parametar eksitonskog sistema. Osim toga, kako je relacija (1.25) opštijeg karaktera, može se zaključiti da predstavlja pogodan temelj za opis eksitonske dinamike u slučaju sva četiri razmatrana aromatična ugljovodonika.

1.2.1 Disperzija neinteragujućih eksitona u pentacenu

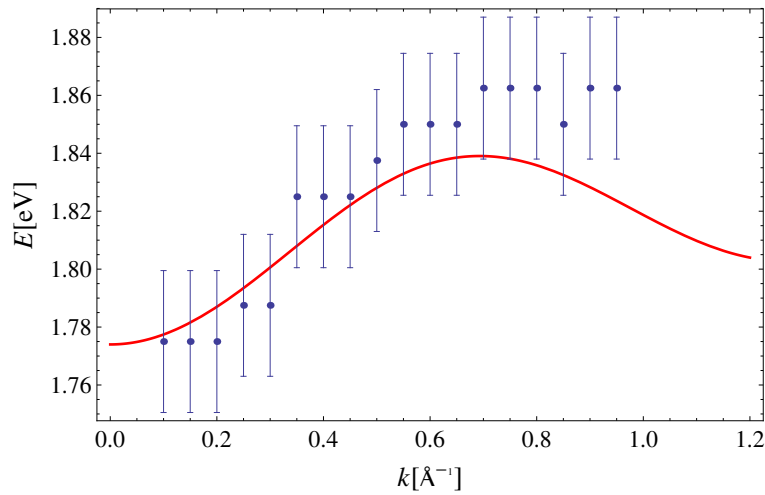
Najpre ćemo razmatrati slučaj neinteragujućih eksitona, čija je dinamika opisana disperzionom relacijom (1.25), u slučaju rešetke pentacena. Eksperimentalni podaci preuzeti su iz [25], pri čemu su merenja vršena na sobnoj temperaturi (~ 300 K) u četiri različita recipročna pravca unutar Brillueneve zone - (100), (210), (110) i (120). Teorijske krive su dobijene fitovanjem disperzione relacije (1.25) u skladu sa eksperimentalnim podacima, a rezultati su prikazani na slikama 1.3–1.6. Neophodno je naglasiti da je, osim aproksimiranja kristalne rešetke pravougaonom u \mathbf{ab} -ravni ($\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$), za dobijanje teorijskih krivi načinjena još jedna aproksimacija. Naime, pravce merenja u recipročnoj $\mathbf{a}^*\mathbf{b}^*$ -ravni definisali smo u skladu sa ćelijom više simetrije, u kojoj su recipročni pravci \mathbf{a}^* i \mathbf{b}^* paralelni direktnim \mathbf{a} i \mathbf{b} , a $\mathbf{a}^*\mathbf{b}^*$ -ravan definisana na ovaj način približno kvadratna. Jasno je da je triklični pentacen struktura niže simetrije i da su pravci merenja malo pomereni u odnosu na ovako zadate pravce, ali se ispostavlja da su i uz ovu aproksimaciju rezultati zadovoljavajući.

Fitovanjem jednačine (1.25) u skladu sa eksperimentalnim podacima duž (100) pravca, na osnovu opisanih aproksimacija, dobijeni su parametri $I_1^x = 5.7$ meV i $I_3^x = 23.4$ meV. Vrednost eksitonskog gega $\Delta = 1.83$ eV preuzeta je iz [60]. Poslednji parametar $I_2^x = 3.4$ meV dobijen je fitovanjem eksitonske disperzije u skladu sa eksperimentalnim podacima duž (210) pravca i prethodno određenim preostalim parametrima. Kako je korišćen identičan skup parametara,

³U skladu sa strukturom pentacena, u relaciji (1.2) javiće se tri skupa parametara X i Y , koji odgovaraju postojanju tri tipa suseda.



Slika 1.3: Eksitonska disperzija duž (100) pravca. Eksperimentalni podaci mereni na 300 K preuzeti su iz [25]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 1.83$ eV [60], $I_1^x = 5.7$ meV, $I_2^x = 3.4$ meV i $I_3^x = 23.4$ meV.

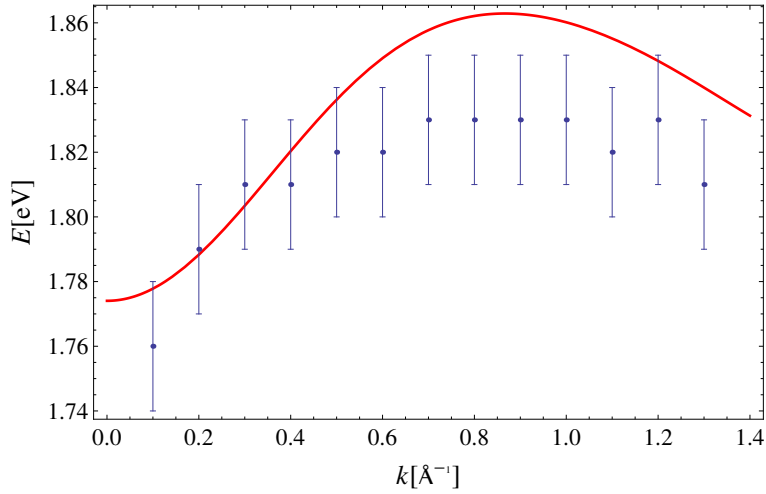


Slika 1.4: Eksitonska disperzija duž (210) pravca. Eksperimentalni podaci mereni na 300 K preuzeti su iz [25]. Teorijska kriva dobijena je za identične vrednosti parametara kao u slučaju pravca (100).

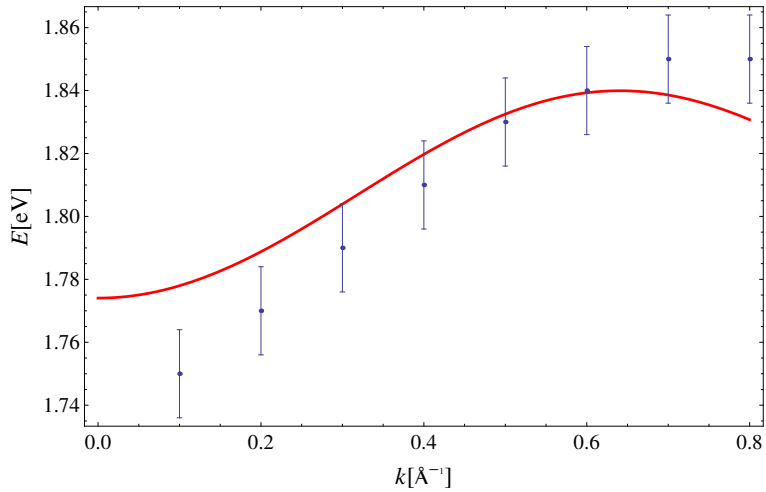
očito je da za sva četiri pravca unutar Brillouenove zone teorijske disperzione krive imaju istu granicu $\Delta - I_1^x - I_2^x - 2I_3^x = 1.7741$ eV kad $k \rightarrow 0$. Trodimenzioni prikaz eksitonske disperzije $E(k_x, k_y)$ dat je na slici 1.7.

Kao što se može primetiti, eksperimentalni podaci i teorijske krive poseduju istu periodičnost u slučaju sva četiri pravca unutar Brillouenove zone. Ipak, postoje mala neslaganja, koja bi se mogla pripisati postojanju drugih ekscitacija, kao što su sugerisani CT eksitoni [25], ali i aproksimacijama koje su načinjene prilikom razmatranja strukture pentacena. Uočavamo da je poklapanje najbolje u slučaju pravca (100), koji je bio polazna tačka prilikom fitovanja, ali se situacija u slučaju preostalih pravaca može donekle popraviti i uzimanjem neznatno izmenjenih vrednosti dobijenih parametara nauštrb ovog pravca. U svakom slučaju, može se zaključiti da CT eksitoni nemaju toliko veliki uticaj na eksitonsku dinamiku u kristalu pentacena kao što je to predočeno u [25].

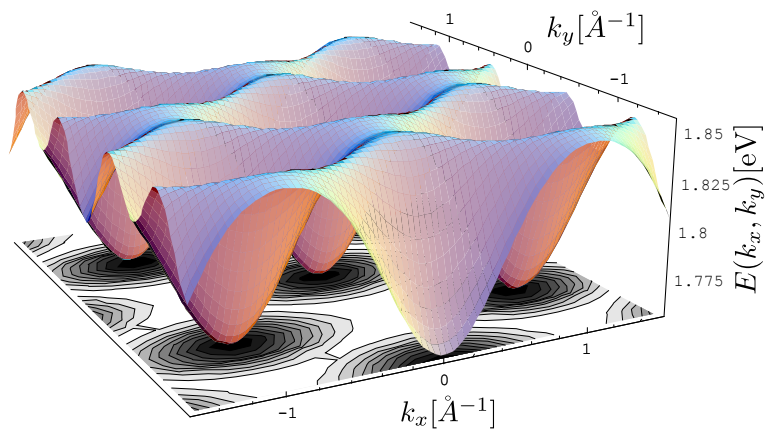
Na ovom mestu upoređićemo dobijene rezultate sa teorijskim fitovima predstavljenim u [25], a koji su u skladu sa disperzijom dobijenom iz *tight-binding* opisa (1.27), kao i identičnim eksperimentalnim podacima, da bismo pronikli u poreklo prethodnog mišljenja da slika koju pružaju Frenkelovi eksitoni nije adekvatna u slučaju pentacena i da je neophodno uključiti CT



Slika 1.5: Eksitonska disperzija duž (120) pravca. Eksperimentalni podaci mereni na 300 K preuzeti su iz [25]. Teorijska kriva dobijena je za date vrednosti već određenih parametara.



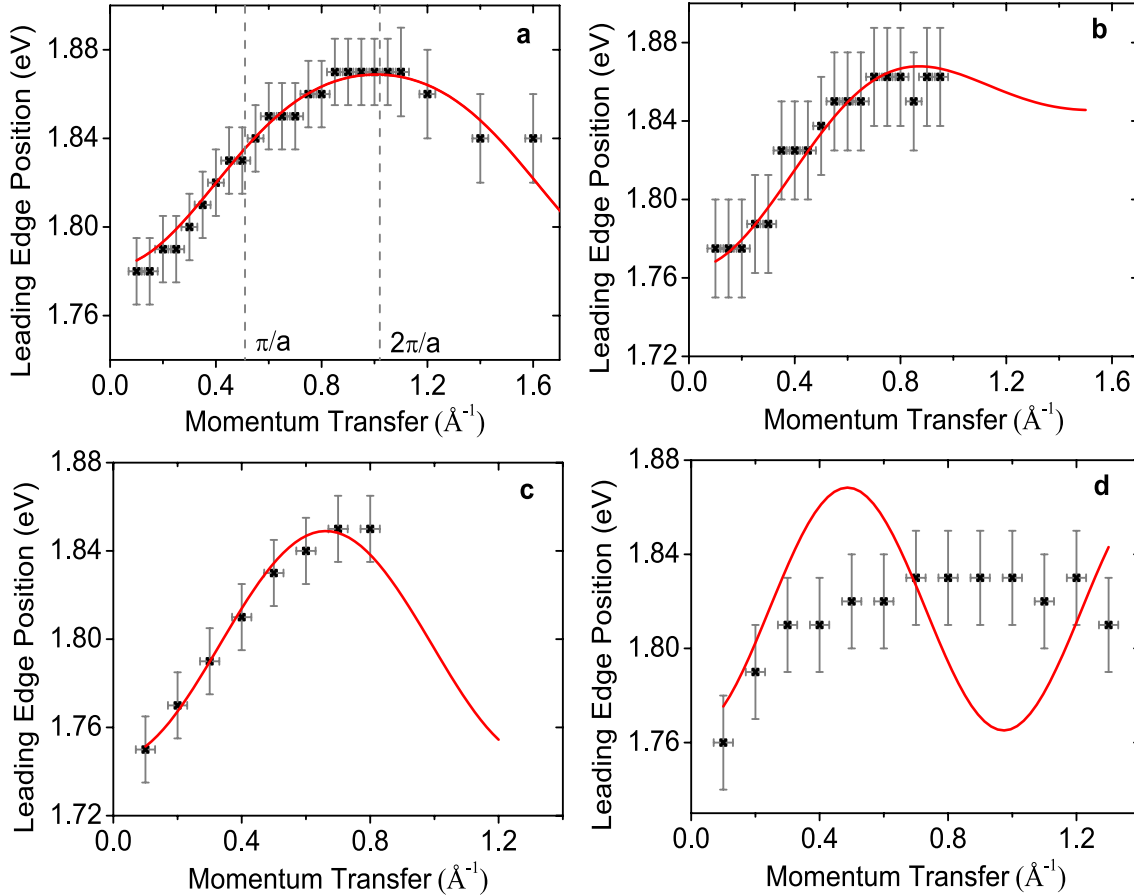
Slika 1.6: Eksitonska disperzija duž (110) pravca. Eksperimentalni podaci mereni na 300 K preuzeti su iz [25]. Teorijska kriva dobijena je za date vrednosti već određenih parametara.



Slika 1.7: Trodimenzioni prikaz eksitonske disperzije u pentacenu. Korišćen je prethodno određen skup parametara.

eksitone u sam model. Ovi rezultati prikazani su na slici 1.8. Kao što se može primetiti, odstupanje od eksperimentalnih podataka najveće je u slučaju pravca (120), gde dolazi i do znatnog neslaganja sa periodičnošću merenih podataka. Ovo je i bio razlog za iznošenje zaključka o manjkavosti modeliranja eksitonske dinamike u pentacenu isključivo na osnovu Frenkelovih ek-

sitona. Međutim, postoje dve činjenice koje se pokazuju diskutabilnim u ovom slučaju. Naime, u samom radu nisu izložene vrednosti svih fitovanih parametara jednačine (1.27), a na slici 1.8 može se uočiti da je za različite pravce korišćen različit skup parametara s obzirom na činjenicu da teorijski fitovi imaju različitu granicu kad $k \rightarrow 0$. Kako je u ovoj disertaciji korišćenjem istog skupa parametara za sva četiri pravca pokazano da teorijske krive poseduju istu periodičnost kao preuzeti eksperimentalni podaci, može se reći da je zaključak [25] previše jak i da su za eksitonsku dinamiku u pentacenu u najvećoj meri zaslužni baš Frenkelovi eksitoni.



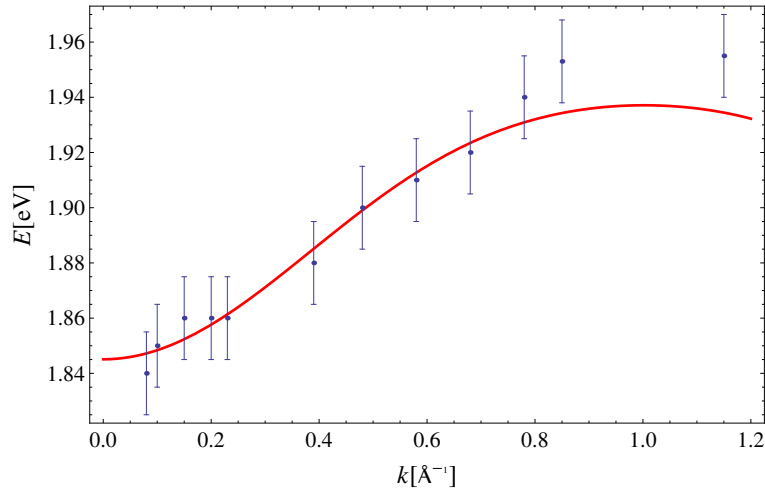
Slika 1.8: Eksperimentalni i teorijski prikaz eksitonske disperzije za četiri pravca u recipročnoj $\mathbf{a}^*\mathbf{b}^*$ -ravni pentacena: a) (100), b) (210), c) (110) i d) (120) [25]. Teorijski fit odgovara sledećim parametrima: $t_a = -2.3$ meV i $t_{ab} = -10.9$ meV. Preostali parametri nisu dati.

Takođe, s obzirom na to da je efektivna masa eksitona u pentacenu velika, u skladu sa zaključkom iz [61], kao i da je raspon energijskih vrednosti na slikama 1.3–1.6 prilično uzak, može se zaključiti da su parametri jednačine (1.2) X_1 , X_2 i X_3 , koji opisuju preskakanje eksitona sa čvora na čvor u slučaju tri različite vrste suseda, pozitivni i mali, te odgovarajući Hajzenbergov hamiltonijan (1.6) opisuje feromagnet. Osim toga, poređenjem izraza za eksitonsku disperziju (1.25) i (1.27) možemo zaključiti da su veze između modelnih parametara sledeće:

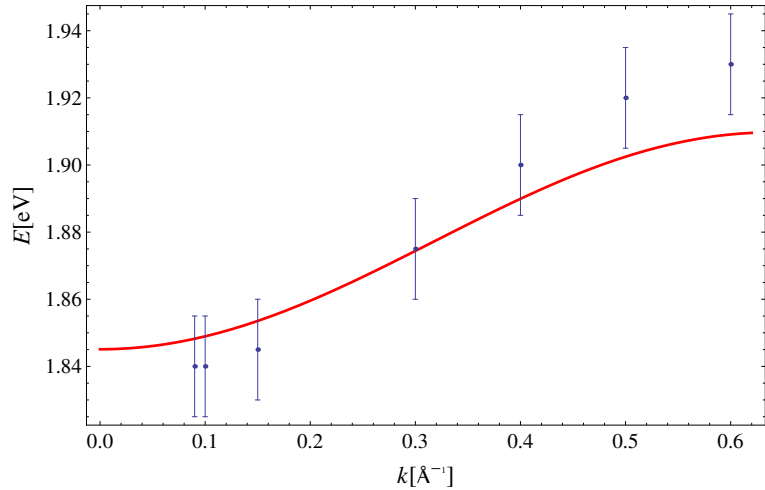
$$t_a = -I_1^x < 0, \quad t_b = -I_2^x < 0, \quad t_{ab} = -I_3^x < 0, \quad (1.28)$$

što je u skladu sa vrednostima datim u [25].

Osim rezultata merenja eksitonske disperzije na sobnoj temperaturi, eksperimentalni podaci su dostupni i za merenja izvršena na temperaturi od 20 K [26]. Teorijske krive eksitonske disperzije (1.25) upoređene sa eksperimentalnim podacima iz [26], merenim u pravcima recipročne rešetke (100) i (110), prikazane su na slikama 1.9 i 1.10. Prilikom crtanja teorijske disperzije korišćeni su integrali izmene sa slika 1.3–1.6, dok je vrednost eksitonskog gepa prilagođena novim podacima i iznosi $\Delta = 1.9$ eV. I u ovom slučaju je poklapanje teorije i eksperimenta



Slika 1.9: Eksitonska disperzija duž (100) pravca. Eksperimentalni podaci mereni na 20 K preuzeti su iz [26]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 1.9$ eV, $I_1^x = 5.7$ meV, $I_2^x = 3.4$ meV i $I_3^x = 23.4$ meV.



Slika 1.10: Eksitonska disperzija duž (110) pravca. Eksperimentalni podaci mereni na 20 K preuzeti su iz [26]. Teorijska kriva podrazumeva isti skup parametara kao na slici 1.9.

zadovoljavajuće, a periodičnost istovetna. Ovo dodatno pojačava zaključak da uticaj CT eksitona može popraviti slaganje sa eksperimentalnim podacima, ali i da je on manji od prethodno pretpostavljenog. Različite vrednosti eksitonskog gepa na 300 K i 20 K se u pogledu Hajzenbergovog modela mogu pripisati promeni člana koji opisuje fiktivno magnetno polje $\mu\mathcal{H}$, dok bi se prelaskom na sliku eksitona i realnih parametara ovakva razlika upravo mogla pripisati različitoj temperaturi.

1.2.2 Davidovljevo cepanje u organskim molekulskim strukturama

Dosad su razmatrani pravci u molekulu pentacena duž kojih se uočava samo jedna grana disperzije, koja odgovara relaciji (1.25). Međutim, ispostavlja se da u izvesnim pravcima primećujemo da dolazi do razdvajanja krive u dve grane, odnosno pojave fenomena poznatog kao Davidovljevo cepanje. Sam fenomen uočio je Aleksandar Davidov (*Alexander Davydov*) [62], a poreklo nalazi u načinu popunjavanja elementarne ćelije. Naime, dok se u slučaju struktura sa jednim molekulom po elementarnoj ćeliji može očekivati postojanje svega jedne disperzione grane, uplitanje dodatnih molekula znatno menja situaciju. Kako je pentacen triklična struktura sa dva molekula po elementarnoj ćeliji [63], kao i tetracen, možemo očekivati da,

u zavisnosti od polarizacije, postoje pravci u recipročnoj rešetki u kojima će biti registrovane dve Davidovljeve komponente. Kako i razmatrani fenaceni poseduju isti broj molekula po jediničnoj ćeliji, očekivanja su analogna. Naravno, broj Davidovljevih komponenti jednak je broju molekula po elementarnoj ćeliji, pa je teorijski kod nekih struktura moguće očekivati i veći broj disperzionih grana.

Uzročnika ove pojave treba tražiti u interakciji između simetrijski neekvivalentnih molekula. Naime, ako se osvrnemo na sliku 1.2, vidimo da sa jedne strane imamo interakciju između molekula iste vrste, koja je opisana parametrima $I_{1/2}^x$ i $I_{1/2}^z$ (odnosno, u rečniku realnih eksitonskih parametara, $X_{1/2}$ i $Y_{1/2}$), dok se molekuli nalaze na rastojanjima λ_1 i λ_2 . Iako su molekuli druge vrste, koji se nalaze na dijagonalnim pozicijama i rastojanjima λ_3 od molekula prve vrste, hemijski identični (mada to ne mora nužno biti slučaj), njihova interakcija sa molekulima prve vrste, opisana članovima I_3^x i I_3^z (odnosno X_3 i Y_3), dovodi do sprežavanja dve razlučive podrešetke⁴, čime dolazi do njihovog mešanja i cepanja koje se registruje u energijskom spektru, kao i na disperzionoj krivi [26, 27]. Naravno, oblik krive i razdvojenost dve Davidovljeve komponente zavisice od pravca posmatranja [18], te je moguće da u konkretnom pravcu ne dolazi do ispoljavanja ove pojave [23, 25–27].

Jasno je da ovakvom opisu ne može odgovarati disperzija (1.25), koja ima samo jednu komponentu, te je teoriju potrebno modifikovati kako bi se na zadovoljavajući način prikazale i druge Davidovljeve grane. U kontekstu teorije bazirane na Hajzenbergovom XXZ modelu, to znači da najpre na svakom čvoru \mathbf{n} moramo definisati skup bozonskih okupacionih stanja $\{|\mathcal{N}_A\rangle_{\mathbf{n}} \otimes |\mathcal{N}_B\rangle_{\mathbf{n}}\}$, gde su sa A i B obeleženi doprinosi različitim Davidovljevim komponentama. Blohovski hamiltonijan (1.23) se onda može prilagoditi situaciji uvođenjem direktne sume:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_A \oplus \tilde{H}_B, \quad (1.29)$$

gde su hamiltonijani \tilde{H}_A i \tilde{H}_B definisani relacijom:

$$\tilde{H}_A = \tilde{H}'_0 + \sum_{\mathbf{k}} E_A(\mathbf{k}) B_{A\mathbf{k}}^\dagger B_{A\mathbf{k}} \quad (1.30)$$

i:

$$\tilde{H}_B = \tilde{H}'_0 + \sum_{\mathbf{k}} E_B(\mathbf{k}) B_{B\mathbf{k}}^\dagger B_{B\mathbf{k}}, \quad (1.31)$$

u skladu sa bozonskim komutacionim relacijama:

$$[B_{i\mathbf{k}}, B_{j\mathbf{q}}^\dagger] = \delta_{i,j} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}, \quad [B_{i\mathbf{k}}, B_{j\mathbf{q}}] = [B_{i\mathbf{k}}^\dagger, B_{j\mathbf{q}}^\dagger] = 0, \quad i, j = A, B. \quad (1.32)$$

Modifikovana eksitonska disperzija, koja se odnosi na dve različite Davidovljeve komponente, sada je data relacijom:

$$E_{A/B}(\mathbf{k}) = \Delta_{A/B} - I_{1_{A/B}}^x \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) - I_{2_{A/B}}^x \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) - 2I_{3_{A/B}}^x \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right), \quad (1.33)$$

u kojoj je vrednost eksitonskog gepa data u obliku:

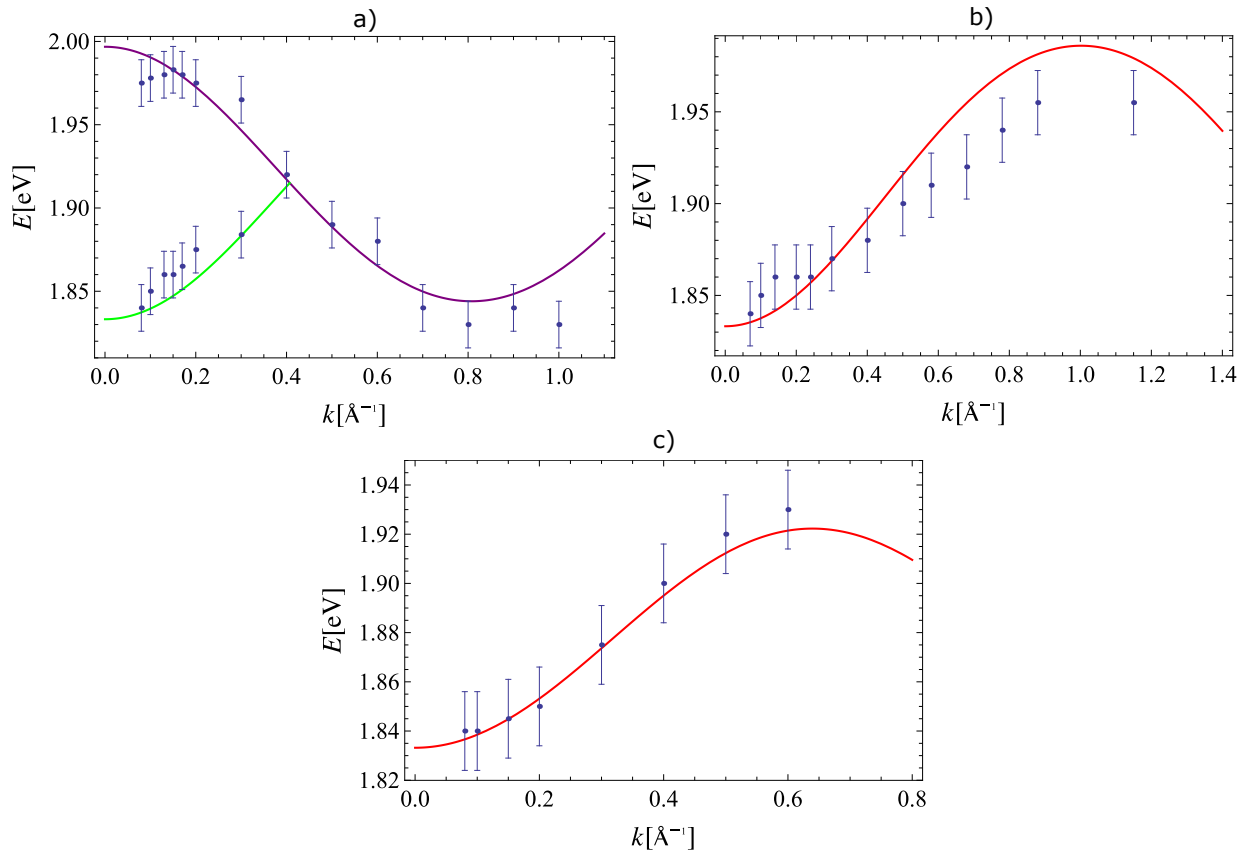
$$\Delta_A = \Delta_B = I_1^z + I_2^z + 2I_3^z + \mu\mathcal{H}. \quad (1.34)$$

Dakle, dok se ostavlja prostora za postojanje različitih vrednosti I^x parametara u izrazu za izmenjenu disperziju (1.33), I^z komponente ostaju identične za dve Davidovljeve grane, kao i gep. Eksperimentalni rezultati koji ilustruju Davidovljevo cepanje u pojedinim pravcima sugerišu da je gornja Davidovljeva grana ogledalski preslikana slika donje [26, 27]. Stoga se ispostavlja da je za zadovoljavajuće uklapanje eksperimentalnih podataka i teorijske krive bazirane na relaciji (1.33) dovoljno invertovati integrale izmene, tj. postaviti uslov $I_{\alpha_B}^x = -I_{\alpha_A}^x$, pri čemu je $\alpha = 1, 2, 3$.

⁴Treba uočiti da vrsta molekula nije isto što i tip/vrsta suseda, o čemu je prethodno bilo reči. Kada govorimo o Davidovljevom cepanju, za njega je značajno postojanje dve podrešetke, koje su međusobno spregnute integralima izmene I_3^x i I_3^z , te u ovom kontekstu vrsta molekula znači da oni pripadaju jednoj ili drugoj podrešetki.

1.2.3 Disperzija neinteragujućih eksitona u pentacenu i tetracenu u skladu sa uočenim Davidovljevim cepanjem

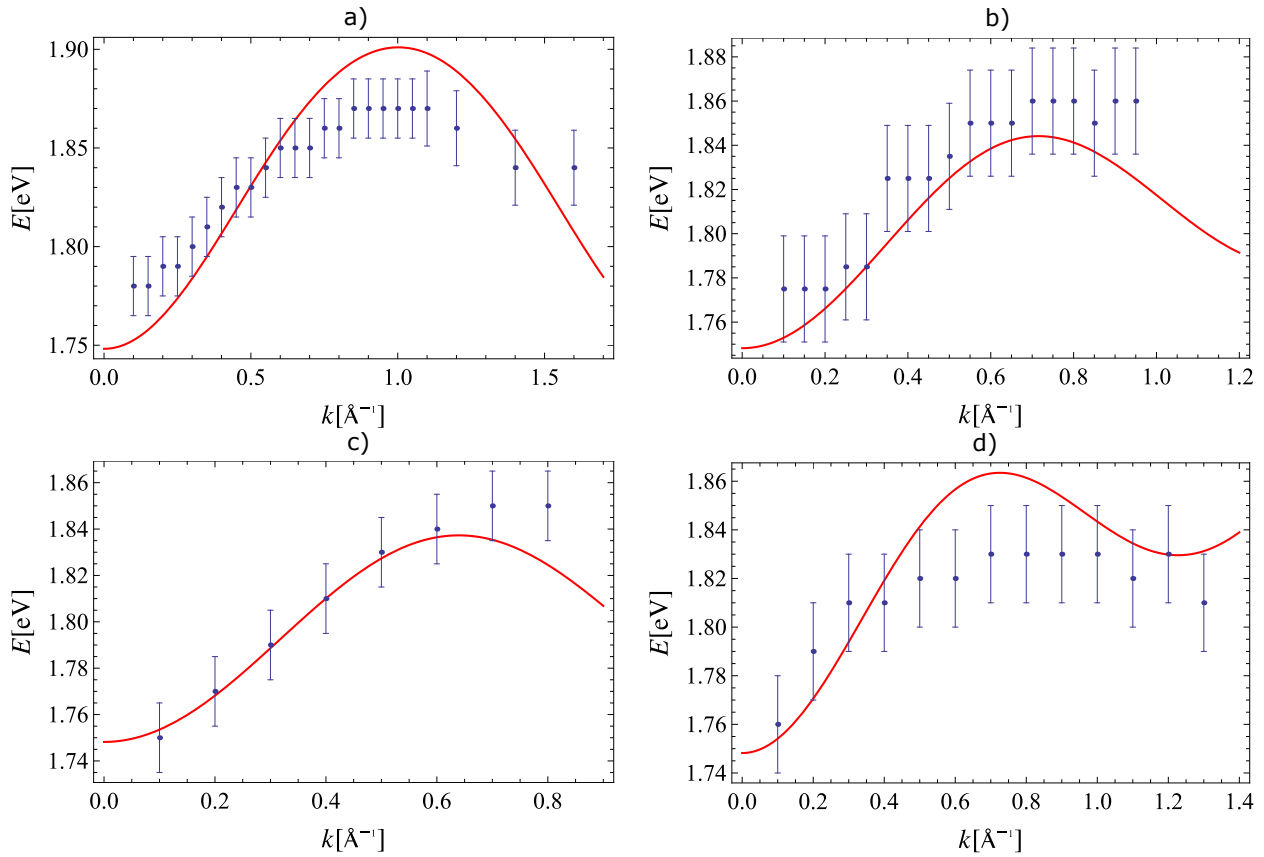
Najpre ćemo fitovati pentacensku neinteragujuću disperziju (1.33) u skladu sa eksperimentalnim podacima iz [25, 26] i dosad nerazmatranim pravcem duž koga se uočava pojava dve Davidovljeve grane. Koristićemo iste aproksimacije za definisanje pravca merenja kao i prilikom prethodnog fitovanja. Na slici 1.11 prikazana je fitovana disperziona kriva upoređena sa izmerenim podacima duž recipročnih pravaca (010), (100) i (110) na temperaturi od 20 K [26]. Jedan od pravaca duž kojih se vršilo merenje bio je pravac \mathbf{b}^* , u kom je uočeno postojanje gornje Davidovljeve grane. Kako je u slučaju pentacena Davidovljevo cepanje najizraženije u direktnim \mathbf{a} i \mathbf{b} pravcima [64], a osa \mathbf{b}^* bliža osi \mathbf{b} nego što je to slučaj sa osama \mathbf{a}^* i \mathbf{a} [26], jasno je zašto je Davidovljevo cepanje eksperimentalno uočeno samo duž pravca (010).



Slika 1.11: Eksitonska disperzija u pentacenu duž tri pravca: a) (010), b) (100) i c) (110). Eksperimentalni podaci mereni na 20 K preuzeti su iz [26]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 1.915$ eV, $I_{1A}^x = 3.2$ meV, $I_{2A}^x = 2.2$ meV i $I_{3A}^x = 38.2$ meV. Zelenom bojom označena je donja Davidovljeva grana, a ljubičastom gornja.

Prilikom crtanja fitovane krive sa slike 1.11 korišćen je sledeći skup parametara: $\Delta = 1.915$ eV, $I_{1A}^x = 3.2$ meV, $I_{2A}^x = 2.2$ meV i $I_{3A}^x = 38.2$ meV. Može se primetiti da je slaganje sa eksperimentalnim podacima zadovoljavajuće (pogotovo u pravcu duž kog se uočavaju dve Davidovljeve grane), kao i da je periodičnost ista. Osim toga, uočava se da se invertovanjem znaka integrala izmene donje grane ($I_{\alpha B}^x = -I_{\alpha A}^x$) dobijaju rezultati u saglasnosti sa podacima za gornju granu. Takođe, kako je korišćen jedinstven skup parametara, donja grana teorijske disperzije u svim pravcima ispoljava istovetnu granicu $\Delta - I_{1A}^x - I_{2A}^x - 2I_{3A}^x = 1.8332$ eV kada $k \rightarrow 0$.

Na slici 1.12 prikazana je teorijska disperzija upoređena sa eksperimentalnim podacima merenim na temperaturi od 300 K duž četiri pravca recipročne rešetke pentacena: (100), (210), (110) i (120). Uočavamo da je slaganje sa eksperimentalnim podacima dobro u smislu po-

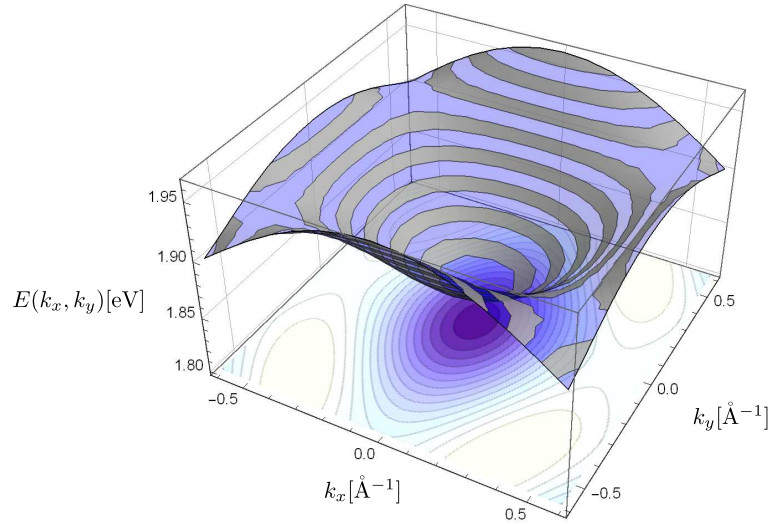


Slika 1.12: Eksitonska disperzija u pentacenu duž četiri pravca: a) (100), b) (210), c) (110) i d) (120). Eksperimentalni podaci mereni su na 300 K [25]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 1.83$ eV, $I_{1A}^x = 3.2$ meV, $I_{2A}^x = 2.2$ meV i $I_{3A}^x = 38.2$ meV.

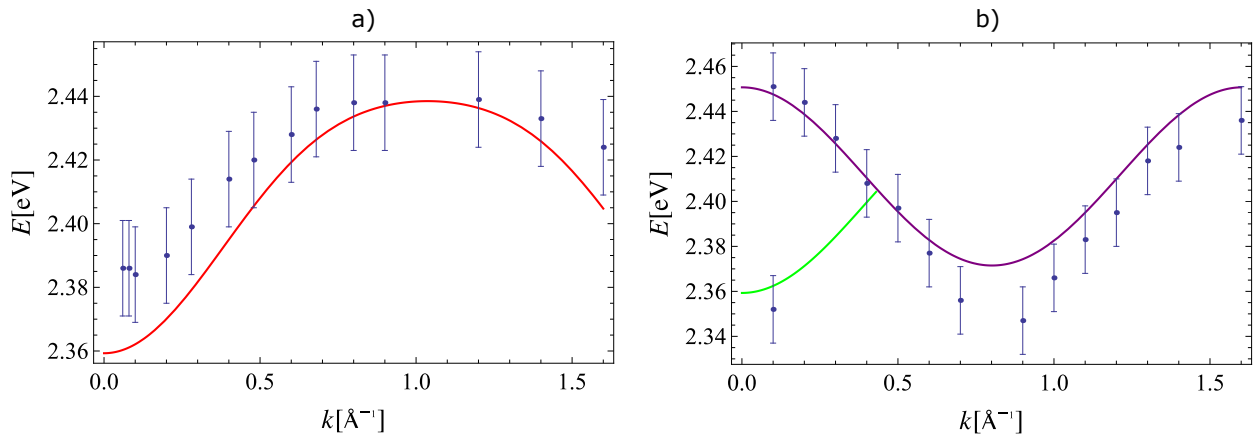
dražavanja periodičnosti. Koristili smo isti skup integrala izmene kao i u prethodnom slučaju ($I_{1A}^x = 3.2$ meV, $I_{2A}^x = 2.2$ meV i $I_{3A}^x = 38.2$ meV), dok je vrednost gega sada procenjena na $\Delta = 1.83$ eV. Na graficima se vidi da teorijska disperzija u svim pravcima ispoljava istovetnu granicu $\Delta - I_{1A}^x - I_{2A}^x - 2I_{3A}^x = 1.7482$ eV kada $k \rightarrow 0$ s obzirom na to da smo upotrebili isti skup parametara.

Teorijske krive na slikama 1.11 i 1.12 nalaze se u uskom opsegu energija, te bi izgledale kao prave linije ukoliko bi se nacrtale u širem energijskom intervalu. Možemo primetiti da je ova činjenica posledica toga da $I_{\alpha A/B}^x/\Delta \rightarrow 0$. U svakom slučaju, bolje poklapanje sa eksperimentalnim podacima potkrepljuje konstataciju da je uticaj Frenkelovih eksitona u odnosu na ostale znatno veći, ali da se i oni mogu uzeti u obzir kako bi poklapanje sa eksperimentalnim podacima bilo još bolje. Osim toga, aproksimacija načinjena prilikom odabira pravca za crtanje teorijskih krivi takođe ima svoj udeo u odstupanju od eksperimentalnih podataka, te bi eventualno sprovođenje računa bez uvođenja opisanih aproksimacija moglo poboljšati poklapanje teorije i eksperimenta. Ne treba izgubiti iz vida ni činjenicu da su svi prikazani rezultati dosad obuhvatali disperziju sistema neinteragujućih eksitona (1.25) i (1.33). Potencijalno uključivanje eksitonskih interakcija u igru moglo bi biti od posebnog značaja za poboljšanje kvaliteta fitova. Trodimenzioni prikaz donje grane eksitonske disperzije u skladu sa merenjima izvršenim na 20 K [26] dat je na slici 1.13.

Isto rasuđivanje i aproksimacije korišćeni su i u slučaju tetracena. Teorijska disperzija nacrtana duž recipročnih pravaca (100) i (010) i upoređena sa eksperimentalnim podacima merenim na 20 K [27] prikazana je na slici 1.14. I u ovom slučaju uočavamo postojanje gornje Davidovljeve grane duž pravca (010), dok se u slučaju pravca (100) ova komponenta ne ističe. Upotrebljen je sledeći skup parametara: $\Delta = 2.405$ eV, $I_{1A}^x = 5.7$ meV, $I_{2A}^x = 0.4$ meV i



Slika 1.13: Trodimenzioni prikaz eksitonske disperzije u pentacenu. Korišćen je sledeći skup parametara: $\Delta = 1.915$ eV, $I_{1A}^x = 3.2$ meV, $I_{2A}^x = 2.2$ meV i $I_{3A}^x = 38.2$ meV.



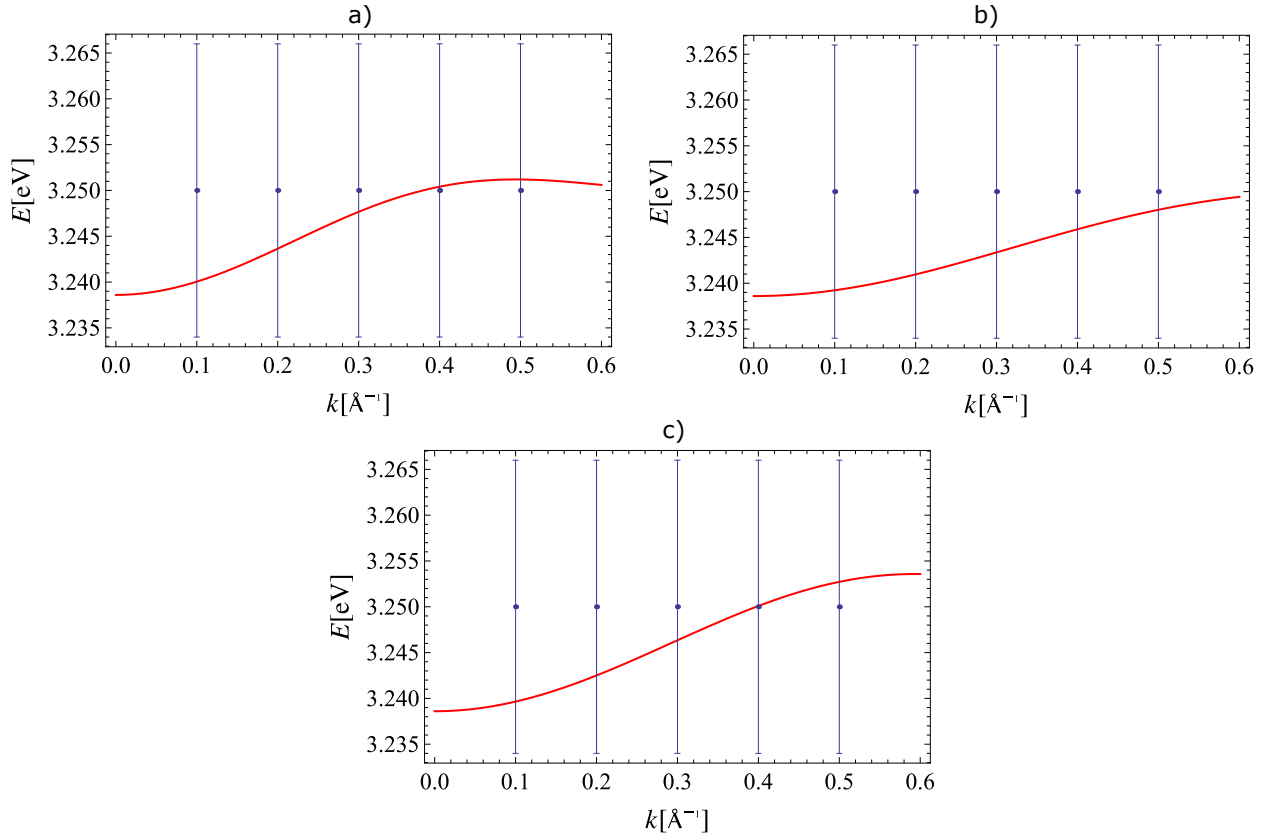
Slika 1.14: Eksitonska disperzija u tetracenu duž dva pravca: a) (100) i b) (010). Eksperimentalni podaci mereni na 20 K preuzeti su iz [27]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 2.405$ eV, $I_{1A}^x = 5.7$ meV, $I_{2A}^x = 0.4$ meV i $I_{3A}^x = 19.8$ meV. Zelenom bojom označena je donja Davidovljeva grana, a ljubičastom gornja.

$I_{3A}^x = 19.8$ meV. Vidimo da i u ovom slučaju teorijska disperzija u svim pravcima ima istu granicu $\Delta - I_{1A}^x - I_{2A}^x - 2I_{3A}^x = 2.3593$ eV kada $k \rightarrow 0$ jer smo upotrebili isti skup parametara. Takođe, poklapanje je zadovoljavajuće, a periodičnost teorije i eksperimenta ista. U blizini $k = 0.8 \text{ \AA}^{-1}$ uočava se veći jaz između eksperimentalnih podataka i teorijskih predviđanja, što se može pripisati slabijoj preciznosti merenja u tom regionu [27]. Osim toga, zaključujemo da je integral izmene I_{3A}^x tetracena otprilike upola manji od vrednosti koju ima pentacenu. S obzirom na to da je ovaj parametar direktno proporcionalan eksitonskoj mobilnosti (na osnovu veze sa parametrom X_{3A} , koji opisuje preskakanje eksitona sa čvora na čvor), koja opada sa povećanjem vrednosti gega Δ , fitovani podaci su konzistentni u slučaju pentacena i tetracena, a ovim metodom možemo proveriti konzistentnost rezultata i za druge aromatične ugljovodonike.

1.2.4 Disperzija neinteragujućih eksitona u picenu i hrizenu

Prethodno izloženi rezultati u slučaju acena (pentacena i tetracena) pokazali su zadovoljavajuće slaganje teorije i dostupnih eksperimentalnih podataka, tako da je sledeći korak primena iste procedure na dve fenacenske strukture - picenu i hrizenu. U skladu sa već izloženim

aproksimacijama i monokliničnom formom fenacena prikazanom na slici 1.2, disperzija neinteragujućih eksitona fitovana je na osnovu merenja izvršenih na 20 K u tri pravca: (100), (010) i (110) [23]. Poređenje teorijske disperzije i dostupnih eksperimentalnih podataka prikazano je na slikama 1.15 (picen) i 1.16 (hrizen). Gornju Davidovljevu granu nije moguće razlučiti od donje ni u jednom posmatranom pravcu [23, 29].

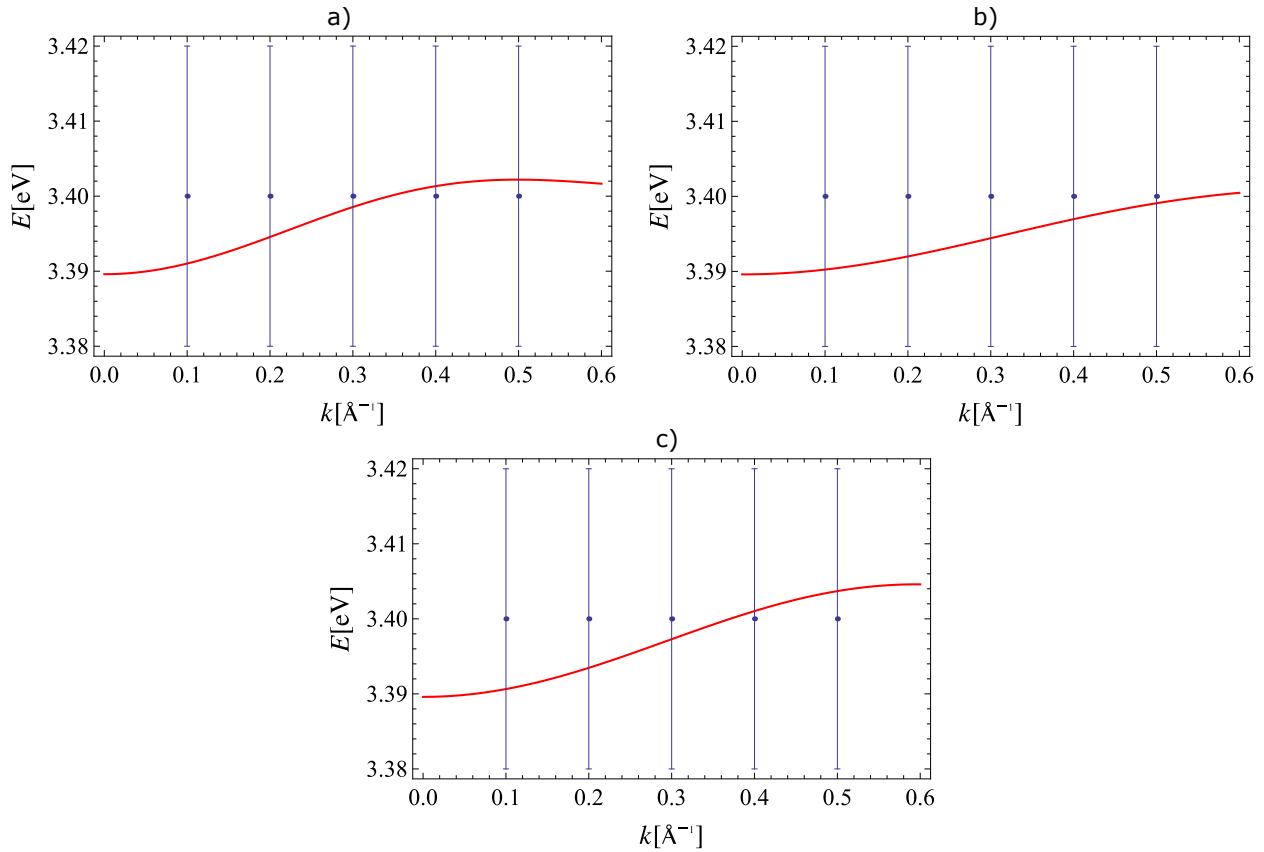


Slika 1.15: Eksitonska disperzija u picenu duž tri pravca: a) (100), b) (010) i c) (110). Eksperimentalni podaci mereni na 20 K preuzeti su iz [23]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 3.249$ eV, $I_{1A}^x = 2.8$ meV, $I_{2A}^x = 2.0$ meV i $I_{3A}^x = 2.8$ meV.

Na osnovu prikaza monokliničnih rešetki picena i hrizena (slika 1.2) i dostupnih podataka o konstantama njihovih rešetki (tabela 1.1), može se zaključiti da su rešetke ova dva aromatična ugljovodonika veoma slične i stoga su zadovoljavajući rezultati u oba slučaja dobijeni korišćenjem istih integrala izmene: $I_{1A}^x = 2.8$ meV, $I_{2A}^x = 2.0$ meV i $I_{3A}^x = 2.8$ meV. Jedina razlika jeste u izboru veličine eksitonskog gema, koja kod picena iznosi $\Delta = 3.249$ eV, dok je kod hrizena ona $\Delta = 3.4$ eV. Teorijske krive nalaze se u opsegu eksperimentalnih grešaka. Vidi se da u slučaju fenacena disperzija ispoljava veću izotropiju. Takođe, može se uočiti da su u slučaju fenacena vrednosti integrala izmene I_{3A}^x mnogo manje od vrednosti koje imaju pentacen i tetracen, ali su istovremeno i vrednosti eksitonskog gema Δ značajno veće, što je konzistentno sa prethodno primećenim odnosom ove dve veličine. Pregled vrednosti ova dva parametra prikazan je u tabeli 1.3 za sva četiri aromatična ugljovodonika.

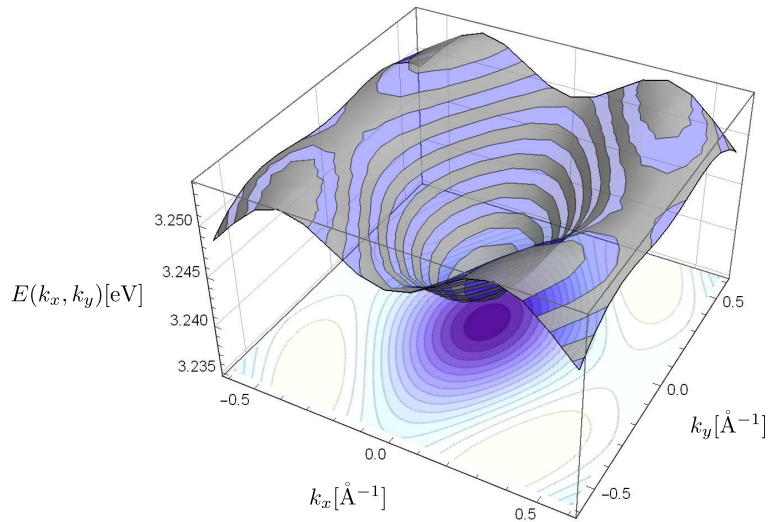
	Δ [eV]	I_{3A}^x [meV]
pentacen	1.915	38.2
tetracen	2.405	19.8
picen	3.249	2.8
hrizen	3.4	2.8

Tabela 1.3: Vrednosti eksitonskog gema Δ i integrala izmene I_{3A}^x za četiri razmatrane ugljovodonične strukture.



Slika 1.16: Eksitonska disperzija u hrizenu duž tri pravca: a) (100), b) (010) i c) (110). Eksperimentalni podaci mereni na 20 K preuzeti su iz [23]. Teorijska kriva podrazumeva sledeći skup parametara: $\Delta = 3.4$ eV, $I_{1A}^x = 2.8$ meV, $I_{2A}^x = 2.0$ meV i $I_{3A}^x = 2.8$ meV.

I u ovom slučaju moguće je nacrtati trodimenzioni prikaz eksitonske disperzije fenacena dobijene fitovanjem na osnovu podataka izmerenih na 20 K. Na slici 1.17 nalazi se primer trodimenzionog prikaza eksitonske disperzije u picenu.



Slika 1.17: Trodimenzioni prikaz eksitonske disperzije u picenu. Korišćen je sledeći skup parametara: $\Delta = 3.249$ eV, $I_{1A}^x = 2.8$ meV, $I_{2A}^x = 2.0$ meV i $I_{3A}^x = 2.8$ meV.

1.3 Uticaj eksiton-eksiton interkcija na disperzioni zakon

U prethodnim poglavljima predstavljen je model neinteragujućih Frenkelovih eksitona, koji daje disperzioni zakon zadovoljavajuće uklopljen u postojeće eksperimentalne podatke za četiri različita aromatična ugljovodonika. Naglašeno je da su prilikom definisanja pravca merenja u recipročnoj ravni rešetki ovih molekula načinjene izvesne aproksimacije, kao i da je uticaj temperature u potpunosti izražen kroz promenu vrednosti eksitonskog gema Δ , što je uočeno prilikom upoređivanja rezultata na dve različite temperature u slučaju rešetke pentacena. Takođe, prikazane teorijske krive, bazirane na strogo frenkelovskoj eksitonskoj slici, bile su u dobrom slaganju sa eksperimentalnim podacima, te su se u nekim pravcima skoro u potpunosti utapale u raspon eksperimentalnih grešaka, ali je sugerisano da bi uplitanje dodatnih ekscitacija (poput CT eksitona) moglo dovesti do boljeg slaganja sa eksperimentalnim podacima. Međutim, s obzirom na to da je dosadašnje razmatranje bilo čisto neinteragujuće prirode, postoji i opravdana sumnja da bi sklad između teorije i eksperimenta bio pospešen obuhvatanjem eksiton-eksiton interakcija. Nastavak prvog poglavlja biće posvećen upravo razmatranju značaja ovih interakcija u strukturama organskih molekula.

Kako je u prethodnim segmentima doktorata celokupan račun baziran na prezentovanoj dualnosti između eksitonskog (1.2) i Hajzenbergovog hamiltonijana (1.6), u ovom kontekstu bićemo u mogućnosti da iskoristimo skup alata trenutno dostupnih za izučavanje spinskih modela. Ovakvim pristupom vrata su otvorena brojnim načinima za uključivanje magnon-magnon interakcija, koje se praktično preslikavaju na željene eksiton-eksiton uticaje. Standardni putevi baziraju se na izražavanju lokalizovanih spinskih operatora pomoću bozonskih operatora direktno u Hajzenbergovom hamiltonijanu, što i jeste princip kojim smo se vodili prilikom traženja izraza za disperziju neinteragujućih eksitona na osnovu Blohove aproksimacije. Međutim, kako ova aproksimacija ne uključuje članove koji ukazuju na magnon-magnon interakciju, neophodno je teoriju bazirati na nekoj bozonskoj reprezentaciji spinskih operatora, poput Holštajn-Primakovljeve (*Holstein-Primakoff approximation*) [51, 58, 65], koja bi dala članove višeg reda u odnosu na prethodno uočene $B^\dagger B$. Glavni problem ovakvog pristupa, kao i drugih aproksimativnih metoda, poput aproksimacije srednjeg polja [66], jeste taj što bilo kakvo uproščavanje egzaktnih izraza suštinski menja prirodu polaznih operatora, što je u ovom maniru teško iskontrolisati [56, 57]. Drugim rečima, priroda spinskih operatora u polaznom hamiltonijanu (S^\pm i S^z operatora) u potpunosti se održava samo u formi egzaktne reprezentacije, što uostalom lako primećujemo na osnovu njihovih komutacionih relacija.

Sa druge strane, polazeći od eksitonskog hamiltonijana (1.2), moglo bi se postaviti pitanje u čemu je svrha prelaska na spinski hamiltonijan (1.6) ako se na bozonske operatore može preći direktno na osnovu neke njihove reprezentacije Paulijevih operatora, poput Agranovič-Tošićeve (*Agranovich-Tošić representation*) [67]. Naime, jasno je da paulionski hamiltonijan (1.2) već sadrži članove četvrtog reda, što svedoči da, osim što skriveni deo eksiton-eksiton interakcije potiče od komutacionih relacija Paulijevih operatora i pripadnog Hilbertovog prostora, postoji i istaknuta interakcija u okviru samog hamiltonijana. Ovog člana četvrtog reda nema u spinskom hamiltonijanu (1.6), ali i dalje ostaju preostali izvori interakcija. Ispostavlja se da metoda efektivne teorije polja bazirana na efektivnim lagranžijanima, koja je u [54, 56, 57, 68] razvijena za Hajzenbergove feromagnetne sa $O(3)$ simetrijom, direktno rešava sve prethodno spomenute probleme. Prvo je potrebno napomenuti da nema potrebe za uvođenjem ikakve bozonske reprezentacije spinskih operatora, pa ni Paulijevih operatora, pošto ovaj metod koristi fizičke stepene slobode, odnosno magnone [56, 57]. Dakle, u efektivnom lagranžijanu uskladišteni su i sami magnoni (odnosno, u terminologiji realnog problema koji posmatramo, eksitoni), kao i njihove međusobne interakcije (odnosno eksiton-eksiton interakcije), te je proces "odsecanja" viših članova popravke moguće kontrolisati. Osim toga, slabost magnon-magnon (tj. eksiton-eksiton) interakcija u okviru ovog pristupa biće očigledna iz oblika hamiltonijana

dobijenog kanonskom kvantizacijom efektivnog lagranžijana [56,57], te je i perturbativni razvoj u skladu sa formalizmom Fajnmanovih dijagrama (*Feynman diagrams*) omogućen, a perturbativna teorija konzistentno definisana i za $S = 1/2$.

1.3.1 Simetrija Hajzenbergovog feromagnetnog hamiltonijana

Metod efektivnih lagranžijana koji će u nastavku biti korišćen zasniva se na polaznoj pretpostavci da su jedine bezmasene čestice u spektru Goldstonovi bozoni (*Goldstone bosons*), odnosno Nambu-Goldstonovi bozoni (*Nambu-Goldstone bosons*) [69–71], koji se pojavljuju u modelima sa spontanom narušenjem simetrije. Osim toga, metod je primenljiv i za tretiranje sistema koji poseduju eksplicitno narušenje simetrije [57,68,72], što je u našem slučaju okarakterisano anizotropijom i prisustvom člana sa magnetnim poljem u hamiltonijanu (1.6), koji vrše preferenciju z -pravca. Stoga ćemo se najpre osvrnuti na osnovne odlike izotropnog Hajzenbergovog feromagnetnog hamiltonijana bez uticaja magnetnog polja:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{n, n+\lambda} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+\lambda}, \quad (1.35)$$

gde je $J > 0$ izotropni integral izmene, a λ vektor koji spaja najbliže susede⁵. Može se uočiti da je hamiltonijan invarijantan na $O(3)$ grupu rotacija svih spinskih operatora. Drugim rečima, ovaj hamiltonijan poseduje $O(3)$ kontinualnu globalnu simetriju [72]. U skladu sa Emi Neterinom (*Emmy Noether*) teoremom [72,73], postoje tri generatora rotacije, koji su u ovom slučaju komponente spinskih operatora S^x , S^y i S^z , za koje važe komutacione relacije⁶ ⁷:

$$[S^i, S^j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} S^k, \quad (1.36)$$

a očuvana veličina je operator ukupnog spina $\mathbf{S} = \sum_n \mathbf{S}_n$, koji komutira sa datim hamiltonijanom:

$$[\mathbf{S}, H] = 0. \quad (1.37)$$

U ovom slučaju, operator koji implementira $O(3)$ rotacije na dinamičke stepene slobode i stanja dat je u obliku [72]:

$$U(\boldsymbol{\theta}) = e^{-i\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{S}}. \quad (1.38)$$

Kako je poznato da je osnovno stanje feromagnetna stanje sa svim spinovima usmerenim u jednom pravcu, po konvenciji obično baš ka pozitivnom smeru z -ose, takozvanom *up* pravcu [72]:

$$|0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle = |S, S^z = S\rangle \otimes |S, S\rangle \otimes |S, S\rangle \otimes \dots \otimes |S, S\rangle, \quad (1.39)$$

očito je da je ovo stanje invarijantno samo u odnosu na rotacije oko z -ose, odnosno da se prilikom rotacije oko x ili y -ose generiše novo osnovno stanje, ortogonalno na ranije definisano *up* stanje [74]. Dakle, spontano su narušeni generatori rotacije S^x i S^y i kontinualna simetrija $O(3)$ je narušena na simetriju $O(2)$ tipa.

Sa druge strane, poznato je da Goldstonova teorema definiše broj realnih Goldstonovih polja, odnosno bezmasenih Goldstonovih čestica koje se uočavaju u spektru, na osnovu principa spontanog narušenja simetrije. Naime, ako je hamiltonijan invarijantan u odnosu na transformacije

⁵Moguće je proširenje i na dalje susede, sa novim integralima izmene.

⁶ ε_{ijk} je Levi-Čivita (totalno antisimetrični) simbol u 3 dimenzije, koji se definiše na sledeći način:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{u slučaju kada je } (i, j, k) \text{ parna permutacija od } (x, y, z), \\ -1, & \text{u slučaju kada je } (i, j, k) \text{ neparna permutacija od } (x, y, z) \text{ i} \\ 0, & \text{u ostalim slučajevima.} \end{cases}$$

⁷U doktorskoj disertaciji uzimamo uprošćenje $\hbar = 1$.

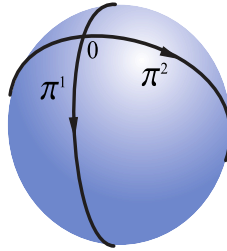
koje generišu elementi grupe G , a osnovno stanje samo u odnosu na transformacije generisane elementima grupe H , koja je podgrupa grupe G ($H \subset G$), onda je broj realnih Goldstonovih polja N_{GB} jednak broju spontano narušenih generatora rotacije [56, 72, 75]:

$$N_{GB} = d_G - d_H, \quad (1.40)$$

gde je d_G broj generatora simetrije grupe G , a d_H broj generatora simetrije grupe H . Kako je u našem slučaju $G = O(3)$, $H = O(2)$ i $d_G - d_H = 3 - 1 = 2$, očekuje se postojanje dva realna Goldstonova polja i pojava dva Goldstonova bezmasena bozona u spektru feromagnetika. Međutim, to nije slučaj. U spektru feromagnetika, zbog činjenice da je $\langle S^z \rangle|_{T=0} \neq 0$, dolazi do pojave samo jednog Goldstonovog bozona, magnona, koji poseduje nerelativističku disperziju $\sim \mathbf{k}^2$, te jedno kompleksno polje $\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\Sigma/2}(\pi^1(\mathbf{x}) + i\pi^2(\mathbf{x}))$ (gde su $\pi^1(\mathbf{x})$ i $\pi^2(\mathbf{x})$ dva realna Goldstonova polja, a $\Sigma = NS/V$ spontana magnetizacija u jedinici zapremine na $T = 0$ K) opisuje magnon [56, 57, 68, 72]. Dakle, efektivni lagranžijan najpre će biti napisan na osnovu Goldstonovih polja $\pi^1(\mathbf{x})$ i $\pi^2(\mathbf{x})$, a onda ćemo preći na prostor kompleksnih polja $\psi(\mathbf{x})$.

1.3.2 Efektivni lagranžijan i hamiltonijan feromagnetita u spoljašnjem magnetnom polju

U skladu sa prethodno izloženom teorijom prema kojoj se magnoni tretiraju kao Goldstonovi bozoni nastali usled spontanog narušenja simetrije $O(3) \rightarrow O(2)$, magnone možemo posmatrati kao lokalne koordinate na sferi $O(3)/O(2) = S^2$ [57]. Ilustrativni prikaz ove situacije nalazi se na slici 1.18.



Slika 1.18: Magnoni se u efektivnoj teoriji polja posmatraju kao skup lokalnih koordinata na sferi $O(3)/O(2) = S^2$. Slika je preuzeta iz [56].

Polazni oblik klasičnog efektivnog lagranžijana Hajzenbergovog feromagnetita u spoljašnjem magnetnom polju dat je izrazom [56, 57, 68, 72]:

$$\mathcal{L}_{\text{eff}} = \Sigma \frac{\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1}{1 + U^3} - \frac{F^2}{2} \sum_{\alpha, i} \partial_\alpha U^i \partial_\alpha U^i + \Sigma \widetilde{\mu} \mathcal{H} U^3, \quad (1.41)$$

gde su dve komponente jediničnog vektorskog polja $\mathbf{U}(\mathbf{x}) = [\pi^1(\mathbf{x}), \pi^2(\mathbf{x}), U^3(\mathbf{x})]^T$ upravo realna Goldstonova polja $\pi^1(\mathbf{x})$ i $\pi^2(\mathbf{x})$. Nadalje zavisnosti π^1 , π^2 i ψ od prostornih koordinata x_i na mestima gde je to suvišno nećemo pisati, ali ćemo ih podrazumevati. Spontana magnetizacija u jedinici zapremine na $T = 0$ K već je data u formi $\Sigma = NS/V$, F^2 je konstanta koju ćemo kasnije definisati u skladu sa našim Hajzenbergovim XXZ hamiltonijanom u magnetnom polju (1.6), a magnetno polje $\widetilde{\mu} \mathcal{H}$ napisano je baš u ovoj formi jer u opštem slučaju nije istovetno polju $\mu \mathcal{H}$ iz (1.6). Vidimo da ovaj lagranžijan sadrži član linearan po vremenskim izvodima, takozvani Ves-Zumino-Vitenov (*Wess-Zumino-Witten*) član, koji je odgovoran za nerelativističku disperziju magnona $\sim \mathbf{k}^2$ [56, 57, 68, 72]. Osim toga, kako je \mathbf{U} jedinično polje, veza između Goldstonovih polja i komponente U^3 data je relacijom $U^3 = \sqrt{1 - \boldsymbol{\pi}^2}$.

Zamenom $U^3 = \sqrt{1 - \boldsymbol{\pi}^2} = 1 - \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2} - \frac{\boldsymbol{\pi}^4}{8} - \frac{\boldsymbol{\pi}^6}{16} - \frac{5\boldsymbol{\pi}^8}{128} + \dots$ dolazimo do slobodnog dela lagranžijana, u čijem izrazu figurišu članovi sa po maksimalno dva Goldstonova polja (videti

prilog A.1):

$$\mathcal{L}_{\text{free}} = \frac{\Sigma}{2} (\partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1) + \frac{F^2}{2} \boldsymbol{\pi} \nabla^2 \boldsymbol{\pi} - \frac{1}{2} \Sigma \widetilde{\mu} \mathcal{H} \boldsymbol{\pi}^2, \quad (1.42)$$

gde je laplasijan dat kao $\nabla^2 = \sum_{\alpha} \partial_{\alpha} \partial_{\alpha}$, i interakcionog dela lagranžijana, u kom smo odbacili članove koji sadrže više od četiri Goldstonova polja, što je dovoljno za računanje popravke prvog reda:

$$\mathcal{L}_{\text{int}} \approx \frac{F^2}{8} \boldsymbol{\pi}^2 \nabla^2 \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{F^2}{8} \boldsymbol{\pi}^2 \boldsymbol{\pi} \cdot \nabla^2 \boldsymbol{\pi}. \quad (1.43)$$

Ovom prilikom je za eliminaciju vremenskih izvoda iz interakcionog dela korišćena Landau-Lifšicova jednačina kretanja (*Landau-Lifshitz equation*) [56, 72]:

$$\partial_t U^a + \frac{F^2}{\Sigma} \sum_{i,j} \varepsilon_{aij} (\nabla^2 U^i) U^j = 0. \quad (1.44)$$

Da bismo izvršili kanonsku kvantizaciju i dobili hamiltonijan koji je neophodan za dalji perturbativni račun, najpre moramo preći na kompleksna polja i uočiti da će svi doprinosi $\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi}$ tipa konačno preći u doprinose srazmerne $\psi^{\dagger} \psi$. Konstanta srazmernosti biće $2/\Sigma$, u skladu sa definicijom kompleksnog polja fizičkog magnona:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\Sigma}{2}} (\pi^1(\mathbf{x}) + i\pi^2(\mathbf{x})). \quad (1.45)$$

Ves-Zumino-Vitenov član se može podesno zapisati u formi:

$$\mathcal{L}_{\text{WZW}} = \frac{2i\psi^{\dagger} \partial_t \psi}{1 + U^3}, \quad (1.46)$$

gde je $U^3 = \sqrt{1 - 2/\Sigma \psi^{\dagger} \psi}$. Kako su pomoću jednačine kretanja (1.44) eliminisani vremenski izvodi iz interakcionog dela, očito je da nam je za dalji pristup problemu neophodan baš neinteragujući kanonski impuls, odnosno:

$$\Pi(\mathbf{x}) = i\psi^{\dagger}(\mathbf{x}). \quad (1.47)$$

Sada možemo uočiti da kanonske komutacione relacije:

$$[\psi(\mathbf{x}), \Pi(\mathbf{y})] = [\psi(\mathbf{x}), i\psi^{\dagger}(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.48)$$

više ne "skrivaju" deo interakcije u sebi i celokupna magnon-magnon (odnosno eksiton-eksiton) interakcija biće eksplicitno data samo interakcionim delom hamiltonijana, što je od početka i bio cilj.

Konačni oblik hamiltonijana lako nalazimo na osnovu prethodno definisanog efektivnog lagranžijana ($\mathcal{L}_{\text{eff}} = \mathcal{L}_{\text{free}} + \mathcal{L}_{\text{int}}$) [73]:

$$H_{\text{eff}} = v_0 \sum_{\mathbf{x}} (\Pi(\mathbf{x}) \partial_t \psi(\mathbf{x}) - \mathcal{L}_{\text{eff}}(\mathbf{x})) \quad (1.49)$$

u formi:

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{free}} + H_{\text{int}}, \quad (1.50)$$

gde je slobodni deo:

$$H_{\text{free}} = -\frac{v_0}{2m_0} \sum_{\mathbf{x}} \psi^{\dagger} \nabla^2 \psi + \widetilde{\mu} \mathcal{H} v_0 \sum_{\mathbf{x}} \psi^{\dagger} \psi, \quad m_0 = \frac{\Sigma}{2F^2}, \quad (1.51)$$

i interakcioni deo:

$$H_{\text{int}} \approx H_4^{(a)} + H_4^{(b)}, \quad (1.52)$$

sa formama:

$$H_4^{(a)} = \frac{F^2 v_0}{2\Sigma^2} \sum_{\mathbf{x}} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) \quad (1.53)$$

i:

$$H_4^{(b)} = -\frac{F^2 v_0}{2\Sigma^2} \sum_{\mathbf{x}} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \nabla^2 (\psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})). \quad (1.54)$$

Možemo uočiti da smo umesto integraljenja po kontinualnim varijablama prešli na sumiranje po diskretnim varijablama \mathbf{x} , koje odgovaraju čvorovima rešetke. Osim toga, u relacijama je v_0 , odnosno zapremina elementarne ćelije, uključena usled toga što će generalno prelaskom na kontinualni impulsni prostor i integracijom po impulsnim koordinatama konstanta $1/v_0$ izaći ispred integrala. Na ovaj način eliminišemo budući dimenzioni faktor zapremine koji bi se našao ispred izračunatih dijagramskih popravki.

Iako je ovde ispisan samo prvi član perturbativne popravke (1.52), interakcioni doprinosi će u opštem slučaju biti razdvojeni na (a) deo, koji potiče od Ves-Zumino-Vitenovog člana, a dobijen je na osnovu jednačine kretanja (1.44), i (b) deo, koji potiče od drugog člana lagranžijana (1.41). U teoriji rešetki slobodna magnetizacija je data izrazom $\Sigma = S/v_0$, te ćemo praktično u konačnom perturbativnom računu imati razvoj po $1/S$. Kako je nadalje neophodno svaki član izraza prilagoditi strukturi rešetke, na osnovu opšteg izraza za laplasijan na rešetki [56, 57, 72, 76]:

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{x}) = \frac{2D}{z_1 |\boldsymbol{\lambda}|^2} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}\}} (\phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda}) - \phi(\mathbf{x})), \quad (1.55)$$

uvodimo i svojstvene vrednosti laplasijana, tj. $-\hat{\mathbf{k}}^2$, u formi [56, 57, 72]:

$$\nabla^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{k}}^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \hat{\mathbf{k}}^2 = \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}|^2} (1 - \gamma(\mathbf{k})), \quad (1.56)$$

gde vektor $\boldsymbol{\lambda}$ u ovom kontekstu spaja z_1 najbližih suseda, a:

$$\gamma(\mathbf{k}) = z_1^{-1} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}\}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\lambda}} \quad (1.57)$$

su prethodno definisani geometrijski faktori. Očigledno je da su interakcije između magnona, na osnovu interakcionog dela hamiltonijana (1.52), derivativne prirode, te je jasno da ćemo u perturbativnom razvoju imati članove raznih stepena impulsa. Stoga je slabost magnon-magnon (odnosno eksiton-eksiton) interakcija pri malim vrednostima impulsa razumljiva, a razvoj u skladu sa formalizmom Fajnmanovih dijagrama opravdan i za $S = 1/2$.

1.3.3 Poređenje disperzije neinteragujućih eksitona i disperzije slobodnog hamiltonijana magnonskih polja

Pre nego što se posvetimo računanju prve popravke disperzije, neophodno je prilagoditi disperziju slobodnog hamiltonijana Hajzenbergovog feromagneta (1.51) našoj disperziji neinteragujućih eksitona (1.25). Najpre laplasijan ∇^2 treba prilagoditi rešetki struktura sa slike 1.2. Pošto imamo tri tipa suseda, slobodni deo hamiltonijana (1.51) redefinisaćemo na sledeći način:

$$H_{\text{free}} = -\frac{v_0}{2m_0} \sum_{\mathbf{x}} \psi^\dagger(\mathbf{x}) D^2 \psi(\mathbf{x}) + \widetilde{\mu} \mathcal{H} v_0 \sum_{\mathbf{x}} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}), \quad m_0 = \frac{\Sigma}{2F^2}, \quad (1.58)$$

gde je diskretni laplasijan sad dat izrazom:

$$D^2 = A \nabla_1^2 + B \nabla_2^2 + \nabla_3^2. \quad (1.59)$$

Indeksima 1, 2 i 3 označena je vrsta suseda na koju delujemo, a A i B su konstante koje još treba da odredimo. Svojstvene vrednosti diskretnih laplasijana (1.56) zavisice od vrste suseda, pa tako sledi da je u slučaju prve vrste suseda:

$$\nabla_1^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = -\widehat{\mathbf{k}}_1^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \widehat{\mathbf{k}}_1^2 = \frac{4}{|\boldsymbol{\lambda}_1|^2} (1 - \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})), \quad (1.60)$$

dok za drugi tip suseda važi:

$$\nabla_2^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = -\widehat{\mathbf{k}}_2^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \widehat{\mathbf{k}}_2^2 = \frac{4}{|\boldsymbol{\lambda}_2|^2} (1 - \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b})), \quad (1.61)$$

a za treći:

$$\nabla_3^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = -\widehat{\mathbf{k}}_3^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \widehat{\mathbf{k}}_3^2 = \frac{4}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2} \left(1 - \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}{2}\right) \right), \quad (1.62)$$

pri čemu smo inkorporirali osobine rešetke sa slike 1.2: $D = 2$, $\boldsymbol{\lambda}_1 = \{-\mathbf{a}, \mathbf{a}\}$, $\boldsymbol{\lambda}_2 = \{-\mathbf{b}, \mathbf{b}\}$, kao i $\boldsymbol{\lambda}_3 = \{\frac{\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}, \frac{-\mathbf{a}+\mathbf{b}}{2}, \frac{\mathbf{a}-\mathbf{b}}{2}, \frac{-\mathbf{a}-\mathbf{b}}{2}\}$, odnosno podrazumevamo $|\boldsymbol{\lambda}_1|^2 = a^2$, $|\boldsymbol{\lambda}_2|^2 = b^2$ i $|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 = \frac{a^2+b^2}{4}$. Dakle, slobodnom delu hamiltonijana (1.51) odgovara sledeća disperzija:

$$E(\mathbf{k}) = \widetilde{\mu\mathcal{H}} + \frac{2}{m_0} \left[\frac{A}{|\boldsymbol{\lambda}_1|^2} (1 - \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})) + \frac{B}{|\boldsymbol{\lambda}_2|^2} (1 - \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b})) + \frac{1}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2} \left(1 - \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}{2}\right) \right) \right]. \quad (1.63)$$

Jednostavnim poređenjem sa relacijom za disperziju neinteragujućih eksitona (1.25) uočavamo da su parametri dati relacijama:

$$m_0 = \frac{1}{I_3^x |\boldsymbol{\lambda}_3|^2}, \quad A = \frac{1}{2} \frac{|\boldsymbol{\lambda}_1|^2 I_1^x}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 I_3^x}, \quad B = \frac{1}{2} \frac{|\boldsymbol{\lambda}_2|^2 I_2^x}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 I_3^x}, \quad \widetilde{\mu\mathcal{H}} = \mu\mathcal{H} + I_1^z + I_2^z + 2I_3^z - I_1^x - I_2^x - 2I_3^x. \quad (1.64)$$

Relacija (1.63) je, uz ovako definisane parametre, u potpunosti analogna disperziji neinteragujućih eksitona. Drugačije je možemo napisati u formi:

$$E(\mathbf{k}) = \Delta' + \frac{\widehat{\mathbf{k}}^2}{2m_0}, \quad (1.65)$$

gde je eksitonski gep samo redefinisani:

$$\Delta' = \widetilde{\mu\mathcal{H}} = \mu\mathcal{H} + I_1^z + I_2^z + 2I_3^z - I_1^x - I_2^x - 2I_3^x, \quad (1.66)$$

a $\widehat{\mathbf{k}}^2$ dato relacijom:

$$\widehat{\mathbf{k}}^2 = \widehat{\mathbf{k}}_3^2 + \frac{1}{2} \frac{|\boldsymbol{\lambda}_1|^2 I_1^x}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 I_3^x} \widehat{\mathbf{k}}_1^2 + \frac{1}{2} \frac{|\boldsymbol{\lambda}_2|^2 I_2^x}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 I_3^x} \widehat{\mathbf{k}}_2^2. \quad (1.67)$$

Sada kada je svojstvena vrednost diskretnog laplasijana rešetke sa slike 1.2 definisana, možemo prionuti na računanje prve perturbacije. Naime, polazna tačka perturbativnog razvoja jeste Grinova funkcija interagujućeg Šredingerovog polja [57, 72]:

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \tau_x - \tau_y) = \frac{\langle \text{T}\{\psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)U(\beta)\} \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \quad (1.68)$$

gde $\langle \dots \rangle_0$ podrazumeva usrednjavanje po osnovnom stanju neinteragujućeg hamiltonijana H_{free} , $\text{T}\{\dots\}$ vremenski uređen poredak polja, a $U(\beta) = \frac{1}{\beta} e^{-\int_0^\beta d\tau H_{\text{int}}(\tau)}$. Razvijanjem eksponencijala u imeniocu i brojiocu, kao i razvojem novonastalog reda u imeniocu po obrascu $(1-x)^{-1} = 1+x+$

$x^2 + \dots$, te postupanjem u skladu sa Vikovom teoremom (*Wick's theorem*)⁸, stižemo do toga da konačno svaki član datog izraza možemo predstaviti određenim tipom Fajnmanovih dijagrama i primeniti pravila prilagođena formi interakcije (1.52). S obzirom na to da se usrednjavanje vrši po osnovnom stanju neinteragujućeg hamiltonijana, kontrakcije neće sadržavati članove tipa $\langle \psi^\dagger \psi^\dagger \rangle_0$ i $\langle \psi \psi \rangle_0$ jer je njihov doprinos jednak nuli.

1.3.4 Uticaj eksiton-eksiton interakcija na disperziju pentacena

Perturbativni razvoj Grinove funkcije biće ilustrativno prikazan Fajnmanovim dijagramima, koji će biti striktno prilagođeni obliku interakcije (1.52) u skladu sa [56,57]. Kao i u uobičajenoj terminologiji Fajnmanovih dijagrama [73, 77–79], kontrakcije nazivamo propagatorima i na dijagramima ih predstavljamo linijama kojima pripajamo početnu i krajnju poziciju i vreme u koordinatno-vremenskom, odnosno impuls i frekvenciju u impulsno-energijskom prostoru. U radu su oznake izvršene u skladu sa impulsnim prostorom, a frekvencije na dijagramima nisu obeležene, ali se podrazumevaju. Svaka petlja sadrži unutrašnje koordinate i vremena, odnosno impuls i frekvenciju, po kojima se vrši integracija/sumiranje. Svaki verteks sadrži oznaku u skladu sa interakcionim članom od kog potiče ($4(a)$, $4(b)$), a dejstvo laplasijana na odabrani propagator obojeno je narandžastom bojom. S obzirom na to da smo se zaustavili na prvim članovima eksiton-eksiton interakcije, imamo sve što nam je neophodno za računanje prve popravke, koja obuhvata svega jednu petlju i jedan verteks.

Da bismo došli do korektnog izraza za prvu popravku, polazimo od sledećih dijagrama, koji odgovaraju prvom članu interakcije $H_{\text{int}}^{(a)}$:

$$\text{Diagram with vertex } 4(a) = \text{Diagram with orange arrow on bottom line} + \text{Diagram with orange arrow on top line} \quad (1.69)$$

i drugom članu $H_{\text{int}}^{(b)}$:

$$\text{Diagram with vertex } 4(b) = \text{Diagram with orange arrows on both lines} + \text{Diagram with orange arrows on both lines} \quad (1.70)$$

Vidimo da laplasijan člana obeleženog sa $4(a)$ deluje na jedan propagator, dok laplasijan člana $4(b)$ deluje na dva. Osim toga, možemo uočiti da su iz izraza (1.70) izostavljeni članovi kod kojih laplasijan deluje samo na spoljašnje propagatore, takozvane nožice, kao i samo na propagatore koji zatvaraju petlju. Ovi članovi iščezavaju u konačnom izrazu i stoga ne figurišu u (1.70).

Polazna tačka jeste pripisivanje izraza za eksitonski propagator u Macubarinom formalizmu svakoj propagatorskoj liniji⁹:

$$D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle T\{\psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)\} \rangle_0 = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{q}} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y}) - i\omega_n(\tau_x - \tau_y)}}{E(\mathbf{q}) - i\omega_n}, \quad (1.71)$$

⁸Vikova teorema izražava usrednjen vremenski uređen proizvod polja kao sumu svih članova u kojima imamo samo kontrakovana polja [73, 77–79]. Ukoliko su U, V, W, \dots, X, Y, Z data polja, to znači da možemo pisati:

$$\langle 0|T\{UVW\dots XYZ\}|0\rangle = \overbrace{UVW\dots XYZ} + \overbrace{UVW\dots XYZ} + \overbrace{UVW\dots XYZ} + \dots$$

pri čemu su svi članovi izraza sparni sa jednim od preostalih članova.

⁹U rešetki se integracija

$$\int_{\mathbf{q}} \rightarrow \int_{\text{IBZ}} \frac{d^D \mathbf{q}}{(2\pi)^D}$$

sprovodi po prvoj Brilluenovoj zoni, odnosno $\{-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{b} \leq k_y \leq \frac{\pi}{b}\}$.

gde je $E(\mathbf{q})$ disperzija neinteragujućih eksitona, a $\omega_n = 2\pi n\beta^{-1}$ Macubarina frekvencija. Prvi dijagram (1.69) srazmeran je sledećem izrazu:

$$-\frac{1}{2S} \frac{v_0}{2m_0} v_0 \sum_{\mathbf{z}} \int_0^\beta d\tau_z \langle \psi(\mathbf{x}, \tau_x) \psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z) \psi(\mathbf{z}, \tau_z) \psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z) \nabla_{\mathbf{z}}^2 \psi(\mathbf{z}, \tau_z) \psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y) \rangle_0. \quad (1.72)$$

Uočimo da je izvršena zamena $\Sigma = S/v_0$ i da je kontrakciju koja bi odgovarala prvom dijagramu (1.69) moguće izvršiti na dva načina:

$$\overbrace{\psi(\mathbf{x}, \tau_x) \psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)} \overbrace{\psi(\mathbf{z}, \tau_z) \psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)} \overbrace{\nabla_{\mathbf{z}}^2 \psi(\mathbf{z}, \tau_z) \psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)} \quad (1.73)$$

i:

$$\overbrace{\psi(\mathbf{x}, \tau_x) \psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z) \psi(\mathbf{z}, \tau_z) \psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)} \overbrace{\nabla_{\mathbf{z}}^2 \psi(\mathbf{z}, \tau_z) \psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)}. \quad (1.74)$$

Oba člana daju identičan doprinos konačnom izrazu, te time eliminišu faktor 1/2. Potrebno je naglasiti da tretiramo polja za koja važe komutacione relacije (1.48), te nemamo problema sa promenom znaka prilikom kontrakovanja. Minus u izrazu potiče od razvoja eksponencijala unutar Grinove funkcije i generalno će se naći u svim dijagramima sa jednim verteksom, a sistematična predstava ove situacije može se videti u [78].

Sada možemo raspisati izraz (1.72):

$$-\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} v_0 \sum_{\mathbf{z}} \int_0^\beta d\tau_z D(\mathbf{x} - \mathbf{z}, \tau_x - \tau_z) D(0) \nabla_{\mathbf{z}}^2 D(\mathbf{z} - \mathbf{y}, \tau_z - \tau_y). \quad (1.75)$$

Prvi korak je prelazak na prostor impulsa i frekvencija, pri čemu ćemo koristiti sledeće izraze za δ -funkcije¹⁰:

$$\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} = v_0 \sum_{\mathbf{x}} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}}, \quad \delta_{\omega_m, \omega_n} = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau_x e^{-i(\omega_m - \omega_n)\tau_x}. \quad (1.76)$$

Dakle, imamo sledeću formu:

$$\frac{v_0}{\beta^3} \sum_{\mathbf{z}, \omega_m, \omega_n, \omega_o} \int_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_z D(\mathbf{k}, \omega_m) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{z}) - i\omega_m(\tau_x - \tau_z)} D(\mathbf{p}, \omega_n) (-\hat{\mathbf{q}}^2) D(\mathbf{q}, \omega_o) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{z}-\mathbf{y}) - i\omega_o(\tau_z - \tau_y)} \quad (1.77)$$

i nakon kraćeg sređivanja dolazimo do:

$$-\frac{1}{\beta^2} \sum_{\omega_m, \omega_n} \int_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \hat{\mathbf{k}}^2 D^2(\mathbf{k}, \omega_m) D(\mathbf{p}, \omega_n) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y}) - i\omega_m(\tau_x - \tau_y)}, \quad (1.78)$$

što znači da razmatranom dijagramu odgovara sledeća popravka Grinove funkcije u prostoru impulsa i frekvencija:

$$\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \hat{\mathbf{k}}^2 D^2(\mathbf{k}, \omega_m) \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbf{p}} D(\mathbf{p}, \omega_n), \quad D(\mathbf{p}, \omega_n) = \frac{1}{E(\mathbf{p}) - i\omega_n}. \quad (1.79)$$

Međutim, nas ne interesuje popravka Grinove funkcije nego renormalizacija eksitonske disperzije, tako da ćemo "odseći" spoljašnje propagatore, odnosno nožice, i uočiti da suma $\beta^{-1} \sum_{\omega_n} (E(\mathbf{p}) - i\omega_n)^{-1}$ daje Boze raspodelu slobodnih eksitona $\langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 = (e^{E(\mathbf{p})\beta} - 1)^{-1}$ [79]. Dakle, prvi dijagram popravke 4(a) ima doprinos:

$$\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \hat{\mathbf{k}}^2 \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0. \quad (1.80)$$

¹⁰Drugačije definisanje δ -funkcije u odnosu na predašnju upotrebu, prilikom izvođenja izraza za disperziju neinteragujućih eksitona pomoću bozonskih operatora, deo je prilagođavanja formalizmu efektivne teorije polja.

Zarad uprošćenja računanja preostalih dijagrama, možemo izvesti određene zaključke. Prvo je jasno da se delovanje laplasijana na dati propagator registruje kroz pojavu njegove svojstvene vrednosti u konačnom izrazu. Dakle, ako se deluje na propagatorsku liniju impulsa \mathbf{k} , kao faktor će iznići svojstvena vrednost $-\widehat{\mathbf{k}}^2$. Analogno važi i za unutrašnji impuls \mathbf{p} . Petlje sa sobom povlače i integraciju po unutrašnjim impulsima \mathbf{p} , kao i sumiranje po unutrašnjim frekvencijama ω_n , a u svim slučajevima sa jednim verteksom će se izdvojiti član koji sumiranjem po unutrašnjim frekvencijama daje Boze raspodelu slobodnih eksitona. Osim toga, na ovom mestu bi valjalo naglasiti da je zapremina elementarne ćelije v_0 u našem slučaju površina $v_0 = ab$ jer pristupamo eksploataciji dvodimenzionane rešetke.

Uz ovako utvrđena pravila lako možemo izračunati doprinos drugog dijagrama sa verteksom 4(a) (1.69). U ovom slučaju ponovo polazimo od izraza (1.72), samo sad vršimo kontrakcije koje odgovaraju ovom dijagramu. Dakle, mogućnosti su sledeće:

$$\overbrace{\psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\nabla_z^2\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)} \quad (1.81)$$

i:

$$\overbrace{\psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\nabla_z^2\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)}, \quad (1.82)$$

te se i u ovom slučaju ukida faktor 1/2. U skladu sa već utvrđenim pravilima, doprinos ovog dijagrama konačnom izrazu biće:

$$\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{p}}^2. \quad (1.83)$$

Doprinos forme (1.70) malo ćemo eksplicitnije zapisati usled delovanja laplasijana na dva propagatora. Dakle, polazimo od sledećeg izraza:

$$-\left(-\frac{1}{2S} \frac{v_0}{2m_0} v_0\right) \sum_{\mathbf{z}} \int_0^\beta d\tau_z \langle \psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\nabla_z^2(\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z))\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y) \rangle_0, \quad (1.84)$$

pri čemu prvom dijagramu doprinosa 4(b) odgovara sledeće kontrakovanje:

$$\overbrace{\psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\nabla_z^2(\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z))\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)}, \quad (1.85)$$

te izraz (1.84) možemo raspisati:

$$\frac{1}{2S} \frac{v_0}{2m_0} v_0 \sum_{\mathbf{z}} \int_0^\beta d\tau_z D(\mathbf{x} - \mathbf{z}, \tau_x - \tau_z) \nabla_z^2 (D(\mathbf{z} - \mathbf{y}, \tau_z - \tau_y) D(\boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}, 0))|_{\boldsymbol{\omega}=\mathbf{z}}. \quad (1.86)$$

Prelaskom na prostor impulsa i frekvencija:

$$-\frac{1}{2S} \frac{v_0}{2m_0} \frac{1}{\beta^2} \sum_{\omega_m, \omega_n} \int_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}}^2 D^2(\mathbf{k}, \omega_m) D(\mathbf{p}, \omega_n) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) - i\omega_m(\tau_x - \tau_y)}, \quad (1.87)$$

dolazimo do konačnog izraza za doprinos ovog člana popravci neinteragujuće disperzije:

$$-\frac{1}{2S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}}^2. \quad (1.88)$$

Nakon što se u poslednjem članu prve popravke izvrše kontrakcije u skladu sa drugim dijagramom (1.70):

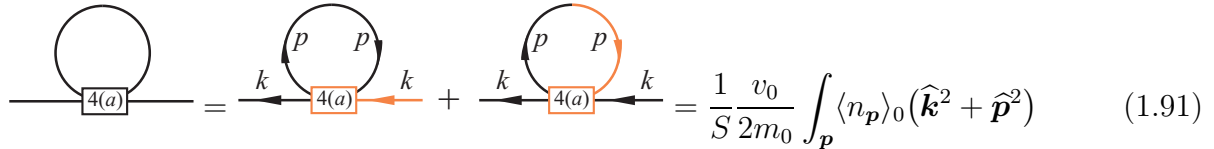
$$\overbrace{\psi(\mathbf{x}, \tau_x)\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z)\nabla_z^2(\psi^\dagger(\mathbf{z}, \tau_z)\psi(\mathbf{z}, \tau_z))\psi^\dagger(\mathbf{y}, \tau_y)}, \quad (1.89)$$

postaje jasno da je njegov doprinos identičan prethodnom, odnosno iznosi:

$$-\frac{1}{2S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}}^2. \quad (1.90)$$

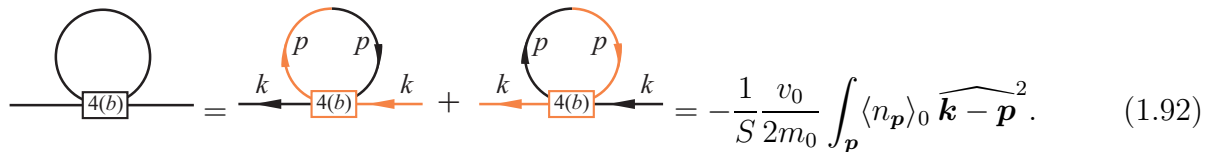
Takođe, na osnovu ovog izraza uvidamo da dejstvo laplasijana na propagatorske linije istog impulsa daje doprinos jednak nuli, te je sad jasno što su takva dva člana izostavljena iz polaznog dijagramskog zapisa člana 4(b) (1.70).

Sada preostaje samo da se sakupe sve dobijene popravke (1.80), (1.83), (1.88) i (1.90), te su doprinosi dijagrama sa jednom petljom (*one-loop diagrams*) sledeći:



$$\text{Diagram 4(a)} = \text{Diagram 4(a) with arrows} + \text{Diagram 4(a) with arrows} = \frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 (\widehat{\mathbf{k}}^2 + \widehat{\mathbf{p}}^2) \quad (1.91)$$

i:



$$\text{Diagram 4(b)} = \text{Diagram 4(b) with arrows} + \text{Diagram 4(b) with arrows} = -\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}}^2. \quad (1.92)$$

Na prvi pogled izgleda da ovako definisane relacije nisu prilagođene strukturi prethodno razmatranih rešetki sa slike 1.2, ali ukoliko se prisetimo izraza za svojstvenu vrednost diskretnog laplasijana D^2 , odnosno (1.67), rezultati postaju konzistentni sa spomenutom strukturom. Izraz je lako srediti ukoliko se u obzir uzme relacija [57] (videti prilog A.2):

$$\int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}_j}^2 = \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \left(\widehat{\mathbf{k}}_j^2 + \widehat{\mathbf{p}}_j^2 - \frac{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2}{2D} \widehat{\mathbf{k}}_j^2 \widehat{\mathbf{p}}_j^2 \right), \quad (1.93)$$

gde se j odnosi na vrstu suseda.

Dakle, disperzija računata do na popravku prve petlje svodi se na izraz:

$$E_{\text{p.p.}}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}), \quad (1.94)$$

u kom figuriše perturbativni doprinos:

$$\Sigma(\mathbf{k}) \approx \frac{\widehat{\mathbf{k}}_1^2}{2m_0} A_1(T) + \frac{\widehat{\mathbf{k}}_2^2}{2m_0} A_2(T) + \frac{\widehat{\mathbf{k}}_3^2}{2m_0} A_3(T). \quad (1.95)$$

Faktor $A_j(T)$ je bezdimenzioni temperaturno zavisni faktor i za prvu vrstu suseda ima formu:

$$A_1 = \frac{a^2}{2D} \frac{|\boldsymbol{\lambda}_1|^2 I_1^x}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 I_3^x} v_0 \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{p}}_1^2, \quad (1.96)$$

za drugu:

$$A_2 = \frac{b^2}{2D} \frac{|\boldsymbol{\lambda}_2|^2 I_2^x}{|\boldsymbol{\lambda}_3|^2 I_3^x} v_0 \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{p}}_2^2, \quad (1.97)$$

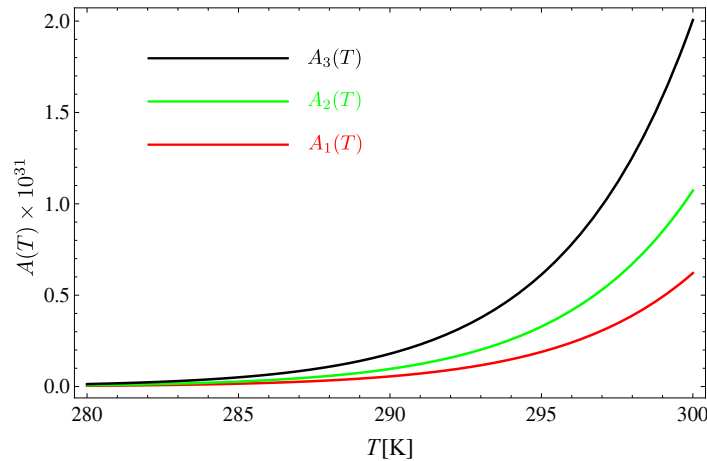
a za treći tip suseda:

$$A_3 = \frac{2|\boldsymbol{\lambda}_3|^2}{2D} v_0 \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{p}}_3^2, \quad (1.98)$$

u skladu sa prethodno definisanim svojstvenim vrednostima diskretnog laplasijana rešetke sa slike 1.2. Praktično ove konstante registruju efekat eksiton-eksiton interakcija kroz renormalizovanje integrala izmene $I_j^x \rightarrow I_j^x(T)$, a njihova zavisnost od temperature u sličaju rešetke pentacena prikazana je na slici 1.19. Prilikom crtanja ove zavisnosti korišćen je ranije određen

skup parametara: $\Delta = 1.83$ eV [60], $I_1^x = 5.7$ meV, $I_2^x = 3.4$ meV i $I_3^x = 23.4$ meV. Isti obračun mogao je biti izvršen i za druge razmatrane ugljovodonike, ali se zaključci ne bi promenili.

Uočavamo da je uticaj eksiton-eksiton interakcija zanemarljiv na niskim temperama, a svakako je to slučaj i na višim, poput temperature od 300 K, na kojoj je vršen jedan skup merenja. To možemo pripisati vrednosti eksitonskog gega, koja je velika u odnosu na integrale izmene, pa je u odnosu na najveći integral izmene I_3^x ona skoro dva reda veličine veća. Osim toga, već je naglašeno da su eksitoni derivativno kuplovani interakcijama koje praktično iščezavaju pri niskim impulsima. Skorašnja istraživanja [80,81] pokazala su da amplitude rasejanja u sistemima u kojima vladaju interakcije ovog tipa iščezavaju kada impulsi čestica teže nuli. Do sličnih zaključaka došao je i Frimen Dajson (*Freeman Dyson*) prilikom istraživanja uticaja interakcije između spinskih talasa u feromagnetnim sistemima [82,83].



Slika 1.19: Temperaturna zavisnost renormalizacionih faktora $A_j(T)$ u pentacenu. Korišćen je sledeći skup parametara: $\Delta = 1.83$ eV [60], $I_1^x = 5.7$ meV, $I_2^x = 3.4$ meV i $I_3^x = 23.4$ meV

Dakle, uticaj eksiton-eksiton interakcija na disperziju sistema Frenkelovih eksitona jeste neznatan. Stoga možemo zaključiti da uključivanje eksiton-eksiton interakcija u prethodno formiranu sliku neće popraviti sitna eksperimentalna i teorijska neslaganja. Ukidanje pojedinih aproksimacija prilikom definisanja pravaca u rešetkama aromatičnih ugljovodonika, kao i uključivanje drugih ekscitacija, poput CT eksitona, moglo bi imati presudan značaj za poboljšanje prikazanih rezultata. Međutim, ono što je sigurno jeste to da su Frenkelovi eksitoni ključan tip ekscitacija u razmatranim ugljovodicima i da su oni gotovo u potpunosti odgovorni za eksitonsku dinamiku u ovim jedinjenjima. Osim toga, ispostavlja se da je ovakva slika, bazirana na Frenkelovim eksitonima, prilično podesna jer daje mnogo bolje slaganje sa eksperimentalnim podacima u odnosu na teoriju istkanu iz primarnih principa, odnosno baziranu na operatorima elektrona i šupljina [36]. Takođe, račun predstavljen u ovom doktoratu otporniji je na perturbativne korekcije.

Glava 2

Kvantna zamršenost i kvantna koherentnost u modelima spinskih lanaca

Poslednjih nekoliko decenija posebna pažnja posvećena je tretiranju kvantne mehanike u pogledu potencijalnih primena koje bi uticale na što svrsishodniju i efikasniju eksploataciju svakodnevnih dobara. Iako pri samom nastanku nije bila opšte prihvaćena i još uvek se nije dovoljno približila komercijalnoj proizvodnji i upotrebi, kvantna informatika pustila je svoje korenje upravo iz esencijalne potrebe da se povećaju efikasnost i brzina postizanja rezultata u odnosu na trenutno rasprostranjene klasične računare. Jedan od polaznih motiva za njen razvitak bila je nemogućnost postojeće tehnologije da isprati predviđanje Gordona Mura (*Gordon Moore*) iz 1965. godine, prema kom bi se broj tranzistora po čipu povećavao pri istovremenom smanjivanju njegovih dimenzija, dok bi se snaga procesora duplirala okvirno nakon svake druge godine uz istrajnost cene [84]. Glavni problem ovakve teze leži u tome što se tranzistori ne mogu beskonačno smanjivati i u poslednje vreme uočeno je blago usporenje rasta performansi čipova. Iako je jedan od vodećih načina za rešavanje ovog problema trenutno paralelizacija čipova i okretanje višejezgarnim procesorima [85], sveprisutan problem zagrevanja procesora zahteva pronalaženje efikasnih rashladnih sistema, što otvara pitanje balansa između efikasnosti i cene.

Kvantni računari jesu daleko od komercijalne upotrebe i rešavanja problema cene, ali predstavljaju sledeću kariku u hijerarhiji računara usled širokog spektra mogućnosti koje bi bili u stanju da ponude. Stoga ne treba da čudi to što je kolektivni um naučne zajednice revnosno posvećen traženju što efikasnijih implementacija kvantne mašinerije pored brojnih drugih aktuelnih problema. Razlog potiče od činjenice da je kod kvantnih računara efikasnost paralelnog procesuiranja znatna usled zamene klasičnih bitova 0 i 1 kubitima (kvantnim bitovima)¹, koji se nalaze u superpoziciji ortogonalnih stanja $|0\rangle$ i $|1\rangle$ [86, 87]. Ovakvo alternativno rešenje, spontano rođeno iz potrebe za poboljšanjem Čerč-Tjuringove teoreme² [86, 88], postalo je revolucionarna ideja utemeljena u radovima Ričarda Fajnmana (*Richard Feynman*) [89] i Dejvida Dojča (*David Deutsch*) [90]. I dok je u vreme njenog nastanka bilo izvesnih strepnji po pitanju same realizacije, danas je jasno da razne dobrobiti čine kvantne računare podesnim kandidatima za širok spektar primena u različitim sferama ljudske prakse, poput neuronauke [91], hemije [92–94], finansija [95] i brojnih drugih oblasti.

Osim značajnog pospešenja brzine procesuiranja, kvantni računari nude i mogućnost rešavanja izvesnih problema koji su u svetu klasičnih računara bili praktično nerešivi. Danas se pretpostavlja da broj algoritama rešivih u svetu kvantnih računara značajno prevazilazi broj postojećih klasičnih algoritama. Ove prednosti kvantnih računara u odnosu na klasične poznate su u literaturi pod nazivom kvantna nadmoć (*quantum supremacy*), kako ih je nazvao Džon Preskil (*John Preskill*) 2012. godine. Posebno su značajna dva algoritma koja ilustrativno ukazuju na superiornost kvantnih računara - Groverov i Šorov. Dok je Lov Grover (*Lov Grover*) pokazao da bi kvantni računar ubrzao pretragu u nestruktuiranom prostoru [96], algoritam Pitera Šora (*Peter Shor*) osetno povećava efikasnost rešavanja problema nalaženja

¹Kubiti su osnovna gradivna jedinica kvantnih računara.

²Čerč-Tjuringova (*Church-Turing*) teorema tvrdi da, ukoliko postoji mogućnost sprovođenja algoritma na makar kom hardveru, onda postoji ekvivalentan algoritam za univerzalnu Tjuringovu mašinu, koji sprovodi apsolutno identičan zadatak. Naime, Tjuringova mašina je delo Alana Tjuringa (*Alan Turing*) i predstavlja teorijski idealizovan model za vršenje matematičkih proračuna. Sastoji se od beskonačno dugačke trake podeljene na ćelije, instrukcijske table i glave koja može da zauzme beskonačan broj mogućih stanja.

delilaca celog broja u odnosu na klasične računare [97].

Najveći potencijal kvantnih računara u modernom svetu leži u brojnim blagodatima kvantne mehanike, koja sama po sebi nudi sredstva i rešenja bez analoga u klasičnom svetu. Pre svega, tu govorimo o jednom od najčudnovatijih izdanaka kvantne mehanike - kvantnoj zamršenosti, meri jakih nelokalnih korelacija u sistemu. U pitanju je fenomen prisutan u sistemima sa više od jedne čestice koje, čak i ako se nalaze na ogromnim rastojanjima, dele zajedničko zamršeno stanje i ne mogu biti tretirane nezavisno jedna od druge [86, 87]. Ideje o kvantnoj kriptografiji, kvantnoj teleportaciji i "gustom" kodiranju (*dense coding*) duboko su protkane nitima zamršenih stanja [86, 87]. Kvantna kriptografija zasniva se na teoremi kvantne informatike koja tvrdi da se nepoznata stanja ne mogu klonirati, te na taj način omogućava razotkrivanje prislušivača određene tajne komunikacije dve stranke. Sa druge strane, kvantna teleportacija omogućava slanje nepoznatog stanja posredstvom zamršenog stanja ukoliko u sistemu postoje minimum tri kubita, dok "gustim" kodiranjem možemo poslati dva bita informacije slanjem svega jednog kubita. Stoga je neophodno ustanoviti da li, i pod kojim uslovima, se u sistemu javlja zamršenost. Ispostavilo se da je dovoljno proveriti validnost nekog tipa Belove nejednakosti³, čijim narušenjem utvrđujemo da se sistem nalazi u zamršenom stanju [98, 99].

Međutim, i dalje ostaje otvoreno pitanje da li je praksa u stanju da isprati teorijsko pristupanje kvantnoj informatici. Kao što je već rečeno, komercijalna proizvodnja kvantnih računara još uvek je daleko od stvarnosti. Do danas su konstruisani kvantni računari sa jedva nekoliko desetina zamršenih kubita [100, 101]. Ispostavlja se da je u kvantno-informatičkim sistemima efekat dekoherencije, koji možemo posmatrati kao zamršenost sistema sa okruženjem, taj koji uzima maha i utiče na smanjenje zamršenosti sistema [102]. Shodno tome, danas je posebna pažnja posvećena upravo rešavanju ovog problema. Doduše, postoje izvesni koncepti kvantne informatike koji su već uspešno eksperimentalno provereni i realizovani. Recimo, kvantna kriptografija utvrđena je u različitim sistemima baziranim na kubitima i ispitana pri različitim rastojanjima [103–105]. Osim kvantne kriptografije, brojni drugi aspekti kvantne informatike eksperimentalno su istraženi u prethodnim godinama [106–114]. Dakle, sama oblast prilično je razvijena od rođenja pojma kubita u radu Bendžamina Šumahera (*Benjamin Schumacher*) iz 1995. godine [115], ali svakako ostaje još pregršt neiskorišćenog potencijala za dalji tok istraživanja.

S obzirom na evidentnost potrebe da se nađe sistem koji može na podestan način simulirati kvantne probleme i ustanovljenu činjenicu da nijedan klasični računar nije u stanju da obavi tako nešto sa dovoljnom efikasnošću, okretanje kvantnim računarima i njihovim mogućim realizacijama predstavlja logičan izbor [86]. Značajan broj postojećih sistema poseduje potencijal u ovoj oblasti. Srž problema je u tome da se za konzistentne predstavnike sistema kubita biraju kvantni sistemi sa dva postojeća ortogonalna stanja, $|0\rangle$ i $|1\rangle$. To su, recimo, optički sistemi, koji kao osnovu koriste dve polarizacije fotona, nuklearna magnetna rezonanca, gde nuklearni spinovi reprezentuju kubite, zarobljeni joni, sistemi Džozefsonovih spojeva i mnogi drugi [116–118]. Najčešće reprezentacije kvantnih računara jesu upravo one koje koriste spinske kubite [119]. Jedna od skorašnjih tehnologija, u koju kvantna informatika polaže velike nade, bazirana je na kvantnim tačkama [112, 120–124]. Reč je o spinskim kubitima reprezentovanim elektronima, koji se odlikuju dugim vremenima koherentnosti, zarobljenim u kvantnim tačkama. Pripajanjem izvora električnog impulsa generiše se interakcija između susednih kubita posredstvom preklapanja talasnih funkcija susednih elektrona. I dok se očekuje da se sistem može tretirati posmatranjem elektrona u kvantnim tačkama sa stanovišta direktnih stepeni slobode, pri čemu je njihovo međusobno dejstvo definisano odabranim potencijalom [120, 121], ispostavlja se da je opisana situacija uporediva sa sistemima opisanim Hajzenbergovim hamil-

³Belova nejednakost dobila je naziv prema svom tvorcu, Džonu Belu (*John Bell*). Nastala je kao odgovor na prethodno ustanovljeni EPR (*Einstein-Podolsky-Rosen*) paradoks [87], koji je sugerisao nekompletnost kvantne teorije. Praktično rečeno, nejednakost ukazuje na to da li se sistem nalazi u zamršenom stanju ili ne. Jedan od češćih oblika Belove nejednakosti jeste CHSH (*Clauser-Horne-Shimony-Holt*) nejednakost [99].

tonijanima [123, 124]. Naravno, postoji krucijalna razlika između magnetnih izolatora, obično opisanih takvim modelima, i sistema kubita. Dok u prvom slučaju parametri modela (poput Hajzenbergovih integrala izmene između susednih spinova) predstavljaju neodvojiva svojstva sistema, u drugom slučaju oni mogu biti eksperimentalno kontrolisani [125, 126].

U ovom radu akcenat će biti upravo na ovakvom dualnom pristupu problemu. Sistemi spinskih kubita biće tretirani polazeći od jednodimenzionih Hajzenbergovih spinskih hamiltonijana, te su u srži modela upravo spinski operatori. Parametri modela će biti posmatrani kao promenljive i biće utvrđeno na koji način značajne veličine kvantne informatike zavise od njih. S obzirom na to da je jedan od najdragocenijih resursa kvantne mehanike u ovim sistemima upravo kvantna zamršenost, ni ne čudi da je od interesa naći optimalni skup parametara koji će je održati na maksimalnom mogućem nivou u datom sistemu. Kako se spinski modeli koriste prilikom opisa raznih fizičkih problema, počevši od svojstava magnetnih jedinjenja [127–131], kvantnih Holovih sistema [132, 133], sistema Džozefsonovih spojeva [134], pa sve do kvantnih faznih prelaza i brojnih drugih [135–139], jasno je da je broj raspoloživih alata u datom slučaju velik.

U poslednje dve decenije značajna su ispitivanja uticaja anizotropije na ponašanje zamršenosti u sistemima XY i XYZ spinskih lanaca [140, 141], od kojih je poseban interes pripisan modelima sa Đalošinski-Morija (*Dzyaloshinskii–Moriya*, DM) interakcijom [142–149], kao i u višedimenzionim strukturama [150]. Stoga će ovaj segment doktorata biti posvećen eksploataciji baš Hajzenbergovih XY spinskih lanaca sa DM interakcijom i dve vrste anizotropije. Glavni cilj će biti ispitivanje uticaja modelnih parametara na dva resursa kvantne informatike, kvantnu zamršenost (*quantum entanglement*) i kvantnu koherentnost (*quantum coherence*), ali i utvrđivanje potencijalne veze između njih. Razmatrani sistemi biće izgrađeni od trospinskih blokova sa pojedinačnim spinom $S = 1/2$. Pritom ćemo se služiti veoma korisnim oruđem u teoriji kvantnih faznih prelaza, kvantnom renormalizacionom grupom [143, 145, 146, 151–156], kako bismo proverili da li potencijalna veza utvrđena u sistemima od tri spina važi i u većim sistemima (koji se sastoje od više trospinskih blokova). Upravo razmatranje sistema kreiranih od velikog broja kubita bliže je realnoj situaciji, koja bi mogla imati praktični interes. Ovaj segment doktorata predstavlja prirodni nastavak rada na vezi čije su naznake uočene u [157], a rezultati predstavljeni u nastavku mogu se naći u objavljenom radu [158].

2.1 Kvantna zamršenost

Dosad je pojam kvantne zamršenosti nekoliko puta spomenut u kontekstu važnog resursa kvantne informatike, koji se ni na koji način ne može objasniti klasičnom fizikom. Temeljna ispitivanja same pojave dovela su do nalaženja raznih načina na koje zamršenost može biti uočena u sistemu, utvrđivanja noviteta koje ona donosi u pogledu kvantne informatike, kao i definisanja mera koje je mogu podesno kvantifikovati. Međutim, da bismo ustanovili svedoke kvantne zamršenosti u sistemima od interesa i uslove za dobre mere kvantne zamršenosti, najpre je neophodno postaviti temelje pojma zamršenih stanja.

Shodno tome, krenućemo od definisanja Šmitove dekompozicije (*Schmidt decomposition*) [86, 87, 159]. Naime, neka je kompozitni prostor konstruisan od dva Hilbertova potprostora \mathcal{H}_A i \mathcal{H}_B , sa odgovarajućim proizvoljnim ortonormiranim bazisima $\{|a_i\rangle\}$ i $\{|b_j\rangle\}$, respektivno. Tada se ma koje čisto stanje iz Hilbertovog prostora tenzorskog proizvoda $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ može predstaviti na sledeći način:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle, \quad (2.1)$$

gde je C matrica kompleksnih brojeva c_{ij} . U skladu sa dekompozicijom singularne vrednosti,

svaka kompleksna matrica C može se predstaviti na sledeći način:

$$C = UDY, \quad (2.2)$$

gde su U i Y unitarne matrice, a D matrica u dijagonalnoj formi. Onda možemo pisati:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j,k} u_{ik} d_{kk} y_{kj} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle. \quad (2.3)$$

U tom slučaju možemo uvesti nove skupove ortonormiranih stanja $|s_A\rangle = \sum_i u_{ik} |a_i\rangle$ i $|s_B\rangle = \sum_j y_{kj} |b_j\rangle$, kao i $\lambda_s = d_{kk}$, te izraz poprima formu:

$$|\Psi\rangle = \sum_s \lambda_s |s_A\rangle \otimes |s_B\rangle, \quad (2.4)$$

gde su λ_s nenegativni realni brojevi poznati kao Šmitovi koeficijenti, koji zadovoljavaju uslov $\sum_s \lambda_s^2 = 1$. Ovi koeficijenti jesu glavni pokazatelji prirode stanja sistema, odnosno razlučuju separabilna, takoreći razdvojiva, stanja od zamršenih. Naime, ukoliko postoji samo jedan Šmitov koeficijent koji je različit od nule (konkretno jednak jedinici), reč je o separabilnom stanju, dok se u suprotnom govori o zamršenom stanju.

U literaturi se kao najčešći primeri zamršenih stanja navode stanja Belovog bazisa, formirana od *up* i *down* svojstvenih stanja Paulijeve matrice σ^z . U slučaju dvokubitnog sistema imaju sledeći oblik [87]:

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \quad |\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle), \quad (2.5)$$

pri čemu su ortogonalna stanja $|0\rangle$ i $|1\rangle$ svojstveni vektori z -projekcije spina $S = 1/2$:

$$|0\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

U pitanju su stanja maksimalne zamršenosti, koja su često u upotrebi u kvantnoj informatici upravo usled činjenice da se svako stanje Belovog bazisa može veoma jednostavno prevesti u bilo koje drugo stanje Belovog bazisa posredstvom delovanja Paulijevih matrica i jedinične matrice [160]. Sada ćemo se uveriti u zamršenost ovih stanja. Posmatrajmo, na primer, stanje $|\Psi^+\rangle$. Ako pođemo od pretpostavke separabilnosti ovog stanja, to znači da ga možemo predstaviti u obliku tenzorskog proizvoda stanja $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ i stanja $\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle$, pri čemu su α i β konstante za koje važi $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, a γ i δ konstante za koje važi $|\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$. Dakle, možemo pisati:

$$\begin{aligned} |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle) = \\ &= \alpha\gamma|00\rangle + \alpha\delta|01\rangle + \beta\gamma|10\rangle + \beta\delta|11\rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Očigledno je da u ovom slučaju moraju važiti uslovi $\alpha\delta = \beta\gamma = \frac{1}{2}$, kao i $\alpha\gamma = \beta\delta = 0$. Kako su ova dva uslova međusobno isključiva, jasno je da je polazna pretpostavka separabilnosti netačna. Slično se pokazuje da su i preostala stanja Belovog bazisa zamršena. Možemo zaključiti da u datom slučaju dvokubitni sistem u stanju $|\Psi^+\rangle$ ne možemo razložiti na sastavne kubite, već ih posmatramo kao deo jedinstvene celine, što je zajednička osobina svih zamršenih sistema.

Već je spomenuto da je kvantna zamršenost duboko utkana u samu srž kvantne informatike. Konkretno, svojstvo zamršenosti u kvantnom sistemu polazna je tačka i nužan uslov za kvantnu teleportaciju i "gusto" kodiranje [87]. Osim toga, za postizanje što veće efikasnosti i brzine kvantnih računara insistira se na zamršenju što većeg broja kubita. Upravo to je razlog izraženog interesovanja za nalaženje mogućih svedoka zamršenosti i novih mera zamršenosti.

Naime, da bi neka veličina delotvorno ukazivala na postojanje zamršenosti u sistemu, ona mora zadovoljavati izvesni uslov. U opštem slučaju, svedok zamršenosti je ermitski operator W koji ima nenegativne srednje vrednosti za sva čista separabilna stanja $|\Psi_{\text{sep}}\rangle$ [159]:

$$\langle \Psi_{\text{sep}} | W | \Psi_{\text{sep}} \rangle \geq 0. \quad (2.8)$$

S obzirom na to da se matrica gustine separabilnih mešanih stanja može zapisati u formi:

$$\rho_{\text{sep}} = \sum_i p_i |\Psi_{\text{sep}}^i\rangle \langle \Psi_{\text{sep}}^i|, \quad (2.9)$$

gde za koeficijente p_i važi $p_i > 0$, kao i uslov kompletnosti $\sum_i p_i = 1$, u opštem slučaju uslov separabilnosti postaje [159]:

$$\text{Tr}(\rho_{\text{sep}} W) = \sum_i p_i \langle \Psi_{\text{sep}}^i | W | \Psi_{\text{sep}}^i \rangle \geq 0. \quad (2.10)$$

Dakle, negativne srednje vrednosti svedoka zamršenosti W , odnosno $\text{Tr}(\rho W) < 0$, ukazuju na zamršenost razmatranog stanja. Treba uočiti da izbor ovako definisanog svedoka zamršenosti, ali i sam uslov zamršenosti, može poprilično zavistiti od razmatrane problematike.

Recimo, Časlav Brukner i Vlatko Vedral ispitivali su jednodimenzione XX i XXX spinske lance pod uticajem spoljašnjeg magnetnog polja B orijentisanog u z -pravcu, pri čemu je relevantna bila samo interakcija između najbližih suseda, i ustanovili da je u oba slučaja sistem zamršen ukoliko je zadovoljena nejednakost [161]:

$$\frac{|U + BM|}{N|J|} > 1, \quad (2.11)$$

gde je $U = \langle H \rangle$ unutrašnja energija modela, J integral izmene za najbliže susede, $M = \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i^z \rangle$ ukupna magnetizacija, a N ukupan broj spinova. Sa druge strane, u sistemu od dva spina (dimer), koji međusobno interaguju posredstvom Hajzenbergove interakcije, sam hamiltonijan predstavlja dobrog pokazatelja zamršenosti [162]:

$$\langle H \rangle = |\text{Tr}(\rho H)| = J |\langle \sigma \rangle \langle \sigma \rangle| > J, \quad (2.12)$$

pri čemu su σ Paulijeve spinske matrice koje odgovaraju spomenutim spinovima, a J konstanta kuplovanja između njih.

2.1.1 Osobine dobre mere kvantne zamršenosti. Konkurentnost

Da bi neka veličina bila zadovoljavajuća mera kvantne zamršenosti i konzistentno opisivala njeno ponašanje, ona mora zadovoljavati nekoliko uslova [163]:

1. $E(\rho) = 0$ samo pod uslovom da je ρ separabilno stanje,
2. lokalne unitarne operacije ostavljaju $E(\rho)$ invarijantnim: $E(\rho) = E(U_A \otimes U_B \rho U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$, gde su A i B dva podsistema,
3. važi $\sum_i \text{Tr}(\rho_i) E\left(\frac{\rho_i}{\text{Tr}(\rho_i)}\right) \leq E(\rho)$, gde je $\rho_i = V_i \rho V_i^\dagger$, a V_i operator objedinjenog dejstva lokalnog generalnog merenja sa uslovom $\sum_i V_i^\dagger V_i = \mathbb{1}$.

Prva dva uslova prilično su jasna: samo kod separabilnih stanja nema zamršenosti, a lokalne promene bazisa ne mogu nikako uticati na promenu količine zamršenosti - kako na povećanje,

tako i na smanjenje. Treći uslov je malo manje očit, ali njegova uloga jeste da eliminiše mogućnost povećanja zamršenosti posredstvom lokalnih merenja praćenih klasičnom komunikacijom, što, ovako sročeno, postaje razumljivo s obzirom na to da je zamršenost striktno kvantni efekat.

Ove uslove zadovoljava nekoliko fizičkih veličina, a najčešće se koriste zamršenost formacije (*entanglement of formation*), zamršenost destilacije (*entanglement of distillation*) i relativna entropija zamršenosti (*relative entropy of entanglement*) [163]. Prva mera je i najčešća i uglavnom se obeležava sa E_f . Za čisto dvočestično stanje dato matricom gustine $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ zamršenost formacije definiše se pomoću Fon Nojmanove entropije (*Von Neumann entropy*):

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho) \quad (2.13)$$

redukovane matrice gustine [164]:

$$E_f(\rho) = -\text{Tr}(\rho^A \log_2 \rho^A), \quad (2.14)$$

gde je $\rho^A = \text{Tr}_B \rho^{AB}$ redukovana matrica gustine pod sistema A, koja se nalazi kao parcijalni trag matrice gustine sistema $A \otimes B$ po pod sistemu B (videti prilog B.1). Uočimo da je baza logaritma 2 upravo zbog kubitne problematike zasnovane na dva ortogonalna stanja. Za mešana stanja, koja se definišu pomoću čistih stanja:

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i, \quad \rho_i = |\Psi^i\rangle\langle\Psi^i|, \quad (2.15)$$

zamršenost formacije poprima sledeći oblik [164]:

$$E_f(\rho) = \min \sum_i p_i E_f(\rho_i), \quad (2.16)$$

gde se minimum traži po svim čistim stanjima, što ume biti poprilično komplikovan posao, a često i nemoguć. Iako su neke mere zamršenosti za sisteme od više kubita prethodno razmatrane [165, 166], u ovom radu biće korišćena pogodna relacija koja važi samo za dvokubitne sisteme, a do koje je došao Vilijam Vuters (*William Wootters*) [167]. U našem slučaju to znači da će veći sistem (od tri kubita) biti neophodno redukovati baš na dvokubitni pod sistem pre daljeg računanja.

Da bi došao do izraza za zamršenost formacije, Vilijam Vuters pošao je od transformacije obrtanja spina. U slučaju čistog stanja jednog kubita, ona se definiše u obliku [167]:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sigma^y |\Psi^*\rangle, \quad (2.17)$$

gde je $|\Psi^*\rangle$ kompleksno konjugovano stanje u odnosu na stanje $|\Psi\rangle$, definisano u standardnom bazu $\{| \uparrow \rangle = |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, | \downarrow \rangle = |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\}$, a $\sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ poznata forma Paulijeve matrice. Naravno, da bi se operacija primenila na sistem od N kubita, neophodno je proceduru ponoviti za svaki od njih. U slučaju sistema od dva kubita, to podrazumeva izraz [167]:

$$\tilde{\rho} = (\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (2.18)$$

u kom je ρ^* kompleksno konjugovana matrica u odnosu na matricu gustine ρ , dobijena opet u standardnom bazu $\{| \uparrow \downarrow \rangle, | \uparrow \uparrow \rangle, | \downarrow \uparrow \rangle, | \downarrow \downarrow \rangle\}$. Izraz za zamršenost formacije dat je u obliku [167]:

$$E_f(\rho) = E(C(\rho)) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2(\rho)}}{2}\right), \quad (2.19)$$

gde je $C(\rho)$ konkurentnost, a $h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x)$.

Kako zamršenost formacije monotono raste sa porastom konkurentnosti, a vrednosti obe veličine se kreću između 0 i 1, ova veličina takođe predstavlja dobru meru zamršenosti. Konkurentnost se definiše na sledeći način [167]:

$$C(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (2.20)$$

gde su λ_i ($i = 1, \dots, 4$) kvadratni koreni svojstvenih vrednosti matrice $R = \rho\tilde{\rho}$ u opadajućem poretku, i upravo ovu veličinu koristićemo u nastavku kao validnu meru zamršenosti u sistemu.

2.2 Kvantna koherentnost

Kao pojam koji se naširoko odomaćio u sferama ljudskog interesovanja poput optike, akustike, ali i neuro nauke, koherentnost sve više dolazi do izražaja i u oblastima kvantne mehanike [168]. Već je spomenuto da je održavanje koherentnosti u sistemima kvantnih računara esencijalno za dugotrajnu i iscrpnu upotrebu njihovih kvantnih blagodeti. Međutim, za razliku od podrobno istraženih mera kvantne zamršenosti, kvantna koherentnost je u ovom polju probudila veći interes relativno skoro. Naime, prve naznake značajnijeg istraživanja mera pomoću kojih bi se superpozicija ortogonalnih kvantnih stanja sistema mogla kvantifikovati pojavile su se 2006. godine u radu Johana Eberga (*Johan Åberg*) [169]. Međutim, pravi vrh ledenog brega dotaknut je 2014. godine u radu istraživačke grupe koja se posvetila traženju uslova neophodnih da bi se neka veličina mogla zvati dobrom merom kvantne koherentnosti [170]. S obzirom na to da sama pojava proizilazi iz principa kvantne superpozicije, intuitivno se može pretpostaviti da postoji izvesna veza između nje i kvantne zamršenosti. Stoga se istraživanje potencijalnih veza između ova dva resursa kvantne informatike može pokazati posebno korisnim za njihovu dalju eksploataciju.

Da bismo mogli pričati o osobinama mera kvantne koherentnosti, najpre je neophodno uvesti pojam nekoherentnih matrica gustine i nekoherentnih kvantnih operacija. Naime, u d -dimenzionom Hilbertovom prostoru sa referentnim ortonormiranim bazisom $\{|i\rangle\}$, pri čemu je $i = 1, 2, \dots, d$, nekoherentne matrice gustine $\varrho \in \mathcal{I}$ jesu sve one matrice gustine koje su dijagonalne u datom bazisu [170]:

$$\varrho = \sum_{i=1}^d p_i |i\rangle\langle i|, \quad (2.21)$$

sa verovatnoćama p_i .

Sa druge strane, nekoherentne operacije predstavljaju se pomoću skupa Krausovih operatora $\{K_n\}$, koji zadovoljavaju uslov $\sum_n K_n^\dagger K_n = \mathbb{1}$ i za koje važi $K_n \mathcal{I} K_n^\dagger \subset \mathcal{I}$, gde je \mathcal{I} skup svih nekoherentnih matrica gustine [170]. Ovakva definicija ima za cilj da obezbedi da pri ukupnoj operaciji $\rho \longrightarrow \sum_n K_n \rho K_n^\dagger$ nijedan posmatrač ne registruje koherentnost iz nekoherentnog stanja. Poznate su dve klase nekoherentnih operacija [170]:

1. nekoherentne potpuno pozitivne kvantne operacije sa održivim tragom Φ_{NKPPOT} , koje su date relacijom:

$$\Phi_{\text{NKPPOT}}(\rho) = \sum_n K_n \rho K_n^\dagger, \quad (2.22)$$

gde su Krausovi operatori istih dimenzija $d_{\text{izlaz}} \times d_{\text{ulaz}}$,

2. merne, selektivne ili stohastičke operacije, koje se definišu pomoću Krausovih operatora različitih izlaznih dimenzija ($d_n \times d_{\text{ulaz}}$). Stanje koje odgovara n -tom ishodu je:

$$\rho_n = \frac{K_n \rho K_n^\dagger}{\text{Tr}(K_n \rho K_n^\dagger)}. \quad (2.23)$$

Ovakve operacije ključne su za gubitak koherentnosti u sistemu.

Ako uvedemo d -dimenziono maksimalno koherentno stanje $|\Psi_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{i=1}^d |i\rangle$, onda posredstvom nekoherentnih operacija možemo proizvesti sva ostala d -dimenziona stanja [170]. Naravno, jasno je da maksimalno koherentno stanje mora biti praćeno maksimalnom vrednošću mere koherentnosti, dok nekoherentno stanje odgovara njenoj nultoj vrednosti.

2.2.1 Osobine dobre mere kvantne koherentnosti. Relativna entropija koherentnosti

Kao što je to važno za zamršenost, i u slučaju koherentnosti postoje uslovi koje neka veličina $\mathcal{C}(\rho)$ mora zadovoljavati da bi je kvalitativno i kvantitativno uspela opisati. U pitanju su sledeće osobine [170]:

1. $\mathcal{C}(\rho) \geq 0$ za sva kvantna stanja, dok znak jednakosti važi isključivo kada je reč o nekoherentnom stanju, tj. za $\rho \in \mathcal{I}$,
2. monotonost pod Φ_{NKPPOT} mapiranjima: $\mathcal{C}(\rho) \geq \mathcal{C}(\Phi_{\text{NKPPOT}}(\rho))$,
3. monotonost koherentnosti pod selektivnim operacijama: $\mathcal{C}(\rho) \geq \sum_n p_n \mathcal{C}(\rho_n)$, gde je ρ_n definisano relacijom (2.23) i $p_n = \text{Tr}(K_n \rho K_n^\dagger)$,
4. funkcija ne raste pri mešanju kvantnih stanja: $\sum_i p_i \mathcal{C}(\rho_i) \geq \mathcal{C}(\sum_i p_i \rho_i)$ za ma koji skup stanja $\{\rho_i\}$ i $p_i \geq 0$ sa uslovom $\sum_i p_i = 1$.

Prvi uslov je prilično jasan i potvrđuje prethodni zaključak da je koherentnost jednaka nuli u slučaju nekoherentnih stanja. Drugi i treći uslov mogu se praktično podvesti pod jedan. Iako bi to bilo idealno, često je nemoguće proveriti oba uslova, ali je drugi uslov za široku klasu mera koherentnosti direktno zadovoljen [170]. Oba uslova ukazuju na to da dejstvom nekoherentnih operacija može doći samo do smanjenja koherentnosti, nikako povećanja. Poslednji uslov ukazuje na to da koherentnost može samo opadati usled mešanja stanja, što nas dovodi do važnosti razlučivanja dva pojma - kvantne superpozicije, koja dovodi do povećanja koherentnosti, i mešanja kvantnih čistih stanja. Naime, u ovom doktoratu baratamo hamiltonijanima čiji su svojstveni problemi egzaktno rešivi. Dobijene svojstvene vrednosti (energije) u tom slučaju odgovaraju svojstvenim vektorima koji predstavljaju čista stanja. Ona se nalaze u određenim kvantnim superpozicijama stanja trokubitnog standardnog bazisa $\{| \uparrow\uparrow\uparrow\rangle, | \uparrow\uparrow\downarrow\rangle, | \uparrow\downarrow\uparrow\rangle, | \downarrow\uparrow\uparrow\rangle, \dots\}$ i, usled činjenice da se u radu ne razmatra uticaj temperature, u obzir se uzimaju sistemi koji se nalaze u čistom svojstvenom stanju najniže energije. Ukoliko bi se data svojstvena stanja na neki način kombinovala (recimo, razmatranjem uticaja temperature), tada bismo govorili o sistemu koji se nalazi u mešanom stanju.

Nekoliko veličina, poput l_1 -norme (l_1 -norm) koherentnosti, trag-norme (*trace norm*) koherentnosti i relativne entropije entropije koherentnosti (*relative entropy of coherence*), zadovoljava navedene uslove [170]. Poslednja mera je i najčešća i biće korišćena u ovom radu. Obično se obeležava sa C_{re} , a definiše se na sledeći način [170]:

$$C_{\text{re}}(\rho) = \min_{\varrho \in \mathcal{I}} S(\rho \| \varrho), \quad (2.24)$$

gde je $S(\rho \| \varrho)$ kvantna relativna entropija:

$$S(\rho \| \varrho) = \text{Tr}(\rho \log_2 \rho) - \text{Tr}(\rho \log_2 \varrho), \quad (2.25)$$

pri čemu smo ρ ranije uveli kao stanje iz skupa nekoherentnih stanja \mathcal{I} . Relativna entropija koherentnosti može se zapisati u prigodnijem obliku [170]:

$$C_{\text{re}}(\rho) = S(\rho_{\text{diag}}) - S(\rho), \quad (2.26)$$

gde je ρ_{diag} dijagonalizovani oblik matrice gustine ρ :

$$\rho = \sum_{i,j} \rho_{ij} |i\rangle\langle j| \longrightarrow \rho_{\text{diag}} = \sum_i \rho_{ii} |i\rangle\langle i| \quad (2.27)$$

i iskorišćena je osobina $\text{Tr } \rho = \text{Tr } \rho_{\text{diag}}$. Možemo uočiti da iz izraza (2.26) automatski sledi relacija:

$$C_{\text{re}}(\rho) \leq S(\rho_{\text{diag}}) \leq \log_2 d, \quad (2.28)$$

gde je d dimenzija razmatranog Hilbertovog prostora. Upravo ovo ograničenje moglo bi i dovesti do intuitivne veze sa kvantnom zamršenosti u sistemu.

2.3 Ideja o povezanosti kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti

Veoma lepa paralela između kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti može se načiniti ukoliko se razmotri njihova priroda. Naime, obe pojave svoje korene crpe iz kvantne superpozicije i kvantnih korelacija - različito je samo tumačenje.

S jedne strane, kvantna koherentnost zasniva se na činjenici da su materiji pripisana i talasna svojstva. Ako se inicijalni talas podeli na dva dela, onda dva novonastala talasa koherentno interferiraju jedan sa drugim tako da formiraju jedinstveno stanje, koje predstavlja superpoziciju dva talasa. Stoga je jasno da može biti načinjeno poređenje između navedene situacije i kubitnog stanja u superpoziciji ortogonalnih stanja $|0\rangle$ i $|1\rangle$.

Za razliku od koherentnosti, kvantna zamršenost označava superpoziciju u drugačijem kontekstu. U ovom slučaju, superpoziciju dele dve zamršene čestice, odnosno dva fizički razdvojena kubita, koja poseduju zajedničko stanje. Kao što je već rečeno, ovakav vid superpozicije igra ključnu ulogu u brojnim blagodetima kvantne informatike, poput kvantne teleportacije i "gustog" kodiranja.

Posmatrajmo relacije (2.26) i (2.28). Očito je da se iz njih može izvući sledeća nejednakost:

$$C_{\text{re}}(\rho) + S(\rho) \leq \log_2 d. \quad (2.29)$$

Dakle, zaključujemo da povećanjem entropije kvantnog sistema dolazi do smanjenja relativne entropije koherentnosti i obrnuto. Drugačije se može reći da kada se sistem zamrsi sa spoljašnjim okruženjem, koherentnost automatski opada. U slučaju kada je reč o maksimalno mešanom stanju, sistem ne poseduje koherentnost, a entropija je maksimalna [171].

Sa druge strane, poznato je da se u dvokubitnim sistemima zamršenost formacije povećava sa smanjenjem relativne entropije koherentnosti jednog od njegovih podsistema i obrnuto [171]. Takođe, pre nekoliko godina utvrđeno je da nekoherentne operacije mogu generisati zamršenost određenog stanja sa nekoherentnim jedino pod uslovom da je polazno stanje bilo koherentno [172]. Stoga će cilj ovog segmenta doktorata biti utvrđivanje veze između konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti u konkretnim sistemima u slučaju dve vrste anizotropije, bez uplitanja bilo kakvog delovanja spoljašnjih operacija.

2.4 Model XY spinskih lanaca sa dva oblika anizotropije

Rezultati prikazani u ovom segmentu doktorata dobijeni su za XY Hajzenbergov model sa dve vrste anizotropije. Oba razmatrana hamiltonijana obuhvataju i DM interakciju s obzirom na to da je utvrđeno da ona utiče na količinu koherentnosti u sistemu od interesa [145]. Osim toga, prisustvo ove interakcije nezanemarljivo je u pojedinim strukturama, poput CsCuCl_3 i FeBO_3 [173, 174]. Interakciju je u svet fizike najpre uveo Igor Đalošinski (*Igor Dzyaloshinskii*) 1958. godine [175], a potom ju je Toru Morija (*Tôru Moriya*) 1960. godine identifikovao kao postojeći efekat, koji se u materijalima javlja kao posledica spin-orbitalnog kuplovanja [176]. Drugačije se naziva i antisimetričnom izmenom usled toga što potiče od antisimetričnog dela interakcione matrice oblika [177]:

$$H_{\text{DM}} = \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (2.30)$$

gde je sa \mathbf{D}_{ij} označen vektor Đalošinskog, a \mathbf{S}_i i \mathbf{S}_j su operatori spina na čvorovima i i j , u razmatranom slučaju baš susednim. Iz navedenog oblika interakcije može se zaključiti da se privileguje normalna orijentacija susednih spinova, a često se preferentne strukture nazivaju hiralnim [177].

Prvi razmatrani modelni hamiltonijan jeste Hajzenbergov hamiltonijan periodičnog XY spinskog lanca sa simetričnim tipom anizotropije i DM interakcijom [143]:

$$H = \frac{J}{4} \sum_{i=1}^N \left((1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + (-1)^i D (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \right), \quad (2.31)$$

gde je J integral izmene, relevantan samo za najbliže susede, N broj čvorova (odnosno kubita), γ parametar simetrične anizotropije, D jačina DM interakcije u z -pravcu i σ_i^α ($\alpha = x, y$) su Paulijeve matrice za i -ti čvor, date u sledećoj formi:

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.32)$$

Za $\gamma = 1$ i $D = 0$ (2.31) se svodi na Izingov model, dok je za $\gamma = D = 0$ reč o XX modelu [145]. Ako se vrednost parametra anizotropije nalazi u intervalu $0 < \gamma \leq 1$, modeli pripadaju Izingovoj klasi univerzalnosti, a za $N \rightarrow \infty$ dolazi do kvantnog faznog prelaza pri kritičnoj vrednosti parametra γ [178].

Međutim, s obzirom na činjenicu da je jedan od ciljeva ovog segmenta doktorata istraživanje ponašanja kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti pri povećanju veličine sistema, biće neophodno načiniti malu korekciju modela. Kako metoda kvantne renormalizacije grupe zahteva da polazni i efektivni hamiltonijan, dobijen nakon izvršenih nužnih transformacija, ispoljavaju svojstvo samosličnosti, u model ćemo uvrstiti π -rotaciju oko x -ose za sve parne čvorove, dok ćemo neparne ostaviti netaknutim [143]. Rečeno je da ćemo metod implementirati polazeći od tropinske baze, tako da ćemo najpre razmotriti hamiltonijan oblika [143, 145, 179–181]:

$$H = \frac{J}{4} \sum_{i=1}^2 \left((1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + D (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \right). \quad (2.33)$$

Jedan od glavnih razloga zbog kog koristimo upravo hamiltonijan (2.33) prilikom tretiranja kubitnih sistema jeste taj što svi modelni parametri (integral izmene, parametar anizotropije i jačina DM interakcije) mogu biti eksperimentalno kontrolisani, kako je i predočeno u uvodu [125, 126]. Osim toga, korisno je istaći nekoliko činjenica vezanih za uzeti oblik hamiltonijana. U hamiltonijanu (2.33) ne figurišu spinski operatori već Paulijeve matrice, a s obzirom na vezu:

$$S^\alpha = \frac{\hbar}{2} \sigma^\alpha, \quad \alpha = x, y, z, \quad (2.34)$$

jasno je i da smo u trenutnom razmatranju uzeli uprošćenje $\hbar = 1$. Takođe, ako se osvrnemo na prvobitni oblik hamiltonijana (2.31), jasno je da je za pozitivne vrednosti konstante izmene reč o antiferomagnetnom uređenju, dok u slučaju negativnih vrednosti govorimo o feromagnetnom uređenju. U ovom kontekstu možemo naglasiti i da je konstanta DM interakcije upotrebljena u hamiltonijanima (2.31) i (2.33) zapravo veličina koja jačinu DM interakcije izražava relativno u odnosu na konstantu izmene J :

$$D \longrightarrow \frac{D}{J}. \quad (2.35)$$

Upravo ovakav izbor odgovoran je za činjenicu da svojstvena stanja hamiltonijana (2.33) neće eksplicitno zavisiti od parametra J .

Na osnovu izraza za konkurentnost (2.20) i relativnu entropiju koherentnosti (2.26), što su upravo veličine čije ponašanje želimo da ispitamo u odabranom sistemu, uočavamo da najpre moramo doći do matrice gustine sistema. Matrica gustine će nadalje biti spominjana u kontekstu relevantnog stanja sistema upravo zbog činjenice da se u kvantnoj mehanici ona odomaćila kao podesno sredstvo za rešavanje brojnih problema, ekvivalentno pristupu vektora stanja [182]. S obzirom na to da njena upotreba često uveliko olakšava razmatrani problem, ova metoda može se sresti u modernoj atomskoj fizici, prilikom opisivanja rasejanja, u laserskoj fizici, statističkoj fizici i brojnim drugim oblastima [87, 183, 184].

Kako ćemo razmatrati ponašanje sistema na nultoj temperaturi, na kojoj se sistem nalazi u osnovnom stanju, matricu gustine računaćemo shodno obrascu:

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad (2.36)$$

gde je $|\Psi\rangle$ svojstveni vektor koji odgovara osnovnom stanju hamiltonijana. Dakle, najpre je neophodno naći svojstvene vektore i svojstvene vrednosti hamiltonijana (2.33).

Najpogodniji metod za rad jeste upravo grupisanje spinskih matrica veličine 2×2 , pripisanih svakom od tri čvora, u prostor njihovog tenzorskog proizvoda. To podrazumeva da će hamiltonijan sistema od tri kubita biti dimenzija 8×8 ($2^N \times 2^N$, gde je N broj čvorova). Na ovaj način dolazimo do matrice forme hamiltonijana (2.33):

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) \\ 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 \\ \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.37)$$

kome odgovara dvostruko degenerisano osnovno stanje. Svojstvena vrednost energije koja odgovara datom osnovnom stanju je [143, 157]:

$$E_0 = -\frac{J}{\sqrt{2}}q, \quad (2.38)$$

a pripadni svojstveni vektori su:

$$|\Psi\rangle = \frac{\sqrt{D^2+1}}{\sqrt{2q}} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{iq}{\sqrt{2(-i+D)}} \\ -\frac{i\gamma}{-i+D} \\ 0 \\ \frac{iq}{\sqrt{2(-i+D)}} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad |\Psi'\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}(1-iD)}{q} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}\gamma}{q} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.39)$$

gde je $q = \sqrt{1+D^2+\gamma^2}$. Svojtveni vektori (2.39) mogu se prigodnije zapisati u standardnom bazu $\{|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, \dots\}$, kada se svode na oblike [143, 157]:

$$|\Psi\rangle = \frac{\sqrt{D^2+1}}{\sqrt{2q}} \left(-\frac{q}{\sqrt{2}(1+iD)} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\gamma}{1+iD} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - \frac{q}{\sqrt{2}(1+iD)} |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right) \quad (2.40)$$

i:

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{2} \left(-\frac{\sqrt{2}(1-iD)}{q} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - \frac{\sqrt{2}\gamma}{q} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right), \quad (2.41)$$

gde su $|\uparrow\rangle = |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ i $|\downarrow\rangle = |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ svojtveni vektori Paulijeve matrice σ^z . Izrazi (2.40) i (2.41) odgovaraju čistim stanjima i matricu gustine računamo u skladu sa relacijom (2.36). Ukoliko se sistem nalazi u stanju opisanom svojtvenim vektorom (2.40), pripadna matrica gustine biće [157]:

$$\rho = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{-1+iD}{2\sqrt{2}q} \\ 0 & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & \frac{\gamma^2}{2q^2} & 0 & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & 0 & 0 & \frac{\gamma(1-iD)}{2q^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{-1+iD}{2\sqrt{2}q} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1+iD}{2\sqrt{2}q} & \frac{\gamma(1+iD)}{2q^2} & 0 & -\frac{1+iD}{2\sqrt{2}q} & 0 & 0 & \frac{1+D^2}{2q^2} \end{bmatrix}, \quad (2.42)$$

dok će u slučaju svojtvenog vektora (2.41) ona biti:

$$\rho' = \begin{bmatrix} \frac{1+D^2}{2q^2} & 0 & 0 & \frac{iD-1}{2\sqrt{2}q} & 0 & \frac{\gamma(1-iD)}{2q^2} & \frac{iD-1}{2\sqrt{2}q} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{iD+1}{2\sqrt{2}q} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\gamma(1+iD)}{2q^2} & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & 0 & \frac{\gamma^2}{2q^2} & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & 0 \\ -\frac{iD+1}{2\sqrt{2}q} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{\gamma}{2\sqrt{2}q} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.43)$$

Već se može uočiti da su dijagonalni elementi obe matrice, iako na različitim pozicijama, isti, a može se napraviti i analogija između preostalih elemenata matrica, te ne čudi da obe daju iste rezultate u pogledu traženih veličina kvantne informatike. Stoga će nadalje biti korišćena matrica gustine (2.42).

Danas je poznato da brojni antiferomagnetici poseduju i magnetokristalnu anizotropiju, koja je određena interakcijom između orbitalnog stanja magnetnog jona i okružujućeg kristalnog

polja [185–187]. Kako polje ima simetriju kristalne rešetke, posredstvom ove interakcije orbitalni momenti se mogu veoma snažno kuplovati sa rešetkom. Na spinske momente se ova interakcija prenosi putem spin-orbitalne sprege, ali je taj uticaj dosta slabiji. Magnetokristalna anizotropija, koja je poznata i pod nazivom *single-ion* anizotropija, daje sledeći doprinos hamiltonijanu:

$$H_{\text{MK}} = JA \sum_{i=1}^3 (S_i^z)^2, \quad (2.44)$$

gde je A relativna jačina magnetokristalne anizotropije u odnosu na konstantu izmene J i može se u opštijem slučaju razlikovati od čvora do čvora. Hamiltonijanu (2.33) uticaj ove interakcije menja formu u:

$$H = \frac{J}{4} \sum_{i=1}^2 \left((1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + D(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \right) + \frac{JA}{4} \sum_{i=1}^3 (\sigma_i^z)^2, \quad (2.45)$$

sa pripadnim matricnim oblikom:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{3JA}{4} & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) & 0 \\ 0 & \frac{3JA}{4} & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) \\ 0 & \frac{J\gamma}{2} & \frac{3JA}{4} & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & \frac{3JA}{4} & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & \frac{3JA}{4} & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 - iD) \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & 0 & \frac{3JA}{4} & \frac{J\gamma}{2} & 0 \\ \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J\gamma}{2} & \frac{3JA}{4} & 0 \\ 0 & \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1 + iD) & 0 & 0 & \frac{3JA}{4} \end{bmatrix}. \quad (2.46)$$

Ispostavlja se da uplitanje magnetokristalne anizotropije daje trivijalan doprinos problemu s obzirom na to da dvostruko degenerisanom osnovnom stanju odgovara modifikovana vrednost energije:

$$E_0 = \frac{3JA}{4} - \frac{|J|q}{\sqrt{2}}, \quad (2.47)$$

ali su zato, za antiferomagnetike, svojstveni vektori identični prethodno dobijenim (2.40) i (2.41):

$$|\Psi\rangle = \frac{\sqrt{D^2 + 1}}{\sqrt{2}q} \left(-\frac{q|J|}{\sqrt{2}J(1 + iD)} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\gamma}{1 + iD} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - \frac{q|J|}{\sqrt{2}J(1 + iD)} |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right) \quad (2.48)$$

i:

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{2} \left(-\frac{\sqrt{2}J(1 - iD)}{q|J|} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - \frac{\sqrt{2}J\gamma}{q|J|} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right), \quad (2.49)$$

gde je q već definisano kao $q = \sqrt{1 + D^2 + \gamma^2}$. S obzirom na to da su dobijeni svojstveni vektori (2.48) i (2.49), koji se koriste za računanje matrice gustine i odabranih mera kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti, isti kao prethodni (2.40) i (2.41), jasno je da *single-ion* anizotropija neće uticati na veličine od interesa. Ovo smo mogli intuitivno očekivati usled trivijalnosti doprinosa *single-ion* anizotropije u slučaju $S = 1/2$. Naime, uočavamo da se doprinos anizotropije hamiltonijanu (2.33) svodi na dodavanje jedinične matrice pomnožene konstantom. Dakle, može se izvući zaključak da uplitanje magnetokristalne anizotropije ne utiče na kvantnu zamršenost i kvantnu koherentnost u slučaju $S = 1/2$.

Drugi modelni hamiltonijan koji će biti korišćen za ispitivanje veze između kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti jeste Hajzenbergov hamiltonijan XY spinskog lanca sa

asimetričnim odabirom anizotropije. U pitanju je sledeći hamiltonijan:

$$H = \frac{\tilde{J}}{4} \sum_{i=1}^2 \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + M \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \tilde{D} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \right), \quad (2.50)$$

gde M predstavlja konstantu novoizabrane anizotropije, a \tilde{J} i \tilde{D} su ponovo integral izmene i konstanta DM interakcije, respektivno. Ovakav hamiltonijan već je dat u formi prilagođenoj metodi kvantne renormalizacione grupe, odnosno uključuje neophodnu rotaciju. Možemo uočiti da se hamiltonijan (2.50) može jednostavnim transformacijama prevesti u prethodnu formu sa simetričnim izborom anizotropije (2.33):

$$\tilde{J} = (1 + \gamma)J, \quad \tilde{D} = \frac{D}{1 + \gamma}, \quad M = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}. \quad (2.51)$$

Međutim, treba primetiti da ova transformacija nije definisana u slučaju $\gamma = -1$, te nema smisla modelni hamiltonijan (2.50) spominjati u kontekstu opštijeg oblika hamiltonijana, već je jednostavno reč o modelu sa drugim vidom anizotropije. Matrična forma hamiltonijana (2.50) data je kao:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}(a - 2i\tilde{D}) & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}(a - 2i\tilde{D}) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}(a - 2i\tilde{D}) \\ 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\tilde{J}}{4}(a + 2i\tilde{D}) & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}(a - 2i\tilde{D}) \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 \\ \frac{\tilde{J}}{4}(a + 2i\tilde{D}) & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}b & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{J}}{4}(a + 2i\tilde{D}) & 0 & 0 & \frac{\tilde{J}}{4}(a + 2i\tilde{D}) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.52)$$

gde su $a = 1 - M$ i $b = 1 + M$. Ovom hamiltonijanu takođe odgovara dvostruko degenerisano osnovno stanje, a pripadna svojstvena vrednost energije je:

$$E_0 = -\frac{1}{2}\tilde{J}m, \quad m = \sqrt{1 + 2\tilde{D}^2 + M^2}, \quad (2.53)$$

dok su svojstveni vektori dati izrazima:

$$|\Psi\rangle = \frac{\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}}{2m} \left(\frac{im}{2\tilde{D} + i(-1 + M)} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{i(1 + M)}{2\tilde{D} + i(-1 + M)} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \right. \\ \left. + \frac{im}{2\tilde{D} + i(-1 + M)} |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right) \quad (2.54)$$

i:

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{-1 + 2i\tilde{D} + M}{m} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - \frac{1 + M}{m} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right). \quad (2.55)$$

Uzimanjem asimetričnog oblika anizotropije u razmatranje, možemo očekivati da će i ponašanje kvantno-informatičkih veličina biti u izvesnoj meri drugačije nego što je to slučaj sa simetričnim izborom. Takođe, bićemo u mogućnosti da ispitamo šta se dešava u slučaju $M = +1$, što je tačka izopštena u prethodnom obliku (2.33). Matrice gustine koje odgovaraju svojstvenim vektorima (2.54) i (2.55) su:

$$\rho = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1+M}{4m} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} \\ 0 & -\frac{1+M}{4m} & \frac{(1+M)^2}{4m^2} & 0 & -\frac{1+M}{4m} & 0 & 0 & \frac{-2i\tilde{D}(1+M)-(M^2-1)}{4m^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1+M}{4m} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} & \frac{2i\tilde{D}(1+M)-(M^2-1)}{4m^2} & 0 & \frac{-2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} & 0 & 0 & \frac{4\tilde{D}^2+(-1+M)^2}{4m^2} \end{bmatrix} \quad (2.56)$$

i:

$$\rho' = \begin{bmatrix} \frac{4\tilde{D}^2+(-1+M)^2}{4m^2} & 0 & 0 & \frac{2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} & 0 & \frac{-2i\tilde{D}(1+M)-(M^2-1)}{4m^2} & \frac{2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1+M}{4m} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2i\tilde{D}(1+M)-(M^2-1)}{4m^2} & 0 & 0 & -\frac{1+M}{4m} & 0 & \frac{(1+M)^2}{4m^2} & -\frac{1+M}{4m} & 0 \\ \frac{-2i\tilde{D}+(-1+M)}{4m} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1+M}{4m} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.57)$$

respektivno, a nadalje će biti korišćena matrica (2.56), u skladu sa objašnjenjem datim u slučaju simetričnog izbora anizotropije.

2.5 Poređenje konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti u sistemima sa bazom od tri spina

Najpre ćemo razmatrati sistem od tri kubita i ustanoviti potencijalnu vezu između kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti. Relevantne veličine su parna konkurentnost i relativna entropija koherentnosti, date relacijama (2.20) i (2.26), respektivno. Naravno, ovde možemo naglasiti da ćemo relativnu entropiju koherentnosti računati u skladu sa uprošćenom relacijom:

$$C_{\text{re}}(\rho) = S(\rho_{\text{diag}}) \quad (2.58)$$

zbog činjenice da je za čista stanja, kakva i razmatramo, Fon Nojmanova entropija $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho) = 0$, što direktno sledi iz $\log_2(1) = 0$. Kao što vidimo iz relacije (2.20), za računanje konkurentnosti najpre je neophodno svesti matricu gustine sistema od tri kubita na redukovanu matricu gustine dvokubitnog sistema (videti prilog B.1). Ovo možemo učiniti na dva načina: računanjem matrice gustine vezane za podsistem prvog i trećeg spina, sumiranjem po stepenima slobode središnjeg spina, ili računanjem matrice gustine podsistema koji čine srednji i jedan od njemu susednih spinova, dok se parcijalni trag traži po preostalom spinu [143]. Kako se ispostavlja da oba načina daju iste rezultate, redukovane matrice dobićemo na prvi način.

2.5.1 XY model sa DM interakcijom i simetričnom anizotropijom

U slučaju simetričnog izbora anizotropije, matrici gustine (2.42) odgovara redukovana matrica gustine oblika [157]:

$$\rho^{13} = \text{Tr}_2 \rho = \begin{bmatrix} \frac{\gamma^2}{2q^2} & 0 & 0 & \frac{\gamma(1-iD)}{2q^2} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{\gamma(1+iD)}{2q^2} & 0 & 0 & \frac{1+D^2}{2q^2} \end{bmatrix}, \quad (2.59)$$

a konkurentnost se dobija na osnovu matrice:

$$R = \rho^{13} \tilde{\rho}^{13} = \begin{bmatrix} \frac{(1+D^2)\gamma^2}{2q^4} & 0 & 0 & \frac{(1-iD)\gamma^3}{2q^4} \\ 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & 0 \\ \frac{(1+iD)(1+D^2)\gamma}{2q^4} & 0 & 0 & \frac{(1+D^2)\gamma^2}{2q^4} \end{bmatrix}, \quad (2.60)$$

odnosno njenih svojstvenih vrednosti:

$$\lambda_1 = \frac{1}{4}, \quad \lambda_2 = \frac{(1+D^2)\gamma^2}{q^4}, \quad \lambda_3 = \lambda_4 = 0. \quad (2.61)$$

U skladu sa relacijom (2.20), konkurentnost poprima oblik [143, 157]:

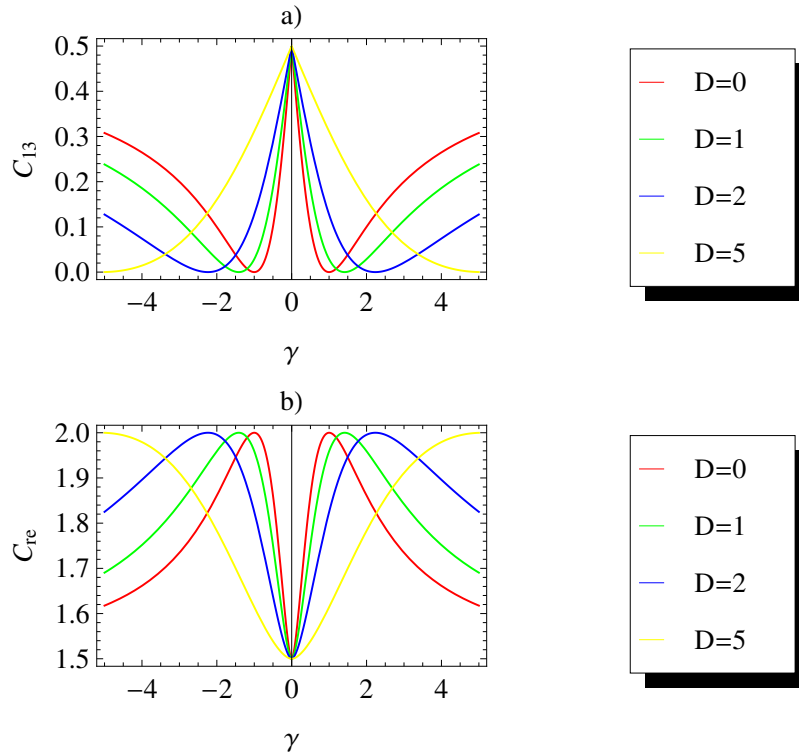
$$C_{13} = \sqrt{\frac{1}{4}} - \sqrt{\frac{(1+D^2)\gamma^2}{q^4}}. \quad (2.62)$$

Osim toga, izraz za relativnu entropiju koherentnosti u slučaju simetrične anizotropije nađen je u skladu sa relacijom (2.58) [145, 157]:

$$\begin{aligned} C_{\text{re}} &= -\text{Tr}(\rho_{\text{diag}} \log_2 \rho_{\text{diag}}) = \\ &= -2\frac{1}{4} \log_2 \frac{1}{4} - \frac{\gamma^2}{2q^2} \log_2 \left(\frac{\gamma^2}{2q^2} \right) - \frac{1+D^2}{2q^2} \log_2 \left(\frac{1+D^2}{2q^2} \right) = \\ &= 1 - \frac{\gamma^2}{2q^2} \log_2 \left(\frac{\gamma^2}{2q^2} \right) - \frac{1+D^2}{2q^2} \log_2 \left(\frac{1+D^2}{2q^2} \right). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Poređenje ponašanja konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti u zavisnosti od parametara XY modela sa DM interakcijom i simetričnom anizotropijom u trokubitnom sistemu prikazano je na slici 2.1. Može se zaključiti da za male vrednosti parametra anizotropije γ dolazi do povećanja konkurentnosti i smanjenja relativne entropije koherentnosti sa povećanjem parametra DM interakcije D . U ovom segmentu praktično DM interakcija utiče na kreaciju konkurentnosti i poništavanje koherentnosti. Sa druge strane, za velike vrednosti parametra anizotropije γ sa povećanjem parametra DM interakcije D dolazi do povećanja relativne entropije koherentnosti i smanjenja konkurentnosti.

Možemo uočiti da se kod konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti manifestuje obrnuto ponašanje. Maksimumi jedne veličine nalaze se na pozicijama koje odgovaraju minimumima druge veličine. Dakle, možemo zaključiti da isti procesi koji utiču na povećanje jednog svojstva kvantne informatike utiču na smanjenje drugog. Može se primetiti i da je vrednost minimuma konkurentnosti $C_{13} = 0$, dok postoji izvesna rezidualna vrednost relativne entropije koherentnosti $C_{\text{re}} = 1.5$, koja odgovara njenoj minimalnoj vrednosti. Osim toga, obe veličine ispoljavaju simetrično ponašanje u odnosu na y -osu, što je posledica simetričnog izbora anizotropije određene parametrom γ . Naravno, treba naglasiti da je razmatrana konkurentnost parna i da samim time opisuje zamršenost između dva spina. Iako je na slici prikazan tek uži interval parametra anizotropije γ , to je učinjeno samo zbog preglednosti grafika i izneseni zaključci važe i na širem intervalu.



Slika 2.1: Zavisnost konkurentnosti a) i relativne entropije koherentnosti b) od parametra anizotropije γ i parametra DM interakcije D u slučaju tri kubita.

2.5.2 XY model sa DM interakcijom i asimetričnom anizotropijom

Sada ćemo preći na asimetrični izbor anizotropije, za koji redukovani oblik matrice gustine (2.56) postaje:

$$\rho^{13} = \begin{bmatrix} \frac{(1+M)^2}{4m^2} & 0 & 0 & \frac{-2i\tilde{D}(1+M)-(M^2-1)}{4m^2} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{2i\tilde{D}(1+M)-(M^2-1)}{4m^2} & 0 & 0 & \frac{4\tilde{D}^2+(-1+M)^2}{4m^2} \end{bmatrix} \quad (2.64)$$

i odgovara mu matrica:

$$R = \rho^{13} \tilde{\rho}^{13} = \begin{bmatrix} \frac{(4\tilde{D}^2+(-1+M)^2)(1+M)^2}{8m^4} & 0 & 0 & -\frac{(1+M)^3(-1+2i\tilde{D}+M)}{8m^4} \\ 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & 0 \\ \frac{(-1+2i\tilde{D}+M)(1+M)(i(-1+M)+2\tilde{D})^2}{8m^4} & 0 & 0 & \frac{(1+M)^2(4\tilde{D}^2+(-1+M)^2)}{8m^4} \end{bmatrix}, \quad (2.65)$$

sa pripadnim svojstvenim vrednostima:

$$\lambda_1 = \frac{1}{4}, \quad \lambda_2 = \frac{(1+M)^2(1+4\tilde{D}^2-2M+M^2)}{4m^4}, \quad \lambda_3 = \lambda_4 = 0. \quad (2.66)$$

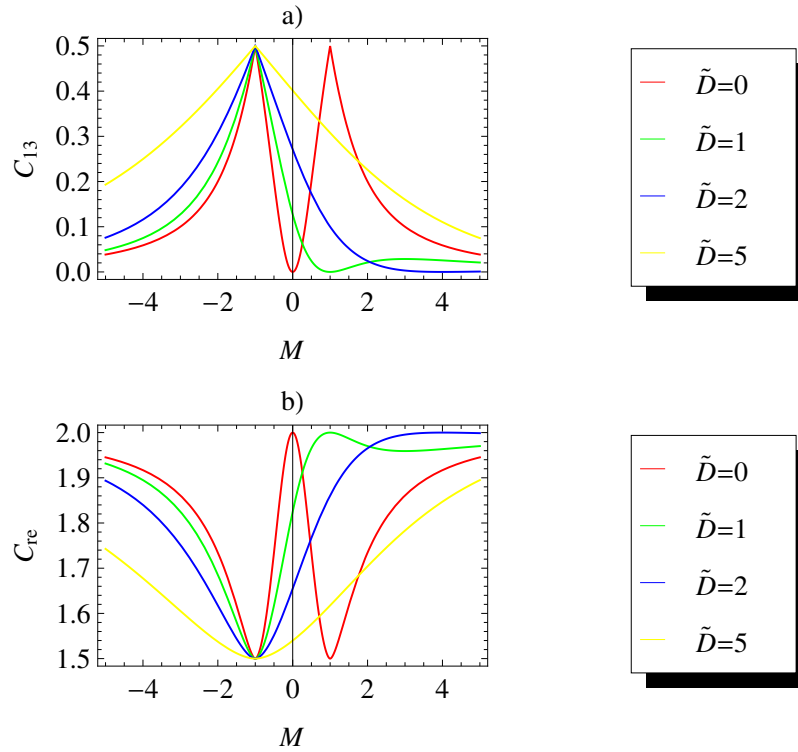
U ovom slučaju, konkurentnost se ponaša u skladu sa relacijom:

$$C_{13} = \sqrt{\frac{1}{4}} - \sqrt{\frac{(1+M)^2(1+4\tilde{D}^2-2M+M^2)}{4m^4}}, \quad (2.67)$$

dok je relativna entropija koherentnosti data izrazom:

$$C_{re} = 1 - \frac{(1+M)^2}{4m^2} \log_2 \left(\frac{(1+M)^2}{4m^2} \right) - \frac{4\tilde{D}^2+(-1+M)^2}{4m^2} \log_2 \left(\frac{4\tilde{D}^2+(-1+M)^2}{4m^2} \right). \quad (2.68)$$

Poređenje ponašanja konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti u zavisnosti od parametara XY modela sa DM interakcijom i asimetričnom anizotropijom u slučaju tri kubita prikazano je na slici 2.2.



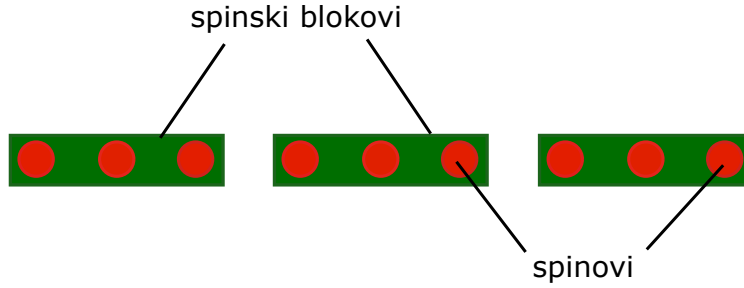
Slika 2.2: Zavisnost konkurentnosti a) i relativne entropije koherentnosti b) od parametra anizotropije M i parametra DM interakcije \tilde{D} u slučaju tri kubita.

Obrnuto ponašanje konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti uočava se i u slučaju asimetričnog odabira anizotropije na slici 2.2. Maksimumi jedne veličine odgovaraju minimumima druge. Stoga možemo zaključiti da promena oblika anizotropije ne utiče na prethodno utvrđenu korelaciju između dve kvantno-informatičke veličine. Opet možemo uočiti da postoji rezidualna vrednost relativne entropije koherentnosti $C_{re} = 1.5$ u njenom minimumu. Ovoga puta maksimumi konkurentnosti su oštiri u odnosu na minime relativne entropije koherentnosti. Sem toga, y -osa sada ne predstavlja osu simetrije, izuzev u slučaju $\tilde{D} = 0$, kada obe veličine ispoljavaju simetrično ponašanje u odnosu na y -osu. Ovo je posledica odabranog oblika anizotropije.

2.6 Uopštenje ustanovljene veze na veće sisteme

Sledeći cilj, koji se prirodno nameće, jeste provera važenja utvrđene korelacije između konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti u slučaju sistema koji se sastoje od većeg broja spinova. U tu svrhu koristiće se metod kvantne renormalizacione grupe, u kom će baza biti trokubitna. Sam metod široko je rasprostanjen u problematici sistema spinskih lanaca usled toga što rad u visokodimenzionim prostorima prebacuje u kompaktnije, nižedimenzione prostore od svega nekoliko spinova [145]. U nastavku će biti korišćen pristup Lea Kadanova (*Leo Kadanoff*), baziran na blok-matricama [152, 188]. Na slici 2.3 nalazi se šematski prikaz ideje metode na primeru sistema od devet spinova. Najpre je potrebno izvršiti razdvajanje hamiltonijana na blokovski H^B i međublokovski H^{BB} , a potom posebno razmatrati pojedinačan blok kako bismo došli do svojstvenih stanja blokovskog hamiltonijana. Od dobijenih

stanja, s obzirom na to da uticaj temperature nije razmatran u ovom segmentu doktorata, izdvajamo upravo dvostruko degenerisano osnovno stanje, pomoću koga ćemo izgraditi bazis novog, renormalizovanog prostora. Na taj način se sistem od velikog broja spinova kontrakuje na sistem od svega nekoliko spinskih blokova, odnosno blok-spinova.



Slika 2.3: Šematski prikaz Kadanovljeve ideje u slučaju lanca od devet spinova. Lanac se deli na tri spinska bloka, od kojih svaki sadrži po tri spina.

2.6.1 XY model sa DM interakcijom i simetričnom anizotropijom

U slučaju simetričnog izbora anizotropije, polazni hamiltonijan:

$$H = \frac{J}{4} \sum_{i=1}^N \left((1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + D(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \right) \quad (2.69)$$

možemo zapisati u formi:

$$H = H^B + H^{BB}, \quad (2.70)$$

gde je H^B blokovski hamiltonijan [145, 157]:

$$H^B = \sum_{l=1}^{N/3} h_l^B, \quad (2.71)$$

sa

$$h_l^B = \frac{J}{4} \left((1 + \gamma) (\sigma_{l,1}^x \sigma_{l,2}^x + \sigma_{l,2}^x \sigma_{l,3}^x) - (1 - \gamma) (\sigma_{l,1}^y \sigma_{l,2}^y + \sigma_{l,2}^y \sigma_{l,3}^y) + D(\sigma_{l,1}^x \sigma_{l,2}^y + \sigma_{l,2}^x \sigma_{l,3}^y + \sigma_{l,1}^y \sigma_{l,2}^x + \sigma_{l,2}^y \sigma_{l,3}^x) \right), \quad (2.72)$$

a H^{BB} međublokovski hamiltonijan [145, 157]:

$$H^{BB} = \sum_{l=1}^{N/3} h_l^{BB}, \quad (2.73)$$

u kom je:

$$h_l^{BB} = \frac{J}{4} \left((1 + \gamma) \sigma_{l,3}^x \sigma_{l+1,1}^x - (1 - \gamma) \sigma_{l,3}^y \sigma_{l+1,1}^y + D(\sigma_{l,3}^x \sigma_{l+1,1}^y + \sigma_{l,3}^y \sigma_{l+1,1}^x) \right). \quad (2.74)$$

Da bismo izvršili mapiranje polaznog hamiltonijana (2.69) na renormalizovan prostor blok-spinova, neophodno je da iskoristimo sledeću transformaciju [188]:

$$H_{\text{eff}} = T^\dagger H T, \quad (2.75)$$

gde je:

$$T = \sum_l T_l, \quad (2.76)$$

pri čemu su operatori T_l i T_l^\dagger , koji deluju na l -ti spinski blok, dati relacijama:

$$T_l = |\Psi\rangle_l \langle \uparrow| + |\Psi'\rangle_l \langle \downarrow|, \quad T_l^\dagger = |\uparrow\rangle_l \langle \Psi| + |\downarrow\rangle_l \langle \Psi'|. \quad (2.77)$$

Ketovi $|\Psi\rangle_l$ i $|\Psi'\rangle_l$ su svojstveni vektori osnovnog stanja blokovskog hamiltonijana, (2.40) i (2.41), dok su $|\uparrow\rangle_l$ i $|\downarrow\rangle_l$ svojstvena stanja Paulijeve σ^z matrice pripisane blok-spinovima formiranim od tri spina:

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.78)$$

Operator T_l naziva se "operatorom ugrađivanja" (*embedding operator*) usled toga što uzima stanje blok-spina i prebacuje ga u stanje sistema od tri spina, dok je drugi "operator sažimanja" (*truncation operator*) s obzirom na to da stanje sistema od tri spina transformiše u stanje jednog blok-spina [188]. Drugim rečima, svrha delovanja ovih operatora jeste da osmodimenzioni sistem od tri spina pretvore u dvodimenzioni sistem od jednog blok-spina i obrnuto. Lako se može proveriti da za ove operatore važi $T_l^\dagger T_l = \mathbb{1}$, dok obrnuto ne važi, odnosno $T_l T_l^\dagger \neq \mathbb{1}$ [157]. Dakle, ovaj operator, koji vrši projekciju na prostor održanih stepeni slobode (sa polaznog sistema tri spina vraća se finalno na sistem od tri spina), nije unitaran [188].

Da bismo došli do konačnog oblika efektivnog hamiltonijana, samosličnog polaznom (2.69), potrebno je utvrditi na koji način se, posredstvom (2.75), transformišu sve Paulijeve matrice. Naime, Paulijeve σ^x matrice koje odgovaraju prvom i trećem čvoru l -tog spinskog bloka transformišu se u skladu sa [143, 157]:

$$T_l^\dagger \sigma_{l,i}^x T_l = \varepsilon_i \sigma_l'^x + \xi_i \sigma_l'^y, \quad i = 1, 3, \quad (2.79)$$

gde su:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = \frac{1 + D^2 + \gamma}{\sqrt{2(1 + D^2)q}}, \quad \xi_1 = \xi_3 = \frac{-\gamma D}{\sqrt{2(1 + D^2)q}}. \quad (2.80)$$

U slučaju drugog čvora važi [143, 157]:

$$T_l^\dagger \sigma_{l,2}^x T_l = \varepsilon_2 \sigma_l'^x + \xi_2 \sigma_l'^y, \quad (2.81)$$

gde su odgovarajuće konstante:

$$\varepsilon_2 = -\frac{1}{2\sqrt{1 + D^2}} - \frac{\sqrt{1 + D^2}\gamma}{q^2}, \quad \xi_2 = \frac{D}{2\sqrt{1 + D^2}}. \quad (2.82)$$

Istu proceduru treba ponoviti i za Paulijeve σ^y matrice, te u slučaju prvog, drugog i trećeg čvora važi [143, 157]:

$$T_l^\dagger \sigma_{l,1}^y T_l = \mu_1 \sigma_l'^x + \nu_1 \sigma_l'^y, \quad T_l^\dagger \sigma_{l,2}^y T_l = \mu_2 \sigma_l'^x + \nu_2 \sigma_l'^y, \quad T_l^\dagger \sigma_{l,3}^y T_l = \mu_3 \sigma_l'^x + \nu_3 \sigma_l'^y, \quad (2.83)$$

gde su sad:

$$\mu_1 = \mu_3 = \frac{\gamma D}{\sqrt{2q}\sqrt{1 + D^2}}, \quad \nu_1 = \nu_3 = \frac{\gamma - 1 - D^2}{\sqrt{2q}\sqrt{1 + D^2}} \quad (2.84)$$

i:

$$\mu_2 = -\frac{D}{2\sqrt{1 + D^2}}, \quad \nu_2 = \frac{\sqrt{1 + D^2}\gamma}{q^2} - \frac{1}{2\sqrt{1 + D^2}}. \quad (2.85)$$

Ovako transformisanim Paulijevim matricama sada je neophodno zameniti matrice u polaznom hamiltonijanu (2.69). Za dobijanje efektivnog hamiltonijana relevantan je uticaj transformacija

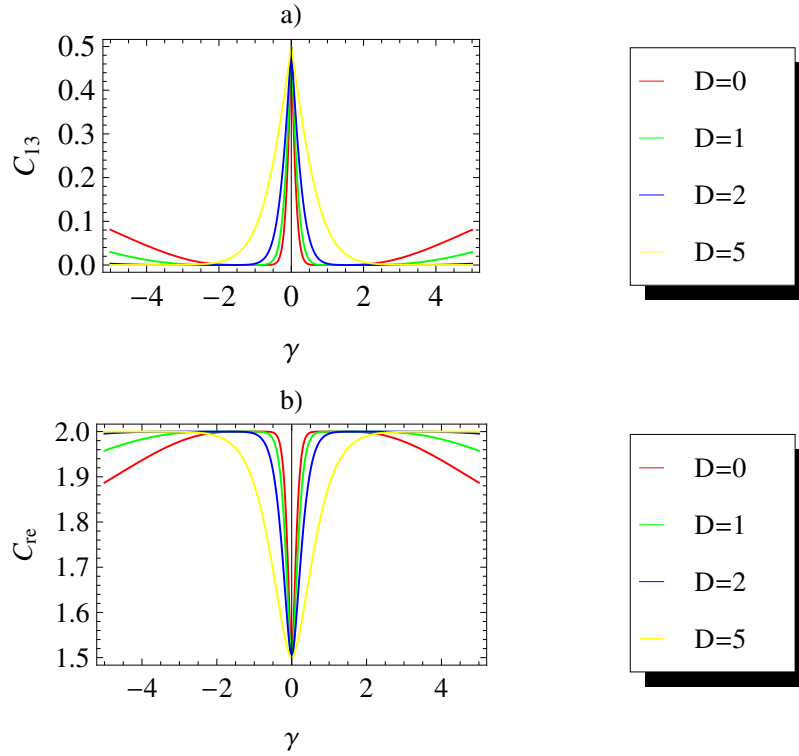
na međublokovski hamiltonijan, dok delovanjem na h_l^B jednostavno dolazimo do dijagonalizovanog hamiltonijana, čije dve svojstvene vrednosti odgovaraju energiji dvostruko degenerisanog osnovnog stanja hamiltonijana (2.33). Nakon elementarnog sređivanja dobijamo oblik efektivnog hamiltonijana [143, 145, 157]:

$$H_{\text{eff}} = \frac{J'}{4} \sum_{j=1}^{N/3} \left((1 + \gamma') \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - (1 - \gamma') \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + D' (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^y + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^x) \right), \quad (2.86)$$

gde su renormalizovani parametri:

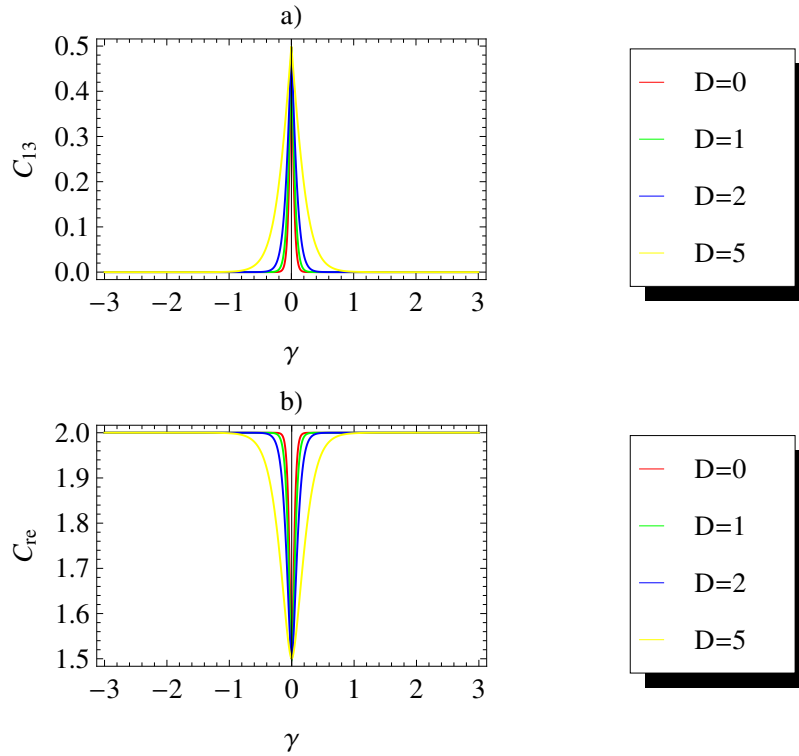
$$J' = \frac{1 + D^2 + 3\gamma^2}{2q^2} J, \quad \gamma' = \frac{3\gamma + 3\gamma D^2 + \gamma^3}{1 + D^2 + 3\gamma^2}, \quad D' = -D. \quad (2.87)$$

Tražene kvantno-informatičke veličine u sistemima sa više od tri spina sada se dobijaju zamenom inicijalnih parametara renormalizovanim u izrazima (2.62) i (2.63). Poređenje konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti predstavljeno je na slikama 2.4 i 2.5 u slučaju sistema sa 9 i sa 27 čvorova, respektivno.



Slika 2.4: Konkurentnost a) i relativna entropija koherentnosti b) u zavisnosti od parametra anizotropije γ i parametra DM interakcije D u sistemu od 9 spinova.

Uočavamo da je obrnuto ponašanje dve veličine održano i u slučaju većih dimenzija sistema. Minimumi jedne veličine odgovaraju maksimumima druge i obrnuto. Vidimo da kad $N \rightarrow \infty$ konkurentnost ima nenultu vrednost samo za $\gamma = 0$. Sa druge strane, koherentnost ima minimalnu vrednost samo u toj tački, dok za ostale vrednosti parametra γ ima maksimalnu vrednost $C_{re} = 2$. Osim toga, izoštravanje maksimuma konkurentnosti i minimuma relativne entropije koherentnosti sugerise da za $N \rightarrow \infty$ model prolazi kroz kvantni fazni prelaz pri vrednosti $\gamma = 0$ [143, 145]. S obzirom na to da divergencija konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti ukazuje na kvantni fazni prelaz I vrste, a divergencija prvog izvoda ovih veličina na kvantni fazni prelaz II vrste [143, 145, 189], u našem slučaju evidentno je da se radi o faznom prelazu II vrste. Takođe, uočljivo je da parametar DM interakcije D nema uticaja na kritično ponašanje, te variranje ovog parametra neće prouzrokovati kvantni fazni prelaz.



Slika 2.5: Konkurentnost a) i relativna entropija koherentnosti b) u zavisnosti od parametra anizotropije γ i parametra DM interakcije D u sistemu od 27 spinova.

2.6.2 XY model sa DM interakcijom i asimetričnom anizotropijom

Sada ćemo razmatrati hamiltonijan sa asimetričnim oblikom anizotropije. U skladu sa prethodno opisanom procedurom, najpre dolazimo do načina na koji se transformišu Paulijeve matrice. Operatore T_l i T_l^\dagger kreiramo pomoću svojstvenih stanja (2.54) i (2.55) hamiltonijana (2.50). U slučaju Paulijeve σ^x matrice, transformacije su sledećeg oblika:

$$T_l^\dagger \sigma_{l,1}^x T_l = \varepsilon_1 \sigma_l'^x + \xi_1 \sigma_l'^y, \quad T_l^\dagger \sigma_{l,2}^x T_l = \varepsilon_2 \sigma_l'^x + \xi_2 \sigma_l'^y, \quad T_l^\dagger \sigma_{l,3}^x T_l = \varepsilon_3 \sigma_l'^x + \xi_3 \sigma_l'^y, \quad (2.88)$$

gde su odgovarajući parametri:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = \frac{\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}}{2m} - \frac{M^2 - 1}{2m\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}}, \quad \xi_1 = \xi_3 = -\frac{\tilde{D}(1 + M)}{m\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}} \quad (2.89)$$

i:

$$\varepsilon_2 = \frac{M - 1}{2\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}} - \frac{(1 + M)\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}}{2m^2}, \quad \xi_2 = \frac{\tilde{D}}{\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1 + M)^2}}. \quad (2.90)$$

Analogno je za σ^y matrice ustanovljeno da se transformišu u skladu sa izrazom:

$$T_l^\dagger \sigma_{l,1}^y T_l = \mu_1 \sigma_l'^x + \nu_1 \sigma_l'^y, \quad T_l^\dagger \sigma_{l,2}^y T_l = \mu_2 \sigma_l'^x + \nu_2 \sigma_l'^y, \quad T_l^\dagger \sigma_{l,3}^y T_l = \mu_3 \sigma_l'^x + \nu_3 \sigma_l'^y, \quad (2.91)$$

sa odgovarajućim parametrima:

$$\mu_1 = \mu_3 = \frac{\tilde{D}(1+M)}{m\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1+M)^2}}, \quad \nu_1 = \nu_3 = -\frac{\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1+M)^2}}{2m} - \frac{M^2 - 1}{2m\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1+M)^2}} \quad (2.92)$$

i:

$$\mu_2 = -\frac{\tilde{D}}{\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1+M)^2}}, \quad \nu_2 = \frac{(1+M)\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1+M)^2}}{2m^2} + \frac{M-1}{2\sqrt{4\tilde{D}^2 + (-1+M)^2}}. \quad (2.93)$$

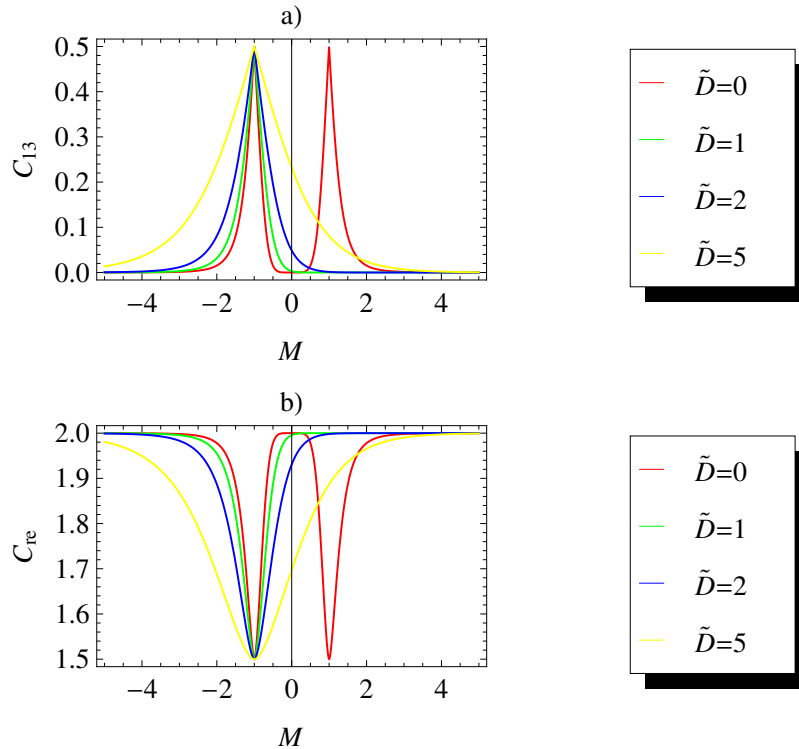
Shodno navedenim transformacijama, dolazimo do efektivnog hamiltonijana oblika:

$$H_{\text{eff}} = \frac{J'}{4} \sum_{i=1}^{N/3} \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + M' \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \tilde{D}' (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \right), \quad (2.94)$$

gde su renormalizovani parametri dati relacijama:

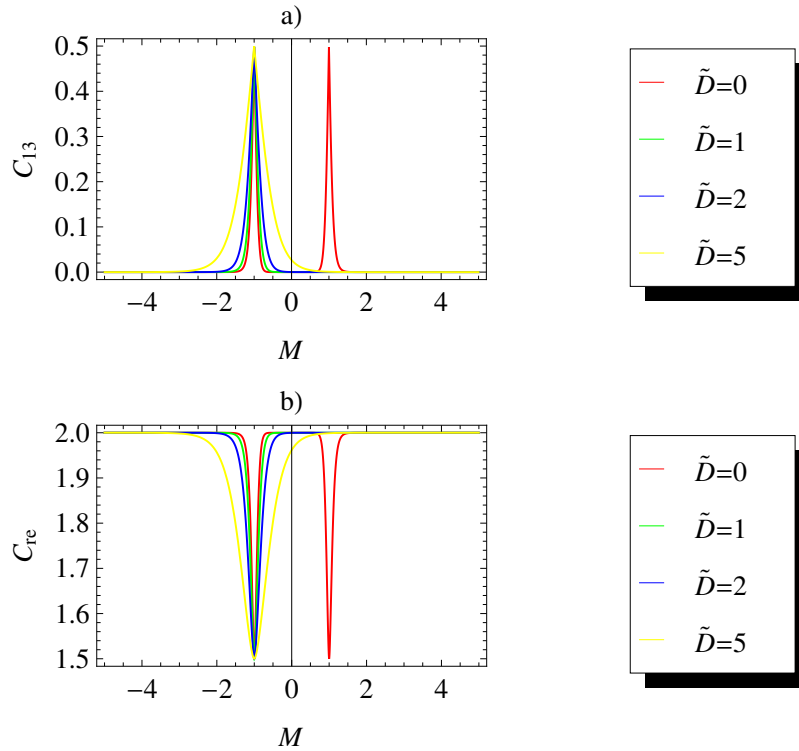
$$J' = J \frac{1 + \tilde{D}^2(2+M)}{m^2}, \quad M' = \frac{\tilde{D}^2 + 2\tilde{D}^2 M + M^3}{1 + 2\tilde{D}^2 + \tilde{D}^2 M}, \quad \tilde{D}' = -\tilde{D} \frac{1 + \tilde{D}^2 + M + M^2}{1 + 2\tilde{D}^2 + \tilde{D}^2 M}. \quad (2.95)$$

Dakle, odgovarajući hamiltonijan je, u skladu sa nužnim uslovom, samosličan polaznom. Na osnovu datih renormalizovanih parametara, pronađene su i zavisnosti konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti od parametara anizotropije M i DM interakcije \tilde{D} u slučajevima sistema od 9 i 27 čvorova. Rezultati su prikazani na slikama 2.6 i 2.7.



Slika 2.6: Konkurentnost a) i relativna entropija koherentnosti b) u zavisnosti od parametra anizotropije M i parametra DM interakcije \tilde{D} u sistemu od 9 spinova.

Obrnuto ponašanje perzistentno je i u slučaju sistema većih dimenzija sa asimetričnom anizotropijom. Dakle, veličina sistema ne utiče na korelaciju između konkurentnosti i relativne

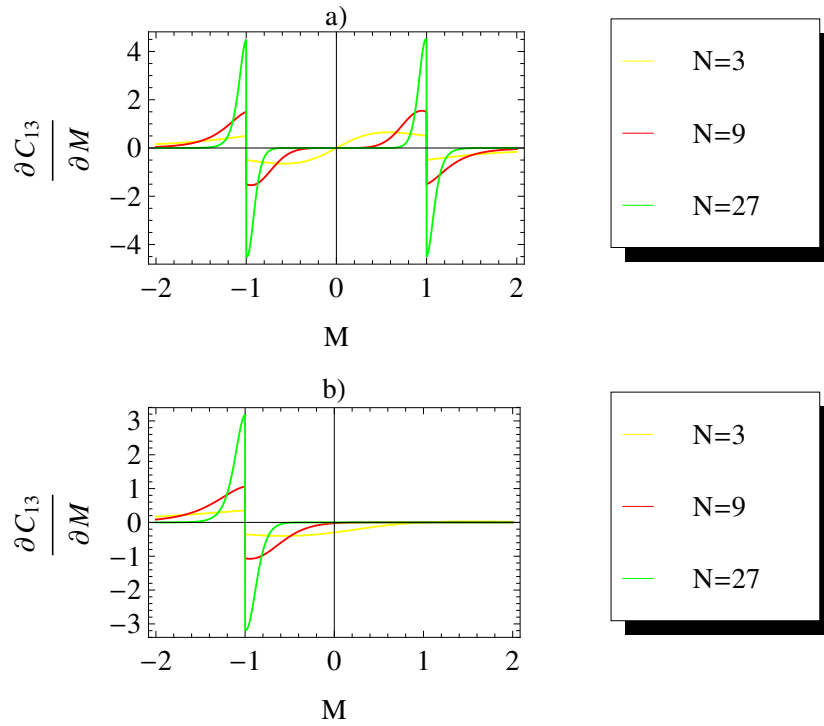


Slika 2.7: Konkurentnost a) i relativna entropija koherentnosti b) u zavisnosti od parametra anizotropije M i parametra DM interakcije \tilde{D} u sistemu od 27 spinova.

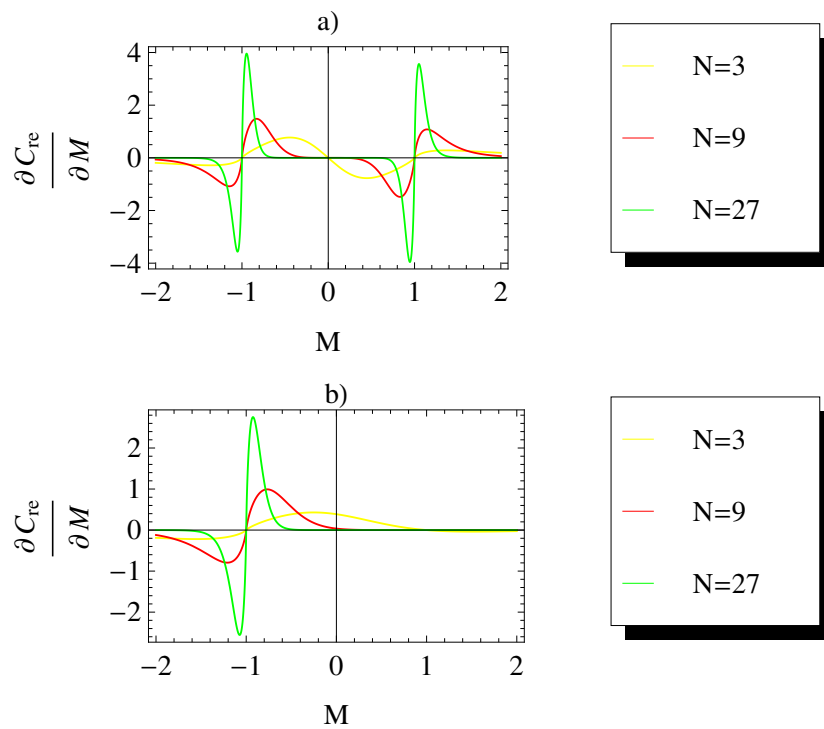
entropije koherentnosti. Osim toga, i u ovom slučaju uočava se izoštravanje minimuma i maksimuma razmatranih veličina, što ukazuje na činjenicu da parametar asimetrične anizotropije takođe može prouzrokovati kvantni fazni prelaz u modelu. Ovoga puta kritična vrednost parametra asimetrične anizotropije $M = -1$ odgovara prethodno uočenom kvantnom faznom prelazu u simetričnom slučaju za $\gamma = 0$. Međutim, može se registrovati još jedna kritična tačka, koja odgovara vrednostima parametara $\tilde{D} = 0$ i $M = +1$, te u ovom slučaju, za razliku od simetričnog izbora anizotropije, DM interakcija itekako može indukovati kvantni fazni prelaz.

Naime, ovaj prelaz nije se mogao uočiti u prethodnom slučaju, prikazanom na slikama 2.4 i 2.5. Ako se izvrši odabir $\gamma = D = \tilde{D} = 0$, hamiltonijani (2.31) i (2.69), koji odgovaraju simetričnom izboru anizotropije pre i nakon izvršenja π -rotacije, imaju isti oblik kao hamiltonijan sa asimetričnom anizotropijom za vrednosti $M = +1$ i $M = -1$, respektivno. Izvršena rotacija, koja povezuje hamiltonijane (2.31) i (2.69), omogućava nam da pređemo sa jednog izbora parametra M na drugi (odnosno sa $M = +1$ na $M = -1$ i obrnuto). Dakle, model sa asimetričnim izborom anizotropije obuhvata i jedan i drugi hamiltonijan sa simetričnom anizotropijom za $\gamma = 0$. Stoga se u simetričnom slučaju detektuje samo jedan kritični pik, dok asimetrični registruje dva. S obzirom na to da kvantni fazni prelazi odgovaraju divergenciji prvih izvoda konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti po parametru anizotropije M , što je prikazano na slikama 2.8 i 2.9, poput slučaja simetrične anizotropije [143, 145, 189], oba prelaza sa slika 2.6 i 2.7 su fazni prelazi II vrste.

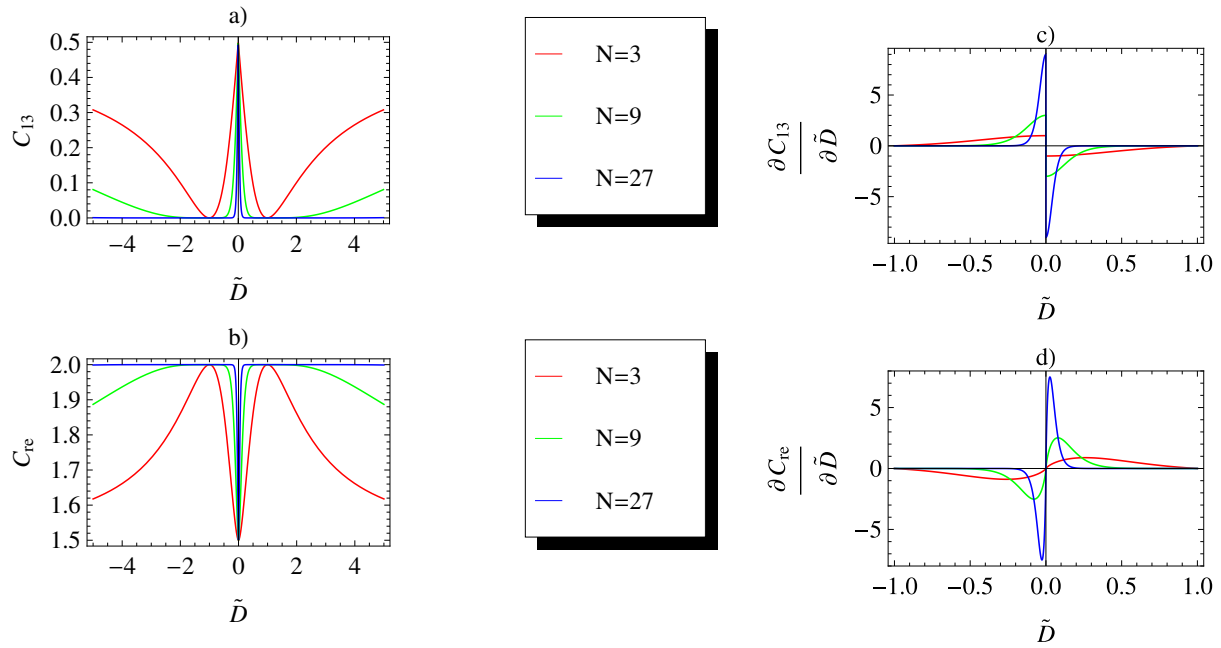
U radu je ispitana i zavisnost konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti od parametra DM interakcije \tilde{D} , pri čemu se parametar M održavao konstantnim. Rezultati su prikazani na slici 2.10. Uočavamo da za male vrednosti parametra \tilde{D} dolazi do povećanja koherentnosti i smanjenja konkurentnosti, dok pri većim vrednostima ovog parametra dolazi do obrnutog ponašanja. Za $\tilde{D} = 0$ konkurentnost dostiže svoju maksimalnu vrednost, dok je pak kod relativne entropije koherentnosti ona minimalna. Takođe, primetno je da je parametar DM interakcije sposoban da indukuje kvantni fazni prelaz II vrste u slučaju $M = +1$, te se on može



Slika 2.8: Prvi izvod konkurentnosti u zavisnosti od parametra anizotropije M za dve vrednosti parametra DM interakcije a) $\tilde{D} = 0$ i b) $\tilde{D} = 1$. Primećuje se da će za beskonačno dugačke lance ($N \rightarrow \infty$) doći do divergencije prvog izvoda konkurentnosti po parametru anizotropije M .



Slika 2.9: Prvi izvod relativne entropije koherentnosti u zavisnosti od parametra anizotropije M za dve vrednosti parametra DM interakcije a) $\tilde{D} = 0$ i b) $\tilde{D} = 1$. Primećuje se da će za beskonačno dugačke lance ($N \rightarrow \infty$) doći do divergencije prvog izvoda relativne entropije koherentnosti po parametru anizotropije M .



Slika 2.10: Konkurentnost i relativna entropija koherentnosti u zavisnosti od parametra DM interakcije \tilde{D} pri izboru parametra anizotropije $M = +1$ prikazani su na figurama a) i b), dok su prvi izvodi ovih veličina prikazani na figurama c) i d), respektivno.

registrovati pri vrednosti $\tilde{D} = 0$.

Zaključak, koji ostaje konzistentan, jeste da se obrnuto ponašanje parne konkurentnosti i relativne entropije koherentnosti održava u svim razmatranim problemima. U slučaju XY modela sa DM interakcijom, uočava se da ova korelacija ne zavisi od vrednosti parametara anizotropije i DM interakcije, kao ni od izbora same anizotropije i veličine sistema. Kako je iznimno važno održati obe veličine u razmatranom sistemu, očito je neophodno postići izvestan balans između njih.

Glava 3

Mogućnosti primene generalizovanog Frenkel-Kontorova modela u realnim fizičkim problemima

Tajnu sinhronih efekata prvi je razotkrio Kristijan Hajgens (*Christiaan Huygens*) šezdesetih godina sedamnaestog veka prilikom izučavanja ponašanja dva sata sa klatnom okačena o isti zid [190]. Nakon toga efekat je uočen i u prirodi, kod svitaca koji sinhronizuju svoju svetlost [191], ali i kod brojnih drugih životinjskih grupacija [192, 193], prilikom glasnog aplaudiranja, kojim pokazujemo oduševljenje u koncertnim halama i pozorištima [194, 195], i u drugim slučajevima, što je omogućilo njegovu primenu u savremenim elektromehaničkim i optoelektronskim oscilatorima [196]. Iako sama sinhronizacija obuhvata mnoštvo različitih primera, danas je od posebnog interesa ispitivanje dinamičkog zaključavanja, do kog dolazi kada se sistemi sa karakterističnom unutrašnjom frekvencijom podvrgnu uticaju spoljašnjih periodičnih sila [197, 198]. Tada je dinamika sistema određena nadmetanjem dve frekventne skale: frekvencije koja odgovara primenjenoj spoljašnjoj periodičnoj sili i karakteristične frekvencije sistema. Makroskopski odziv ovakvog sistema biće u formi stepeništa, pri čemu stepenici nose naziv Šapirovi stepenici, prema naučniku koji ih je prvi i otkrio, Sidniju Šapiru (*Sidney Shapiro*) [199].

Do današnjeg dana Šapirovi stepenici teorijski i eksperimentalno su uočeni u raznim koloidnim sistemima [198, 200–203], sistemima talasa gustine naboja [204–206], vorteksnim rešetkama¹ [207–209], sistemima Džozefsonovih spojeva [210–214] i drugim. Naravno, kada je reč o odzivnoj funkciji, u kojoj se ogledaju spomenuti stepenici, njen odabir zavisi od sistema koji se razmatra. Najčešće je reč o zavisnosti srednje brzine čestica od primenjene konstantne (dc) sile ili o volt-amperskoj karakteristici. Ono što je zajedničko za oba tipa odzivnih funkcija jeste da se na njima jasno uočavaju ne samo Šapirovi stepenici već i prelaz između stacionarnog režima, u kom nije prisutno kolektivno kretanje i srednja brzina (odnosno struja u slučaju ispitivanja volt-amperske karakteristike) jednaka je nuli, i dinamičkog režima, kada kolektivno kretanje postaje izraženo i srednja brzina (odnosno struja) poprima nenultu vrednost [205, 206, 215–217].

Model koji je bio u mogućnosti da uspešno reprodukuje opisano ponašanje u brojnim sistemima kondenzovane materije, mikro- i nanotehnologiji u poslednjih nekoliko decenija jeste upravo Frenkel-Kontorova (FK) model podvrgnut uticaju spoljašnjih periodičnih sila [218–220]. Sam model danas se uspešno koristi prilikom opisivanja dinamike Džozefsonovih spojeva [221–224], DNK lanaca [225], talasa gustine naboja [215, 226, 227], koloidnih sistema [198, 200–203], dielektrika, dinamike zidova između domena u feromagnetima [219] i u brojnim drugim slučajevima. S obzirom na to da jednodimenzioni FK model opisuje lanac identičnih čestica u supstratnom potencijalu, koje interaguju sa svojim najbližim susedima, zanimljivo je što jedan u biti jednostavan model može biti iskorišćen za reprodukovanje rezultata u brojnim realnim fizičkim problemima. U slučaju kada je međučestični potencijal harmonijski, a supstratni potencijal sinusoidalni, reč je o standardnom FK modelu, koji je u prethodnom periodu detaljno istražen [226]. Posebno je značajno ispitivanje disipativnog FK modela² podvrgnutog

¹U superprovodnicima druge vrste, pri poljima jačim od određene kritične vrednosti, dolazi do prodiranja polja kroz materijal na određenim mestima koja nose naziv vorteksi. Vorteksne rešetke predstavljaju formacije u kojima ulogu čvorova rešetke preuzimaju baš vorteksi. Za superprovodnike druge vrste karakteristično je postojanje još jednog kritičnog polja, veće jačine od prethodnog, pri kom dolazi do prodiranja primenjenog magnetnog polja kroz celokupan materijal, kada on gubi svoja superprovodna svojstva.

²Disipativni FK model podrazumeva postojanje člana negativnog predznaka (suprotnog smera delovanja u odnosu na dc silu) srazmernog brzini čestice u jednačinama kretanja. Ukoliko je konstanta srazmernosti, koja odgovara jačini disipacije, velika u poređenju sa masom čestica, govorimo o jako prigušenom režimu, dok je u suprotnom slučaju reč o slabo prigušenom režimu. U

uticaju konstantnih (dc) i periodičnih (ac) sila u jako prigušenom [228–232] i slabo prigušenom režimu [233–235].

Decenijama su se istraživanja bazirala upravo na standardnom FK modelu ili nekom generalizovanom FK modelu sa harmonijskim međučestičnim potencijalom i različitim oblicima deformacionog periodičnog supstratnog potencijala koji su u oba slučaja podvrgnuti uticaju periodičnih sila. Osim toga, sporadično je ispitivana i dinamika FK modela sa nekoliko tipova neharmonijskog međučestičnog potencijala - sa izvesnim nekonveksnim oblicima interakcionog potencijala [236, 237], kao i sa Morsovim (*Morse potential*) [238] i Todinim (*Toda potential*) [239] interakcionim potencijalom. Takođe, neharmonijska forma međučestičnog potencijala u upotrebi je i prilikom modeliranja Džozefsonovih spojeva [240], kao i brojnih drugih sistema [241]. S obzirom na to da je harmoničnost po pravilu često narušena u prirodi, potpuno je jasno postojanje potrebe za dodatnim istraživanjem modela sa neharmonijskim tipom interakcije između čestica. Smisljeno je zaključiti da bi temeljnije ispitivanje uticaja različitih formi neharmonijskog međučestičnog potencijala na dinamiku FK modela podvrgnutog uticaju periodičnih sila moglo imati presudan uticaj za njegovu primenu na realne fizičke sisteme.

Glavni cilj ovog segmenta doktorata biće upravo ispitivanje kako zamena standardne harmonijske međučestične interakcije odabranim neharmonijskim ali konveksnim oblicima utiče na dinamiku FK modela. Konkretno će akcenat biti na ispitivanju svojstava jako prigušenog FK modela sa sinusoidalnim supstratnim potencijalom i konveksnim neharmonijskim međučestičnim potencijalima koji zavise samo od rastojanja između najbližih suseda. Odabrani su međučestični potencijali forme polinoma četvrtog stepena i eksponencijalne forme, koji nalikuju potencijalima korišćenim u referencama [242] i [243], respektivno. Zarad mogućnosti poređenja, u nastavku će biti reprodukovani već postojeći rezultati vezani za standardni FK model i istaknute glavne sličnosti i razlike između njih i generalizovanih FK modela ispitivanih u sklopu doktorske disertacije. Pritom će pristup zadatku biti baziran na analizi odzivne funkcije, ali i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta (*Lyapunov exponent*). Naime, najveći Ljapunovljev eksponent podesna je zamena odzivnoj funkciji prilikom ispitivanja dinamike FK modela zbog veće senzitivnosti na registrovanje Šapirovih stepenika [230], ali i činjenice da ukazuje na prisustvo ili odsustvo haosa u sistemu [226].

S obzirom na to da je navedeno da se FK model pod dejstvom spoljašnjih periodičnih sila uspešno koristi za dualni opis brojnih kompleksnijih problema, poput sistema Džozefsonovih spojeva, koloidnih sistema i sistema talasa gustine naboja, jedan od ciljeva ovog segmenta doktorata jeste ispitivanje svojstava FK modela sa dva tipa neharmonijske interakcije i mogućnosti njegove primene za poređenje sa konkretnim eksperimentalnim rezultatima u srodnim sistemima. Stoga će na samom kraju ovog segmenta biti predstavljeni dostupni eksperimentalni rezultati u navedenim sistemima, koji će biti upoređeni sa rezultatima generalizovanih FK modela korišćenih u doktoratu zarad potvrđivanja dualne prirode ovih problema. Rezultati predstavljeni u nastavku mogu se naći u sklopu objavljenog rada [244].

3.1 Svojstva Frenkel-Kontorova modela

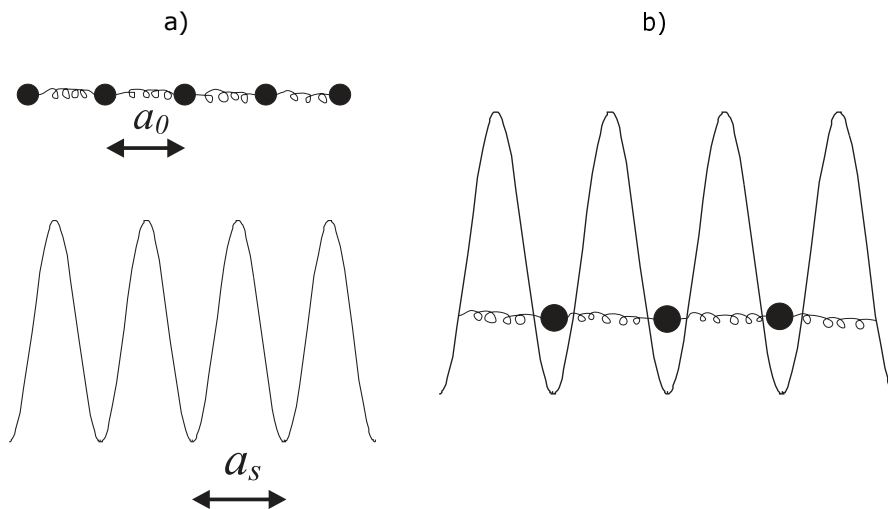
U skladu sa ranijom definicijom, energija FK modela data je izrazom:

$$H = \sum_j (V(u_j) + W(u_j, u_{j+1})), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.1)$$

gde je u_j pozicija j -te čestice sistema, N ukupan broj čestica, a $V(u_j)$ i $W(u_j, u_{j+1})$ supstratni potencijal i potencijal koji odgovara interakciji između najbližih suseda, respektivno. Kao što

slučaju kada bi ovako dodat član imao pozitivan predznak (isti smer kao smer delovanja dc sile), umesto disipacije bilo bi reči o upumpavanju energije u sistem.

je rečeno, ovo poglavlje doktorata bavi se modelima sa međučestičnim potencijalom koji zavisi samo od rastojanja između susednih čestica $W(u_j, u_{j+1}) = W(u_{j+1} - u_j)$. Osim toga, samo konveksni međučestični potencijali biće razmatrani u nastavku, pa se dodaje uslov $W''(u) > 0$.



Slika 3.1: Takmičenje između dve dužinske skale a) oblikuje ravnotežno stanje Frenkel-Kontorova modela definisano parametrom ω b). Slika je preuzeta iz [245].

Možemo uočiti da sa jedne strane međučestični potencijal W favorizuje uniformno rastojanje a_0 među česticama, dok sa druge strane supstratni potencijal V sa periodom a_s teži da zarobi čestice na dnu potencijalnih jama [226]. Takvo ponašanje za posledicu ima takmičenje među spomenutim dužinskim skalama a_0 i a_s , što često u fizici nazivamo i frustracijom. Prikaz ove situacije nalazi se na slici 3.1. Ravnotežna konfiguracija³ postiže se kada se sile koje deluju na svaku česticu izbalansiraju, odnosno za:

$$\frac{\partial H}{\partial u_j} = 0. \quad (3.2)$$

Među važnim parametrima FK modela nalazi se i srednje međučestično rastojanje konfiguracije (*winding number*) ω , definisano relacijom:

$$\omega = \lim_{(N-M) \rightarrow \infty} \frac{u_N - u_M}{N - M}. \quad (3.3)$$

Serž Obri (*Serge Aubry*) je za konveksne modele pokazao da svaka konfiguracija sa minimumom energije ima dobro definisano srednje međučestično rastojanje ω , ali i da za svaki realni broj ω postoji bar jedna konfiguracija sa minimalnom energijom [226].

S obzirom na to da se u ovom doktoratu razmatraju samo homogeni modeli, kod kojih periodični supstratni potencijal $V(u_j)$ sa periodom $a_s = 1$ i međučestični potencijal $W(u_{j+1} - u_j)$ ne zavise od izbora indeksa j , konfiguracija $\{u_j\}$ mora biti invarijantna na izvesne celobrojne transformacije. Dakle, ako je neka odabrana konfiguracija $\{u_j\}$ konfiguracija sa minimumom energije, onda je to i:

$$\sigma_{r,m}\{u_j\} = \{u_{j+r} + m\}, \quad (3.4)$$

gde su r i m proizvoljni celi brojevi. Dok r definiše renumerisanje čestica, parametar m određuje prostornu celobrojnu translaciju. Za datu konfiguraciju sa minimumom energije $\{u_j\}$ kaže se da je uvek rotaciono uređena [226], što znači da je, za svaku simetrijsku transformaciju oblika

³Konfiguracija modela $\{u_j\}$, gde je j skup uzastopnih prirodnih brojeva, predstavlja realan niz, bilo da je on konačan ili beskonačan, koji definiše položaje čestica u_j .

(3.4), nova konfiguracija $\sigma_{r,m}\{u_j\}$ ili manja od polazne konfiguracije (za $r\omega + m < 0$) ili veća (za $r\omega + m > 0$)⁴.

Osnovno stanje modela definisao je Serž Obri kao rekurentnu konfiguraciju⁵ sa minimumom energije [226]. Tada za svaku realnu vrednost srednjeg međučestičnog rastojanja ω postoji bar jedno osnovno stanje sa srednjim rastojanjem ω i pripadnom energijom po čestici $\epsilon(\omega)$, koja je kontinualna funkcija. Definirano osnovno stanje može biti samerljivo i njemu tada odgovaraju racionalne vrednosti srednjeg međučestičnog rastojanja, dok nesamerljiva osnovna stanja povezujemo sa iracionalnim vrednostima parametra ω . Samerljive strukture možemo tumačiti u sledećem maniru: kao strukture sa jasno definisanim srednjim međučestičnim rastojanjem $\omega = p/q$, pri čemu su p i q prosti celi brojevi, koje imaju prosečno q čestica u p potencijalnih jama. U nastavku rada bavićemo se samerljivim strukturama sa unapred zadatim vrednostima srednjeg međučestičnog rastojanja. Zaključci izvedeni u ovom segmentu primenljivi su ne samo na standardni FK model nego i u slučaju generalizovanih FK modela razmatranih u nastavku doktorata.

3.2 Dinamika Frenkel-Kontorova modela podvrgnutog uticaju ac i dc sila

Posmatraćemo sad uticaj spoljašnje periodične sile:

$$F(t) = F_{dc} + F_{ac} \cos(2\pi\nu_0 t), \quad (3.5)$$

koja se sastoji od dc sile F_{dc} i ac sile amplitude F_{ac} i odgovarajuće frekvencije $\nu_0 = T^{-1}$, pri čemu je T njen period. Najpre ćemo razmatrati standardni FK model, kod kog je supstratni potencijal sinusoidalne forme [226]:

$$V(u_j) = \frac{K}{(2\pi)^2} (1 - \cos(2\pi u_j)), \quad (3.6)$$

gde K definiše visinu barijere supstratnog potencijala, a međučestični potencijal ima harmonijsku formu:

$$W(u_{j+1} - u_j) = \frac{1}{2} (u_{j+1} - u_j - a_0)^2, \quad (3.7)$$

pri čemu je a_0 dužina neistegnute opruge. S obzirom na to da se u ovom radu razmatra jako prigušeni slučaj, u kom dolazi do zanemarivanja masenog člana, odgovarajuće jednačine kretanja biće oblika:

$$\dot{u}_j = \nabla^2 u_j - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j) + F(t), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.8)$$

gde je ∇^2 diskretni laplasijan na rešetki [246, 247]:

$$\nabla^2 u_j = u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j. \quad (3.9)$$

Već je istaknuto da se ovaj deo doktorata bavi striktno jednodimenzionim jako prigušenim FK modelom sa konveksnim oblicima međučestičnog potencijala, te je, u skladu sa time, dinamika sistema oblikovana poštovanjem Midltonovog pravila o zabrani zaobilaska⁶ [247, 248].

⁴Konfiguracija $\{u_j\}$ je veća od neke druge konfiguracije $\{v_j\}$ jedino ako je $u_j > v_j$ za svako j .

⁵Konfiguracija $\{u_j\}$ je rekurentna ako se mogu definisati simetrijske transformacije $\sigma_{r,m}$ sa $r \rightarrow \pm\infty$, čije dejstvo na polaznu konfiguraciju daje ponovo tu istu konfiguraciju.

⁶Midltonovo pravilo (*Middleton's no-passing rule*) odgovorno je za održanje poretka čestica tokom njihovog kretanja. Naime, ono ukazuje na to da dinamika lanca čestica zadržava uređenost kakvu je imala i u početnom trenutku, bez mogućnosti obrtanja redosleda konfiguracija u bilo kojoj tački, u bilo kom trenutku vremena. Sistem poseduje svojstvo asimptotske jedinstvenosti rešenja. Drugim rečima, u granici beskonačno dugog vremena ($t \rightarrow \infty$), srednje brzine određene samerljive strukture teže jedinstvenom rešenju. Pravilo je posledica upravo konveksnog izbora međučestičnog potencijala prilikom razmatranja jednodimenzionog jako prigušenog FK modela. Ispostavlja se da pravilo važi i u slučaju konačnih ali dovoljno dugih vremena, što će biti korisno u numeričkim proračunima.

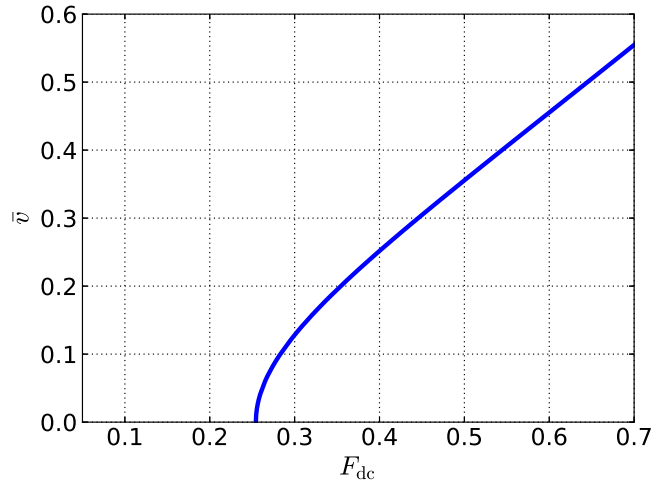
Jedna od najznačajnijih posledica ovog zaključka jeste i činjenica da su asimptotske srednje brzine čestica, koje su ne samo prostorno [226]:

$$v(t) = \lim_{(N-M) \rightarrow \infty} \frac{1}{N-M} \sum_{j=M}^{N-1} \dot{u}_j(t) \quad (3.10)$$

nego i vremenski usrednjene:

$$\bar{v} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} v(t) dt, \quad (3.11)$$

svih početnih konfiguracija zadatih istim srednjim međučestičnim rastojanjem ω jednake⁷. To konkretno znači da izbor polazne konfiguracije nema uticaja na srednju brzinu ravnotežnog stanja dok je god parametar ω jasno definisan.



Slika 3.2: Odzivna funkcija $\bar{v} = \bar{v}(F_{dc})$ standardnog FK modela podvrgnutog dejstvu dc sile za sledeći set parametara: $\omega = \frac{1}{2}$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0$. Reprodukovani su rezultati iz [230].

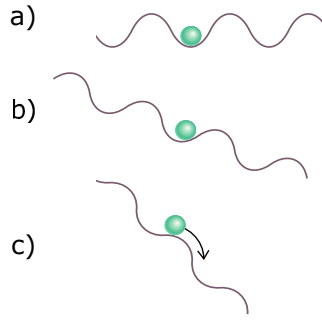
Prvo ćemo razmatrati šta se dešava u slučaju kada je $F_{ac} = 0$, odnosno kada u sistemu imamo samo uticaj dc sile F_{dc} , koja se ravnomerno povećava. Na slici 3.2 uočava se jasna separacija između dva režima, stacionarnog (*pinning regime*) i dinamičkog (*sliding regime*)⁸. Fazni prelaz odgovara kritičnoj vrednosti sile F_c , odnosno vrednosti dc sile F_{dc} koja razdvaja dva režima, pri čemu se u blizini prelaza srednja brzina ponaša u skladu sa relacijom [226]:

$$\bar{v} \sim (F_{dc} - F_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.12)$$

Da bismo objasnili ovakvo ponašanje, možemo dejstvo spoljašnje dc sile zamisliti kao naginjanje izbrazdane površine (usled dejstva supstratnog potencijala), u čijim jamama se nalaze čestice. Povećanjem vrednosti dc sile čestice ispoljavaju sve izraženije kretanje, ali tek nakon dostizanja kritične vrednosti F_c čestice su u stanju da napuste svoje pozicije i pređu u narednu dostupnu konfiguraciju. Ilustrativni prikaz ovakve situacije na uprošćenom primeru jedne čestice možemo videti na slici 3.3.

⁷Nadalje će se \bar{v} nazivati srednjom brzinom.

⁸Pod stacionarnim režimom podrazumeva se režim u kom čestice izvode male pomeraje oko svojih položaja, ali kolektivno kretanje izostaje i srednja brzina kretanja čestica jednaka je nuli. U dinamičkom režimu kolektivno kretanje je jasno izraženo i srednja brzina čestica veća je od nule.



Slika 3.3: Ilustracija delovanja spoljašnje sile. U slučaju a) na sistem ne deluje spoljašnja sila, dok u slučaju b) ona deluje, ali i dalje nije dovoljna da omogući kolektivno kretanje čestica (stacionarni režim). U slučaju c) spoljašnja sila je dostigla dovoljnu vrednost da omogući kolektivno kretanje (dinamički režim), što za situaciju sa slike znači da će čestica napustiti svoju jamu. Slika je preuzeta iz [249].

Naime, ukoliko se osvrnemo na izvor ovakvog ponašanja, moramo se vratiti na prirodu samerljivih osnovnih stanja definisanih parametrom ω . Ona može biti kontinualnog ili diskretnog karaktera [226]. U kontinualnom slučaju između dva proizvoljna osnovna stanja uvek smo u mogućnosti da uočimo još jedno osnovno stanje. Tada nije potrebno uložiti dodatnu energiju u sistem kako bi on prešao iz jednog stanja u drugo i uvek se nalazimo u dinamičkom režimu. Ukoliko se razmatra diskretan skup stanja, uvek možemo naći susedna stanja između kojih nema drugog osnovnog stanja. Tada je bez ulaganja konkretne vrednosti dodatne energije, koja nosi naziv Perls-Nabarova energijska barijera (*Peierls-Nabarro barrier*), nemoguće preći u susedno stanje [226]. U direktnoj vezi sa ovom energijom nalazi se vrednost minimalne homogene sile koja mora delovati na sistem da bi došlo do kolektivnog kretanja njegovih čestica, a koju dobijamo na osnovu balansiranja sila koje deluju na jednu česticu [226]:

$$V'(u_j) + \frac{\partial W(u_{j+1} - u_j) + \partial W(u_j - u_{j-1})}{\partial u_j} - F_c = 0. \quad (3.13)$$

Uočimo da je vrednost minimalne neophodne sile za prelaz u dinamički režim upravo jednaka kritičnoj vrednosti dc sile F_c kada se razmatra uticaj samo spoljašnje konstantne sile, odnosno za $F_{ac} = 0$.

Sada ćemo preći na razmatranje slučaja kada je $F_{ac} \neq 0$. S obzirom na to da ac sila polovinu perioda gura čestice u jednu stranu, dok ih drugu polovinu perioda vraća nazad, očigledno je da će prevladati kretanje u smeru duž kog deluje dc sila. Kako je ukupna spoljašnja sila koja deluje na lanac čestica rezultanta ac i dc dela, očekuje se i promena kritične vrednosti dc sile. Osim toga, u ovoj situaciji dolazi do takmičenja između dve konkurentne frekventne skale - jedne koja odgovara spoljašnjoj periodičnoj ac sili i druge koja odgovara kretanju u periodičnom supstratnom potencijalu pod dejstvom spoljašnje dc sile. Tada se dinamika modela karakteriše pojavom Šapirovih stepenika. Oni odgovaraju rezonantnim rešenjima jednačina kretanja (3.8). Naime, ako je konfiguracija $\{u_j(t)\}$ rešenje jednačina kretanja (3.8), onda je i:

$$\sigma_{r,m,s}\{u_j(t)\} = \left\{u_{j+r}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) + m\right\} \quad (3.14)$$

rešenje istih jednačina, koje odgovara početnim uslovima $\sigma_{r,m,s}\{u_j(t_0)\}$, pri čemu su parametri r i m već definisani kao celobrojni parametri renumerisanja čestica i prostorne translacije, respektivno, dok je s celobrojni parametar koji određuje vremensku translaciju. U verodostojnost simetrijske transformacije (3.14) možemo se uveriti jednostavnom zamenom:

$$\begin{aligned} \dot{u}_{j+r}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) &= u_{j+r+1}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) + u_{j+r-1}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) - 2u_{j+r}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) \\ &\quad - \frac{K}{2\pi} \sin\left(2\pi\left(u_{j+r}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) + m\right)\right) + F(t). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Kako je

$$\sin\left(2\pi\left(u_{j+r}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right) + m\right)\right) = \sin\left(2\pi u_{j+r}\left(t - \frac{s}{\nu_0}\right)\right)$$

i $F(t)$ funkcija vremenski periodična sa periodom $T = \nu_0^{-1}$, jednačine (3.8) i (3.15) su ekvivalentne i stoga je konfiguracija (3.14) takođe rešenje jednačina (3.8). Rešenje je rezonantno ako je invarijantno na simetrijsku transformaciju (3.14). Odgovarajuća srednja brzina tada se jednostavno računa:

$$\bar{v} = \frac{1}{sT} \frac{1}{N-M} \sum_{j=M}^{N-1} (u_j(t+sT) - u_j(t)) = \frac{\nu_0}{s} \frac{1}{N-M} \sum_{j=M}^{N-1} (u_{j+r}(t) + m - u_j(t)), \quad (3.16)$$

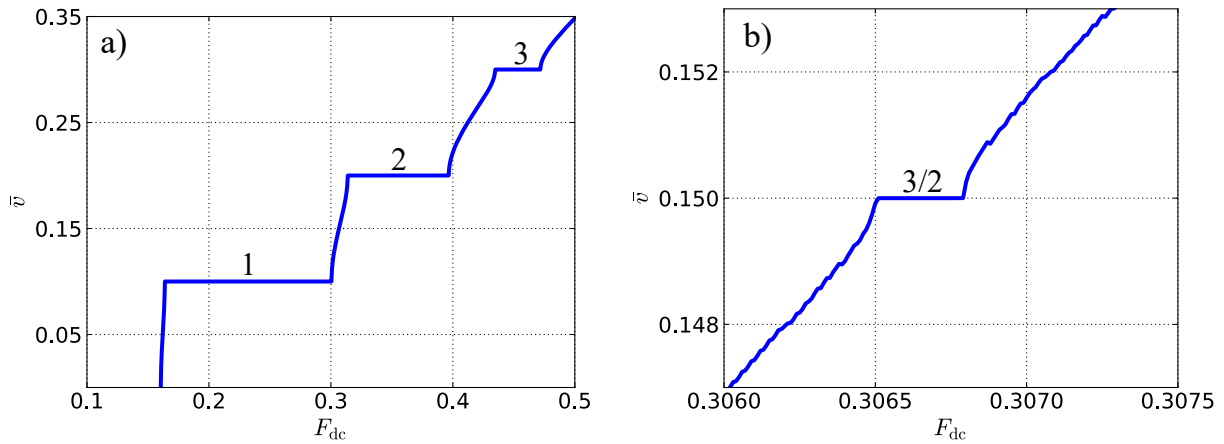
nakon čega se dobija prepoznatljiva forma [218, 226, 230, 250]:

$$\frac{\bar{v}}{\nu_0} = \frac{r\omega + m}{s}. \quad (3.17)$$

Jasno je da triplet (r, m, s) nije jedinstven. Za racionalnu vrednost $\omega = p/q$, kakve i razmatramo u ovom doktoratu, minimalni triplet (r, m, s) jeste takav da $rp+mq$ i s nemaju zajedničke delioce [226]. Međutim, čak i tada je samo parametar s jedinstven i Šapirove stepenike nazivamo harmonijskim ako je $s = 1$, dok su u slučaju $s > 1$ oni subharmonijski. U posebnom slučaju, kada je $s = 2$, stepenici su poluceli. Takođe, za $\omega = 1/q$ uvek se može odabrati $m = 0$, kada se (3.17) svodi na:

$$\bar{v} = \frac{r\omega}{s} \nu_0 \quad (3.18)$$

i stepenici se jednostavno numerišu na osnovu samo dva parametra: r i s , od kojih je za minimalni triplet parametar s jedinstveno određen.



Slika 3.4: Odzivna funkcija $\bar{v} = \bar{v}(F_{dc})$ standardnog FK modela podvrgnutog dejstvu ac+dc sila za sledeći skup parametara: $\omega = \frac{1}{2}$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$, $\nu_0 = 0.2$. Prikazan je širi interval, na kom se uočavaju harmonijski stepenici a), kao i zumiran interval sa numerisanim subharmonijskim stepenikom b). Reprodukovani su rezultati iz [250].

Na slici 3.4 nalazi se prikaz odzivne funkcije standardnog FK modela podvrgnutog uticaju i dc i ac sila. Uočavamo da je kritična vrednost dc sile manja nego u slučaju kada je razmatrano $F_{ac} = 0$ (slika 3.2). Takođe, obeleženi su i harmonijski stepenici a) i subharmonijski stepenik uočen na zumiranom delu b). Na osnovu prethodno utvrđenog pravila, možemo dati primer određivanja minimalnog tripleta za prvi harmonijski stepenik. S obzirom na to da je $\bar{v} = 0.1$ za ovaj stepenik, kao i $s = 1$ zbog harmonijske prirode, i znamo da su korišćeni parametri $\omega = 1/2$ i $\nu_0 = 0.2$, očito je da je na osnovu relacije (3.18) dobijen minimalni triplet $(r, m, s) =$

$(1, 0, 1)$. Preostalih tripleta, koji su rešenja jednačina (3.8), ima beskonačno mnogo i neki od njih su, na primer, $(-1, 1, 1)$, $(-891, 446, 1)$, $(233, -116, 1)$, $(-413, 207, 1)$... Analogno, za prvi poluceli stepenik dobijamo triplete $(1, 0, 2)$, $(-891, 446, 2)$, $(233, -116, 2)$, $(-313, 157, 2)$... Posle određene vrednosti dc sile ne dolazi više do pojavljivanja stepenika, već srednja brzina samo raste sa porastom dc sile.

Možemo naglasiti i da se za celobrojne vrednosti ω sistem jednačina kretanja (3.8) svodi na razmatranje jednačine kretanja jednočestičnog sistema:

$$\dot{u}_j = -V'(u_j) + F(t) = -\frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j) + F_{dc} + F_{ac} \cos(2\pi \nu_0 t). \quad (3.19)$$

U tom slučaju je pokazano da se subharmonijski stepenici ne manifestuju na grafiku odzivne funkcije, te tako pri celobrojnim vrednostima ω postoje samo harmonijski stepenici [226, 254, 255].

3.2.1 Jednačine kretanja Frenkel-Kontorova modela sa neharmonijskom međučestičnom interakcijom

Prvi model koji ćemo koristiti odabran je iz jednostavne potrebe da se utvrdi kako dodatni neharmonijski članovi u izrazu za međučestični potencijal utiču na dinamiku prethodno podrobno istraženog standardnog FK modela podvrgnutog dejstvu spoljašnjih periodičnih sila. Dakle, prva međučestična interakcija koja nas interesuje biće sledećeg oblika:

$$W(u_{j+1} - u_j) = \frac{g}{2}(u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{h}{3}(u_{j+1} - u_j)^3 + \frac{f}{4}(u_{j+1} - u_j)^4, \quad (3.20)$$

gde su konstante g , h i f odabrane tako da oblik međučestičnog potencijala (3.20) bude konveksan. Odgovarajuće jednačine kretanja su:

$$\dot{u}_j = g\nabla^2 u_j - h(\nabla^2 u_j)^2 + f(\nabla^2 u_j)^3 - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j) + F(t), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.21)$$

pri čemu je supstratni potencijal dat pređašnjom formom (3.6), a $F(t)$ primenjena ac+dc sila oblika (3.5). Parametre g , h i f ćemo u nastavku rada varirati i utvrditi na koji način utiču na dinamiku opisanog modela.

Drugi oblik neharmonijskog međučestičnog potencijala koji ćemo koristiti u nastavku rada jeste eksponencijalni:

$$W(u_{j+1} - u_j) = e^{-(u_{j+1} - u_j)}, \quad (3.22)$$

sa pripadnim jednačinama kretanja:

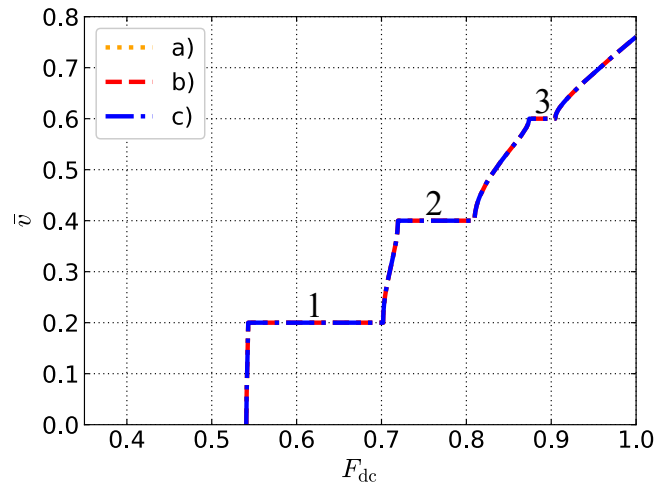
$$\dot{u}_j = e^{-(u_j - u_{j-1})} - e^{-(u_{j+1} - u_j)} - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j) + F(t), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.23)$$

pri čemu su supstratni potencijal i primenjena ac+dc sila već definisanih oblika.

Uočavamo da su oba oblika konveksnih neharmonijskih međučestičnih interakcija, (3.20) i (3.22), funkcije rastojanja između najbližih čestica i nezavisni od vremena, te je simetrija rešenja ista kao u slučaju standardnog FK modela (3.14), a odgovarajuće rezonantne brzine date su već utvrđenom relacijom (3.17). Dakle, stepenici će biti numerisani na isti način kao što je to bio slučaj sa standardnim FK modelom, a očekivano je i da se identične vrednosti rezonantnih brzina registruju na graficima odzivnih funkcija.

3.2.2 Odzivne funkcije generalizovanog Frenkel-Kontorova modela sa neharmonijskom međučestičnom interakcijom

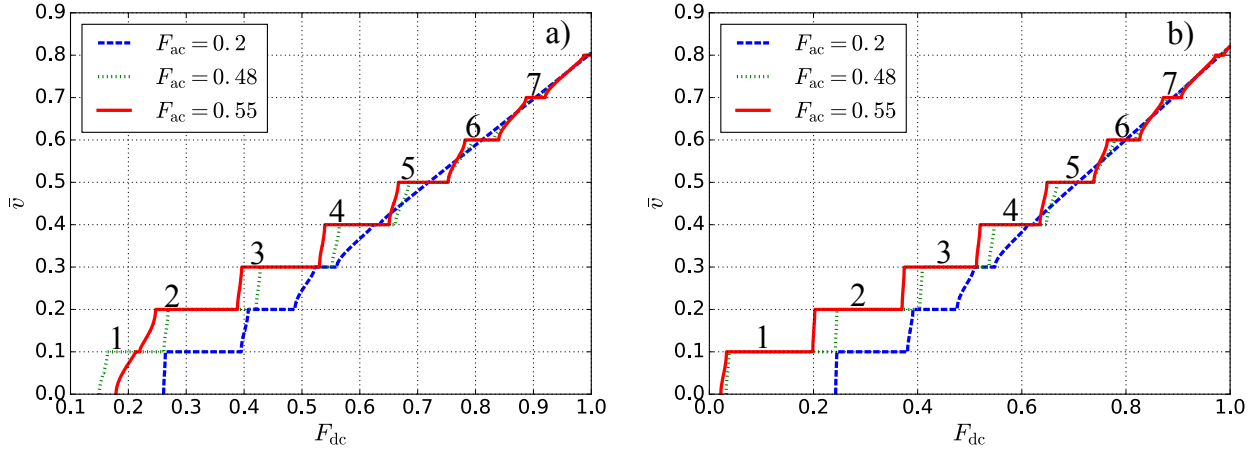
U ovoj sekciji biće prikazane odzivne funkcije FK modela sa neharmonijskim međučestičnim interakcijama (3.20) i (3.22) podvrgnutog dejstvu spoljašnjih periodičnih sila. Njih smo dobili integracijom jednačina kretanja (3.21) i (3.23) Runge-Kuta metodom četvrtog reda (*fourth order Runge-Kutta method*) [251–253] (videti prilog C.1), pri čemu je odabran broj čestica $N = 8$, sa nametnutim cikličnim graničnim uslovima ($u_0 = u_N - N\omega$, $u_{N+1} = u_1 + N\omega$) i definisanim parametrom srednjeg međučestičnog rastojanja ω . S obzirom na to da se razmatraju ciklični granični uslovi, kada čestice dođu do poslednje jame u nizu, one nastavljaju kretanje ka prvom minimumu supstratnog potencijala. Polazna konfiguracija zadata je kao $\{u_j\} = \{j\omega\}$, pri čemu je $j = 1, 2, \dots, N$, ali svakako postoje i drugi načini definisanja polazne konfiguracije, koji obuhvataju korišćenje programski ugrađenih generatora nasumičnih brojeva. U ovom kontekstu možemo napomenuti da je određena samerljiva struktura definisana odabirom broja čestica i broja jama supstratnog potencijala u kodu, te promena broja čestica N , dokle god je ista samerljiva struktura u pitanju, neće dovesti do promene grafika predstavljenih u nastavku doktorata za isti skup parametara modela. Korak dc sile korišćen u računu bio je $\Delta F_{dc} = 10^{-5}$, dok je vremenski korak Runge-Kuta metoda iznosio $\Delta t = 0.02\nu_0^{-1}$. Najpre je izvesno vreme neophodno pustiti sistem da evoluiru do dostizanja ravnotežnog stanja. Ispostavilo se da je dovoljno bilo uzeti vreme $t_1 = 100\nu_0^{-1}$. Potom se posmatra ponašanje sistema tokom vremena $t_2 = 1200\nu_0^{-1}$, nakon čega se vrši vremensko usrednjavanje.



Slika 3.5: Zavisnost srednje brzine od primenjene dc sile u tri slučaja: standardnog FK modela sa harmonijskom interakcijom (3.7) a), FK modela sa međučestičnim potencijalom oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) b) i FK modela sa eksponencijalnim međučestičnim potencijalom (3.22) c). Sve tri odzivne funkcije identične su za isti skup parametara. U ovom slučaju odabran je sledeći skup parametara: $\omega = 1.0$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$, $\nu_0 = 0.2$, kao i $g = h = f = 1$. Numerisani stepenici su harmonijski.

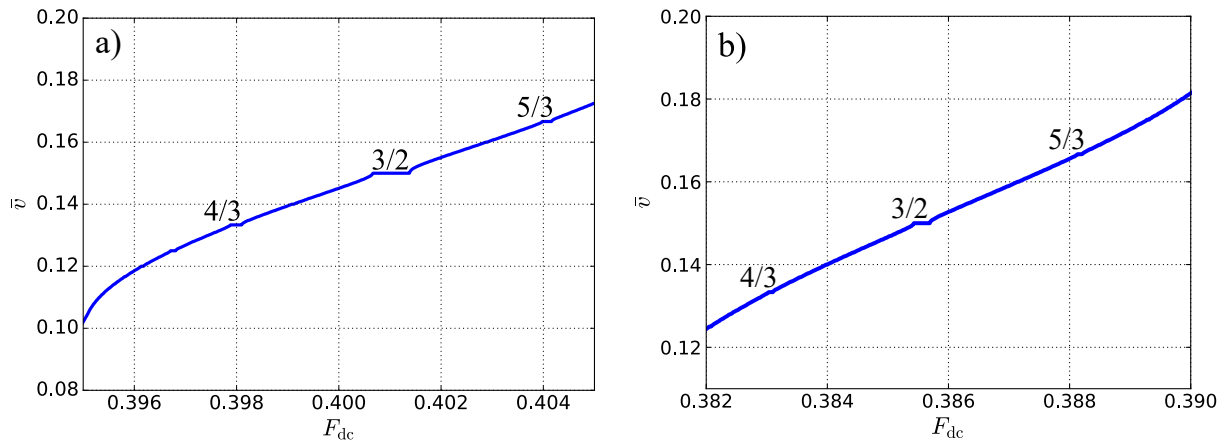
Prvo je ispitano ponašanje sistema u slučaju celobrojnih vrednosti parametra ω . Razmatrano je ponašanje pri različitim skupovima vrednosti parametara modela, i u širim i u užim intervalima dc sile, a na slici 3.5 prikazana je odzivna funkcija u slučaju $\omega = 1$, kada u svakoj jami supstratnog potencijala prosečno figuriše po jedna čestica sistema, dok su preostali parametri $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$ i $\nu_0 = 0.2$. Ustanovljeno je odsustvo subharmonijskih stepenika, kao i potpuno podudaranje odzivnih funkcija koje odgovaraju neharmonijskim izborima potencijala (3.20) i (3.22) i odzivne funkcije standardnog FK modela za isti skup parametara, što se može videti na slici 3.5. Ovaj zaključak u potpunosti je u skladu sa jednočestičnim opisom (3.19) [254, 255], te možemo reći da se, u slučaju celobrojnih vrednosti ω , ne može očekivati dodavanje novih stepeni slobode zamenom harmonijskog međučestičnog potencijala neharmonijskim

jskim oblicima (3.20) i (3.22). Harmonijski stepenici su na slici numerisani u skladu sa relacijom (3.18).



Slika 3.6: Zavisnost srednje brzine od primenjene dc sile u slučaju dva izbora neharmonijskog međučestičnog potencijala: oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) sa parametrima $g = h = f = 1$ a) i eksponencijalnog oblika (3.22) b). Izabran je sledeći skup parametara: $\omega = 1/2$, $K = 4.0$ i $\nu_0 = 0.2$. Numerisani stepenici su harmonijski.

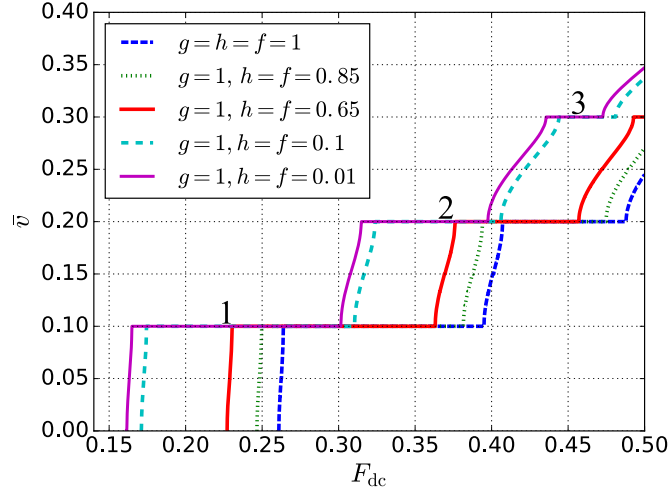
Sledeći predmet ispitivanja bile su odzivne funkcije koje odgovaraju jednačinama kretanja (3.21) i (3.23) u slučaju srednjeg međučestičnog rastojanja $\omega = 1/2$, što podrazumeva konfiguraciju u kojoj se u proseku u svakoj potencijalnoj jami nalaze po dve čestice sistema. Rezultati ispitivanja prikazani su na slici 3.6. Svi obeleženi stepenici su harmonijski i numerisani su u skladu sa relacijom (3.18). Uočavamo da su ispitivane funkcije dosta slične slučaju standardnog FK modela prikazanog na slici 3.4. Analogno standardnom slučaju, zumiranjem segmenata grafika na slici 3.6 uočava se postojanje subharmonijskih stepenika, koji su prikazani na slici 3.7.



Slika 3.7: Zumirani segmenti grafika na slici 3.6 u slučaju međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) a) i eksponencijalnog međučestičnog potencijala (3.22) b). Numerisani stepenici su subharmonijski.

I poverh svih sličnosti sa standardnim FK modelom, ipak postoje određena odstupanja ukoliko se odabere neharmonijska konveksna forma međučestičnog potencijala. Prvo što se može uočiti jeste da vrednosti kritične sile F_c i širine Šapirovih stepenika itekako zavise od izbora međučestičnog potencijala. Vidi se da su za isti skup parametara ($\omega = 1/2$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$

i $\nu_0 = 0.2$) vrednosti kritične sile za oba izbora neharmonijskih potencijala na slici 3.6 nešto veće nego što je to slučaj kod harmonijskog odabira na slici 3.4. Ovo sugerise da neharmonijska forma međučestičnog potencijala na izvestan način utiče na tendenciju čestica da napuste svoje pozicije i pređu u narednu dostupnu konfiguraciju, te je, za dati skup parametara, njihovo kretanje uslovljeno većim vrednostima spoljašnje dc sile.



Slika 3.8: Zavisnost srednje brzine od primenjene dc sile u slučaju međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) za različite vrednosti parametara g , h i f . Izabran je sledeći skup parametara: $\omega = 1/2$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$ i $\nu_0 = 0.2$. Numerisani stepenici su harmonijski.

Kako se međučestični potencijal oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) redukuje na standardnu harmonijsku formu za $g \rightarrow 1$, $h, f \rightarrow 0$, očekujemo da se u tom slučaju grafik sa slike 3.6 a) poklopi sa standardnom formom sa slike 3.4 za $F_{ac} = 0.2$ (naravno, analogno važi i u slučaju biranja drugog skupa parametara). Ovakvo ponašanje ilustrovano je na slici 3.8. Uviđa se da kritična sila F_c teži vrednosti koju ima u slučaju standardnog FK modela ($F_c \approx 1.6$ za odabrani skup parametara). Vidimo da variranje parametara g , h i f ne utiče na značajno širenje subharmonijskih stepenika jer se samo harmonijski stepenici mogu detektovati golim okom i neophodno je dodatno zumirati segmente grafika kako bi i subharmonijski stepenici došli do izražaja.

3.3 Najveći Ljapunovljev eksponent kao sredstvo za detekciju Šapirovih stepenika

Ljapunovljevi eksponenti mera su stope razdvajanja inicijalno infinitezimalno bliskih konfiguracija usled dinamike sistema. U slučaju diskretne problematike, Ljapunovljevi eksponenti se pojavljuju u jednačini oblika [256]:

$$|\delta u_j(t)| \approx e^{\lambda_j t} |\delta u_j(0)|, \quad (3.24)$$

gde su $\delta u_j(0)$ i $\delta u_j(t)$ perturbacije dve konfiguracije u početnom trenutku i u trenutku određenom vremenom t , respektivno. Uopšteno govoreći, Ljapunovljevih eksponenata ima koliko i stepeni slobode sistema [257]. To znači da u našem slučaju postoji osam Ljapunovljevih eksponenata ($j = 1, 2, \dots, 8$) s obzirom na to da se sistemi diferencijalnih jednačina (3.21) i (3.23) u oba slučaja sastoje od $N = 8$ jednačina prvog reda. Ljapunovljevi eksponenti mogu

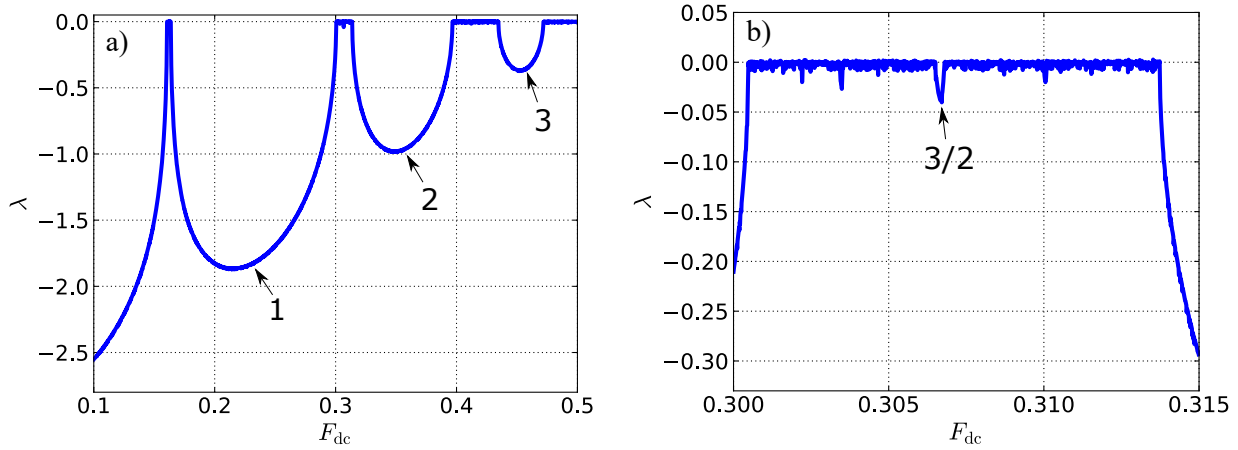
se definisati na sledeći način [258, 259]:

$$\lambda_j = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{|\delta u_j(0)| \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta u_j(t)|}{|\delta u_j(0)|}. \quad (3.25)$$

Međutim, u numeričkim kalkulacijama uvek se srećemo sa Ljapunovljevim eksponentima u konačnom vremenu, te se praktično izraz (3.25) svodi na:

$$\lambda_j(t) = \lim_{|\delta u_j(0)| \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta u_j(t)|}{|\delta u_j(0)|}. \quad (3.26)$$

Ispostavlja se da je za konzistentno ispitivanje dinamike modela od interesa u ovom segmentu doktorata dovoljno utvrditi ponašanje najvećeg Ljapunovljevog eksponenta. Upravo on ukazuje na linearnu stabilnost date konfiguracije⁹. Naime, u slučaju pozitivnosti najvećeg Ljapunovljevog eksponenta, u sistemu se registruje prisustvo haosa, dok negativna vrednost odgovara njegovom odsustvu [226, 256, 259, 260]. S obzirom na to da ćemo u proračunima koristiti samo najveći Ljapunovljev eksponent, ubuduće će on biti obeležen sa λ . Kada je reč o standardnom FK modelu, na stepeniku (pri rezonantnim brzinama) su trajektorije čestica periodične u vremenu i otuda je najveći Ljapunovljev eksponent negativan [250]. Na ivici stepenika uočava se da najveći Ljapunovljev eksponent teži nultoj vrednosti, što je prikazano na slici 3.9.



Slika 3.9: Zavisnost najvećeg Ljapunovljevog eksponenta λ od primenjene dc sile standardnog FK modela za sledeći skup parametara: $\omega = \frac{1}{2}$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$ i $\nu_0 = 0.2$. Prikazan je širi interval, na kom se uočavaju harmonijski stepenici a), kao i zumiran interval sa numerisanim subharmonijskim stepenikom b). Reprodukovani su rezultati iz [250].

Rečeno je da analiza najvećeg Ljapunovljevog eksponenta predstavlja značajan alat prilikom detekcije Šapirovih stepenika. Posmatranjem slike 3.9 b), možemo se uveriti da je razlog to što pokazuje veću senzitivnost na pojavu subharmonijskih stepenika u odnosu na odzivnu funkciju [226, 230]. Tako vidimo da su, osim obeleženog subharmonijskog stepenika uočljivog i na slici 3.4, prisutni razni manji stepenici u intervalu između prvog i drugog harmonijskog stepenika. Osim toga, uočava se odsustvo haosa u jako prigušenom standardnom FK modelu podvrgnutom dejstvu periodičnih sila. Slično je utvrđeno i prilikom razmatranja jako prigušenog FK modela sa raznim oblicima generalisanog supstratnog potencijala [245, 261], te bi bilo posebno interesantno ispitati uticaj odabranih formi neharmonijskog međučestičnog potencijala na pojavu haosa u sistemu.

⁹Stabilnost neke konfiguracije ispituje se odabirom slabo perturbovane konfiguracije, pri čemu je neophodno pratiti evoluciju perturbacija tokom vremena. S obzirom na to da u ovom kontekstu govorimo o linearnoj stabilnosti, to znači da su perturbacije trajektorija čestica δu_i u trenutku t određene sukcesivnim dejstvom Jakobijana J_{ij} na inicijalne perturbacije:

$$\delta u_i(t) = \sum_j J_{ij}(t, 0) \delta u_j(0).$$

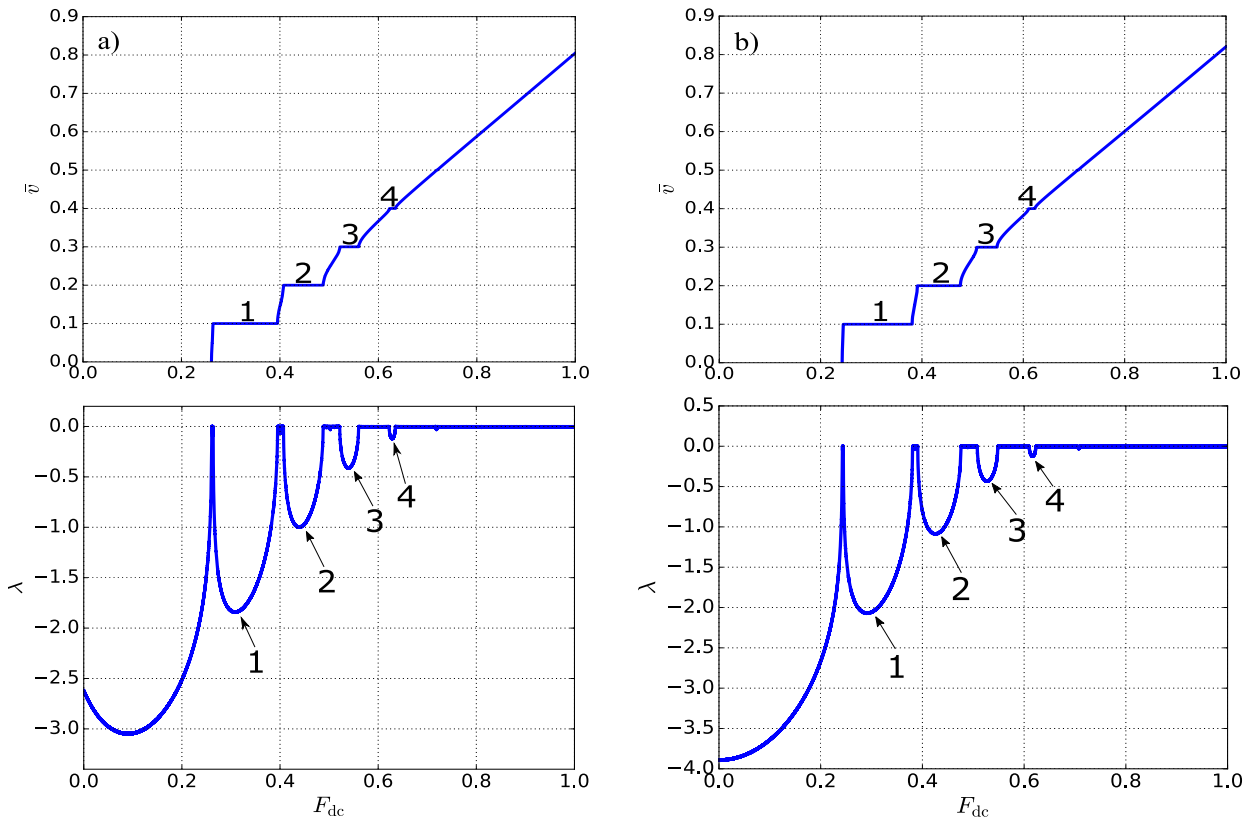
Ljapunovljevi eksponenti predstavljaju upravo svojstvene vrednosti Jakobijana.

3.3.1 Odsustvo haosa u sistemu sa neharmonijskom međučestičnom interakcijom

Prilikom ispitivanja najvećeg Ljapunovljevog eksponenta korišćen je Sprotov algoritam (*Sprott's algorithm*), koji se bazira na metodi separacije orbita [262, 263]. Naime, polazi se od ravnotežne konfiguracije $\{u_j\}$ i bira se slabo perturbovana konfiguracija $\{\tilde{u}_j\}$, pri čemu je:

$$\{\tilde{u}_j(t_{ss})\} = \{u_j(t_{ss})\} \pm d_0, \quad d_0 = \sqrt{\frac{\epsilon^2}{N}}, \quad (3.27)$$

gde je t_{ss} vreme neophodno da sistem dostigne ravnotežno stanje (*steady-state*), a parametar $\epsilon = 10^{-7}$ predstavlja mali parametar pomoću kog se definiše perturbacija d_0 polazne konfiguracije $\{u_j\}$. U jednačini se plus i minus znak pojavljuju sa istom verovatnoćom kako bi se obuhvatio čitav potprostor Ljapunovljevih eksponenta i izdvojio upravo najveći [261]. S obzirom na to da se u numeričkim kalkulacijama susrećemo sa Ljapunovljevima eksponentima računatim u konačnom vremenu, važno je dobro izabrati pretpostavljeno vreme neophodno za dostizanje ravnotežne konfiguracije. Prekratka vremena mogu dovesti do znatnih oscilacija najvećeg Ljapunovljevog eksponenta, a predugačka mogu preopteretiti numerički proces. Vremenska evolucija kompletnog Ljapunovljevog eksponenta detaljno je diskutovana u [257], gde je ustanovljeno da za velike vrednosti t_{ss} Ljapunovljevi eksponenti u konačnom vremenu konvergiraju ka svojoj asimptotskoj ($t_{ss} \rightarrow \infty$) vrednosti.

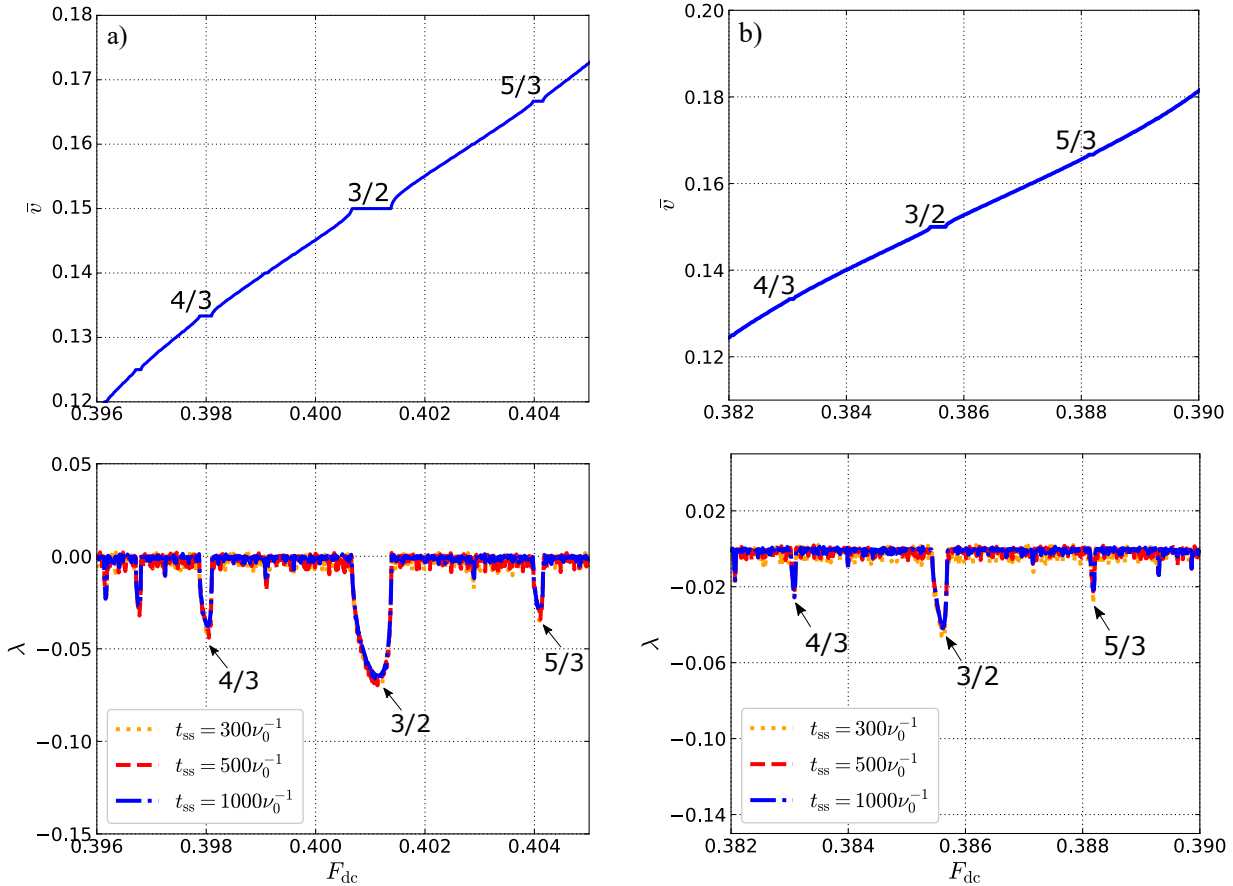


Slika 3.10: Zavisnost srednje brzine \bar{v} i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta λ od primenjene dc sile FK modela u dva slučaja: kada je odabrana međučestična interakcija oblika polinoma četvrtog stepena a) i eksponencijalne forme b). Korišćen je sledeći skup parametara: $\omega = \frac{1}{2}$, $K = 4.0$, $F_{ac} = 0.2$, $\nu_0 = 0.2$ i $g = h = f = 1$. Na graficima su numerisani harmonijski stepenici.

Nakon dostizanja ravnotežne konfiguracije počinje računanje najvećeg Ljapunovljevog eksponenta. Uzorkovanje se vrši pri dostizanju svakog 26. vremenskog koraka. S obzirom na činjenicu da su se za to vreme obe konfiguracije pomerile, računa se novo rastojanje d_1 , a potom dodaje doprinos najvećem Ljapunovljevom eksponentu u formi $\ln \left| \frac{d_1}{d_0} \right|$. Nakon toga se vrši

prilagodavanje orbita, odnosno orbitu \tilde{u}_j redefinišemo tako da se opet nalazi na rastojanju d_0 od polazne orbite u_j . Procedura se ponavlja pri dostizanju sledećeg 26. vremenskog koraka, pri čemu se poziva ranije pohranjena informacija o vrednosti najvećeg Ljapunovljevog eksponenta iz prethodnog uzorkovanja. Naravno, i u ovom slučaju, vremenska evolucija orbita čestica ispituje se pozivanjem Runge-Kuta metoda četvrtog reda (videti prilog C.1).

Osim u slučajevima kada je to posebno naglašeno, u nastavku rada odabrano vreme bilo je $t_{ss} = 300\nu_0^{-1}$. Korak dc sile ponovo je bio $\Delta F_{dc} = 10^{-5}$. Na grafiku 3.10 nalazi se poređenje analize Šapirovih stepenika posredstvom odzivne funkcije i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta u slučaju odabira dva neharmonijska međučestična potencijala data relacijama (3.20) i (3.22).



Slika 3.11: Zumirani segmenti grafika na slici 3.10 u slučaju međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) a) i eksponencijalnog međučestičnog potencijala (3.22) b). Numerisani stepenici su subharmonijski.

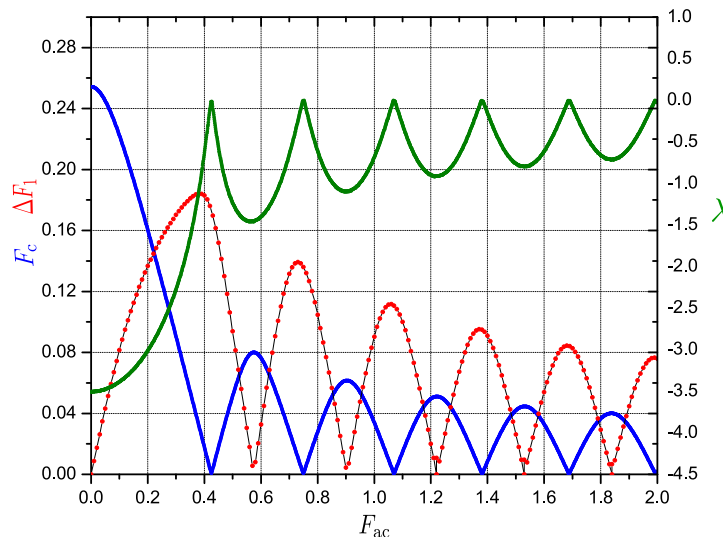
Baš kao što je to bio slučaj sa standardnim modelom, i prilikom odabira međučestičnih neharmonijskih konveksnih potencijala (3.20) i (3.22) ne dolazi do pojave haosa u sistemu. Zapravo, ispitivanjem ponašanja najvećeg Ljapunovljevog eksponenta pri raznim odabirima parametara ω , K , ν i F_{ac} , ustanovljeno je da su njegove vrednosti u svim slučajevima nepozitivne, te samim time i da odgovarajuća dinamika nije haotična. Očigledno je da je u pitanju još jedna osobina koja je svojstvena čitavoj familiji jako prigušenih FK modela sa različitim konveksnim međučestičnim potencijalima. Osim toga, baš kao što je to važno za standardni model [226, 230, 250], najveći Ljapunovljev eksponent je i u slučaju međučestičnih potencijala razmatranih u ovom doktoratu negativan u stacionarnom režimu, da bi nulu prvi put dostigao pri kritičnoj vrednosti dc sile F_c . Nakon toga ponašanje je prilično uobičajeno i najveći Ljapunovljev eksponent je ponovo negativan duž čitave širine Šapirovih stepenika i teži nuli na njihovim krajevima. Na slici 3.11 nalazi se zumiran prikaz grafika sa slike 3.10, tako da

se i u ovom slučaju Ljapunovljev eksponent pokazuje korisnim oruđem za detekciju pojedinih subharmonijskih stepenika koje prosto nije moguće uočiti na grafiku odzivne funkcije bez zumiranja.

Takođe, može se uočiti da su rezultati na slici 3.11 prikazani za tri odabira vremena t_{ss} . Male oscilacije najvećeg Ljapunovljevog eksponenta oko $\lambda = 0$ posledica su upravo korišćenja konačnih vremena t_{ss} pri numeričkim kalkulacijama. Primetno je da ove oscilacije postaju sve manje i manje kako se vreme t_{ss} povećava i u asimptotskoj granici ($t_{ss} \rightarrow \infty$) u potpunosti će nestati, što je u skladu sa ponašanjem sa slike 3.11. Dakle, pozitivne vrednosti najvećeg Ljapunovljevog eksponenta će u granici $t_{ss} \rightarrow \infty$ odgovarati njegovoj nultoj vrednosti, što potvrđuje odsustvo haosa u sistemu.

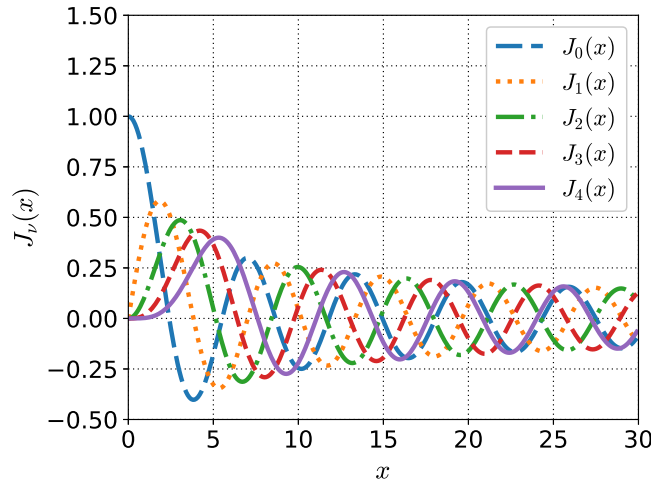
3.4 Amplitudne zavisnosti kritične sile, širine prvog harmonijskog stepenika i maksimalnog Ljapunovljevog eksponenta

Poznato je da je u slučaju standardnog FK modela pod dejstvom ac+dc sila najveći Ljapunovljev eksponent ne samo korisno sredstvo za detekciju malih subharmonijskih stepenika i utvrđivanje prisustva haosa u sistemu nego i generalno značajan resurs za ispitivanje izvesnih prikrivenih karakteristika modela. Naime, utvrđeno je da zavisnost najvećeg Ljapunovljevog eksponenta od amplitude ac sile F_{ac} u slučaju $F_{dc} = 0$ predstavlja ogledalsku sliku amplitudne zavisnosti kritične sile. Drugim rečima, minimumi jedne veličine odgovaraju maksimumima druge i obrnuto [230]. Osim toga, zna se da amplitudne zavisnosti kritične sile i širine prvog harmonijskog stepenika ispoljavaju beselovsko ponašanje¹⁰ i da maksimumi jedne veličine odgovaraju minimumima druge [228, 229]. Amplitudna zavisnost kritične sile, širine prvog harmonijskog stepenika i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta za $F_{dc} = 0$ u slučaju jako prigušenog standardnog FK modela podvrgnutog dejstvu periodičnih sila prikazana je na slici 3.12, dok se Beselove funkcije J_0 , J_1 , J_2 , J_3 i J_4 [182] nalaze na slici 3.13.



Slika 3.12: Amplitudna zavisnost kritične sile F_c , širine prvog harmonijskog stepenika ΔF_1 i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta λ za $F_{dc} = 0$ u slučaju standardnog FK modela. Izabran je sledeći skup parametara: $\omega = 1/2$, $K = 4.0$, $\nu_0 = 0.2$ i $F_{ac} = 0.2$. Reprodukovani su rezultati iz [230].

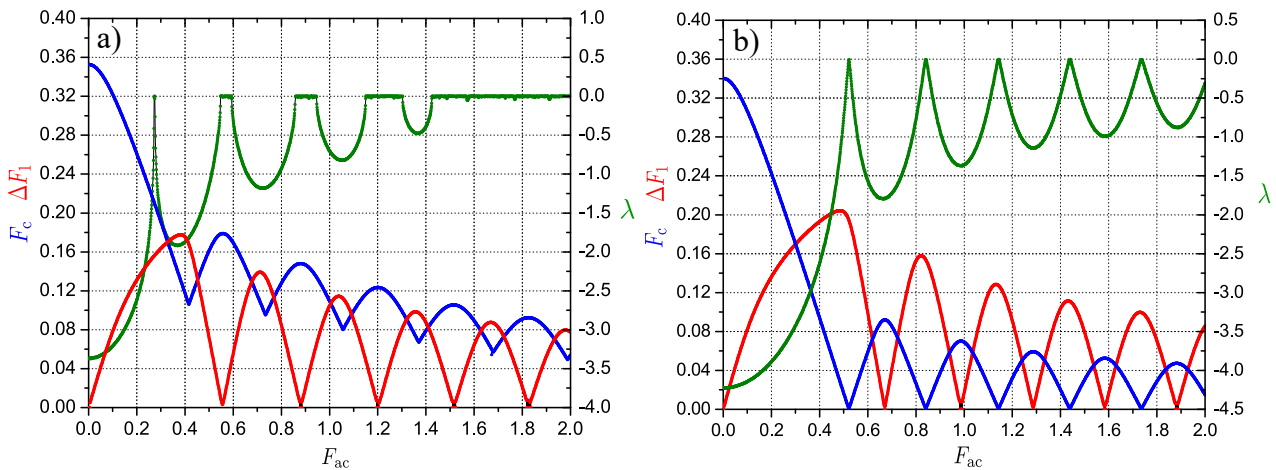
¹⁰Iako se same funkcije ne poklapaju strogo sa Beselovim funkcijama (recimo, nemaju negativne segmente kao Beselove funkcije), njihovo ponašanje podseća na oblik Beselovih funkcija, te stoga i koristimo izraz beselovsko ponašanje.

Slika 3.13: Beselove funkcije J_0 , J_1 , J_2 , J_3 i J_4 .

Sa druge strane, ustanovljeno je i da zamena sinusoidalnog supstratnog potencijala (3.6) nekim oblicima generalisanog potencijala dovodi do deformacije beselovske forme, kao i korelacije između amplitudne zavisnosti kritične sile i širine prvog harmonijskog stepenika [245]. Stoga bi bilo zanimljivo videti da li bi se isto desilo ukoliko bi harmonijski međučestični potencijal (3.7) bio zamenjen jednom od dve razmatrane neharmonijske konveksne forme (3.20) i (3.22).

3.4.1 Uticaj neharmonijske međučestične interakcije na amplitudne zavisnosti

Na slici 3.14 nalaze se amplitudne zavisnosti kritične sile F_c , širine prvog harmonijskog stepenika ΔF_1 i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta λ za $F_{dc} = 0$ u slučaju razmatranja dva neharmonijska međučestična potencijala (3.20) i (3.22).

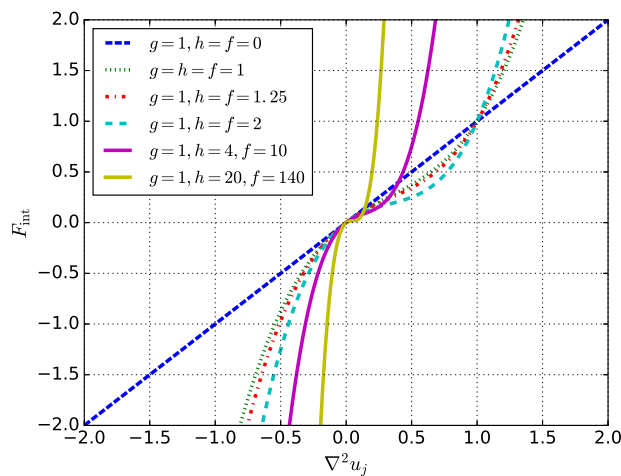


Slika 3.14: Amplitudna zavisnost kritične sile F_c , širine prvog harmonijskog stepenika ΔF_1 i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta λ za $F_{dc} = 0$ u dva slučaja: kada je odabrani međučestični potencijal oblika polinoma četvrtog stepena a) i eksponencijalnog oblika b). Izabran je sledeći skup parametara: $\omega = 1/2$, $K = 4.0$, $\nu_0 = 0.2$ i $g = h = f = 1$.

Na graficima je jasno vidljivo da amplitudne zavisnosti kritične sile i širine prvog harmonijskog stepenika očuvavaju prethodno opisano ponašanje u slučaju standardnog FK modela - beselovsko ponašanje je ponovo prisutno, a minimumima jedne veličine odgovaraju maksimumi

druge i obrnuto. Ovo predstavlja još jedan dokaz korelacije između članova porodice FK modela sa različitim formama konveksnog međučestičnog potencijala. Međutim, obrnuto ponašanje amplitudne zavisnosti najvećeg Ljapunovljevog eksponenta i kritične sile manifestuje se samo u slučaju eksponencijalnog izbora međučestičnog potencijala (3.22). U slučaju međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) dolazi do izvesnih odstupanja od ovakvog ogledalskog preslikavanja, te se prethodno uočeno pravilo u slučaju standardnog FK modela ne može uopštiti na sve sisteme.

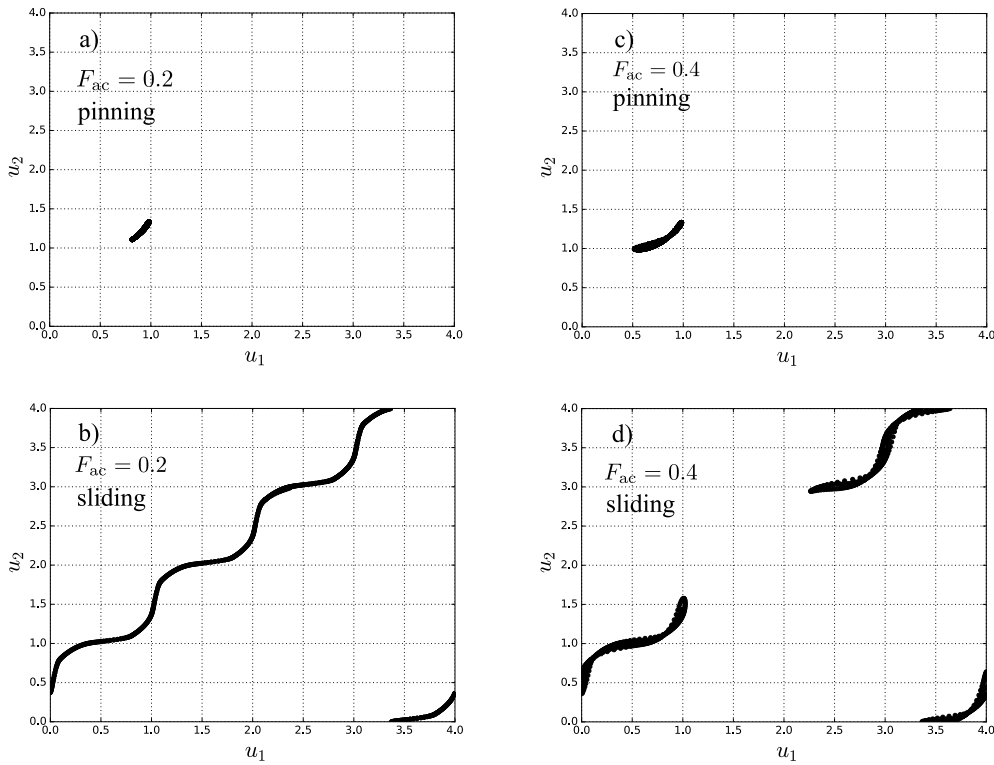
Još jedno odstupanje od slučaja standardnog modela prikazanog na slici 3.12 uočava se na slici 3.14 a). Naime, primećujemo da, u istom intervalu amplitude ac sile F_{ac} , kod standardnog FK modela kritična sila poprima nultu vrednost, ili bar vrednost veoma blizu nuli, za nekoliko vrednosti F_{ac} , dok se u slučaju međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) to ne može reći. Sada postaje očigledno da pređašnji zaključak, prema kome u slučaju neharmonijskog potencijala (3.20) sistemu mora biti pridružena dodatna dc sila kako bi čestice iz stacionarnog režima prešle u dinamički, važi za širok raspon parametra F_{ac} . Dakle, postoji neka dodatna sila koja deluje u suprotnom smeru od smera dc sile i onemogućava česticama da napuste svoje pozicije u jamama. Kratka analiza odgovarajućih jednačina kretanja (3.21) pruža odgovor na pitanje prirode ove sile. Ukoliko nacrtamo grafik zavisnosti međučestične sile (*interparticle force*) $F_{\text{int}} = g\nabla^2 u_j - h(\nabla^2 u_j)^2 + f(\nabla^2 u_j)^3$ (odnosno sile koja odgovara dejstvu međučestičnog potencijala (3.20)) od člana sa diskretnim laplasijanom $\nabla^2 u_j$, kao što je to učinjeno na slici 3.15, rešenje postaje evidentno. Naravno, treba uočiti da negativan znak sile F_{int} nema nikakvo mistično značenje, nego je jednostavno u pitanju međučestična sila čiji je smer suprotan u odnosu na spoljašnju dc silu.



Slika 3.15: Sila koja deluje između najbližih suseda, data u jednačini (3.21) ($F_{\text{int}} = g\nabla^2 u_j - h(\nabla^2 u_j)^2 + f(\nabla^2 u_j)^3$), u zavisnosti od člana sa diskretnim laplasijanom $\nabla^2 u_j$ za nekoliko vrednosti parametara g , h i f .

Uočava se da u standardnom harmonijskom slučaju ($g = 1$, $h = f = 0$) međučestična sila F_{int} predstavlja neparnu funkciju člana sa diskretnim laplasijanom $\nabla^2 u_j$. Tada i kritična sila F_c ima najmanju moguću vrednost ($F_c \approx 1.6$). Međutim, kada parametri h i f poprime nenulte vrednosti, međučestični potencijal postaje neharmonijski i sa grafika se jasno vidi da su preferentne negativne vrednosti međučestične sile.

Da bi se proverila konzistentnost ovakvog zaključka, uvek je najbolje preći na unutrašnje stepene slobode i ispitati kretanje čestica jedne u odnosu na drugu. Kretanje druge čestice u odnosu na prvu česticu u FK lancu sa dva oblika neharmonijskih interakcija dato je Poankareovim preseccima (*Poincaré sections*) na slikama 3.16 i 3.17. Ranije je naglašeno da su u numeričkim proračunima korišćeni ciklični granični uslovi i da su razmatrani lanci od $N = 8$ čestica. Uzevši u obzir činjenicu da je periodičnost supstratnog potencijala (3.6) jednaka je-



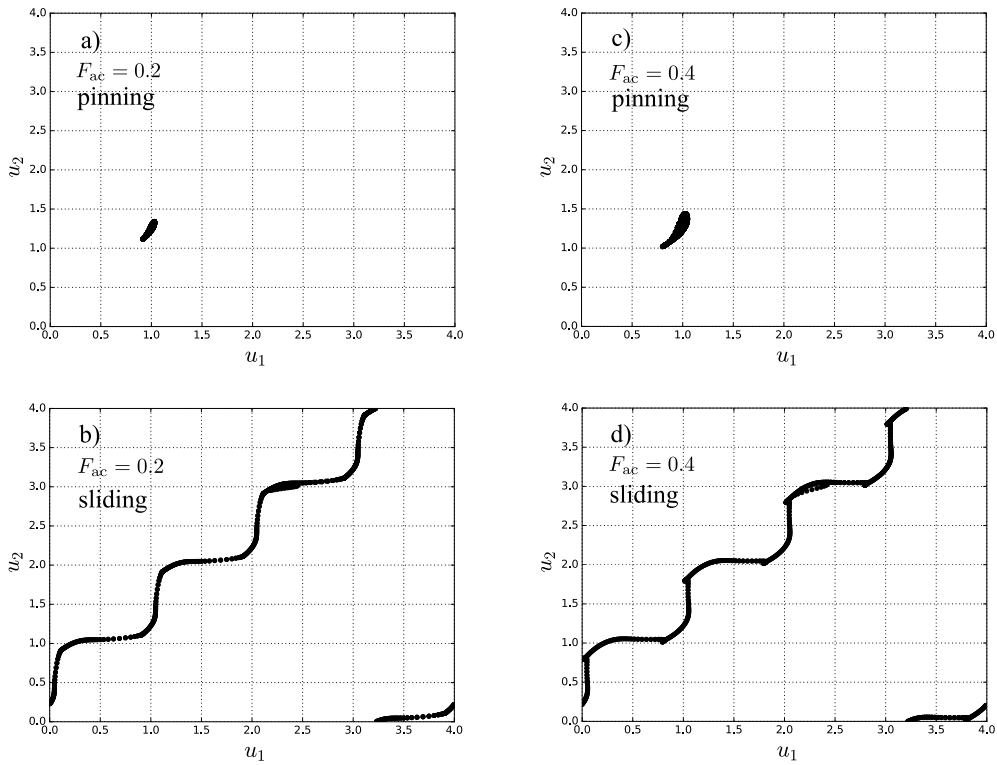
Slika 3.16: Poankareovi preseki za dve susedne čestice, čije su koordinate u_1 i u_2 , u slučaju FK modela sa međučestičnim potencijalom oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) za dati skup parametara: $\omega = 1/2$, $K = 4.0$, $\nu_0 = 0.2$ and $g = h = f = 1$. Vrednosti dc sile su sledeće: a) $F_{dc} = 0.25$, b) $F_{dc} = 0.265$, c) $F_{dc} = 0.1$ i d) $F_{dc} = 0.12$.

dinici i da je parametar srednjeg međučestičnog rastojanja u razmatranom slučaju $\omega = 1/2$, očigledno je da je na slikama 3.16 i 3.17 prikazano kretanje dve susedne čestice (jedne u odnosu na drugu) u četiri jame supstratnog potencijala.

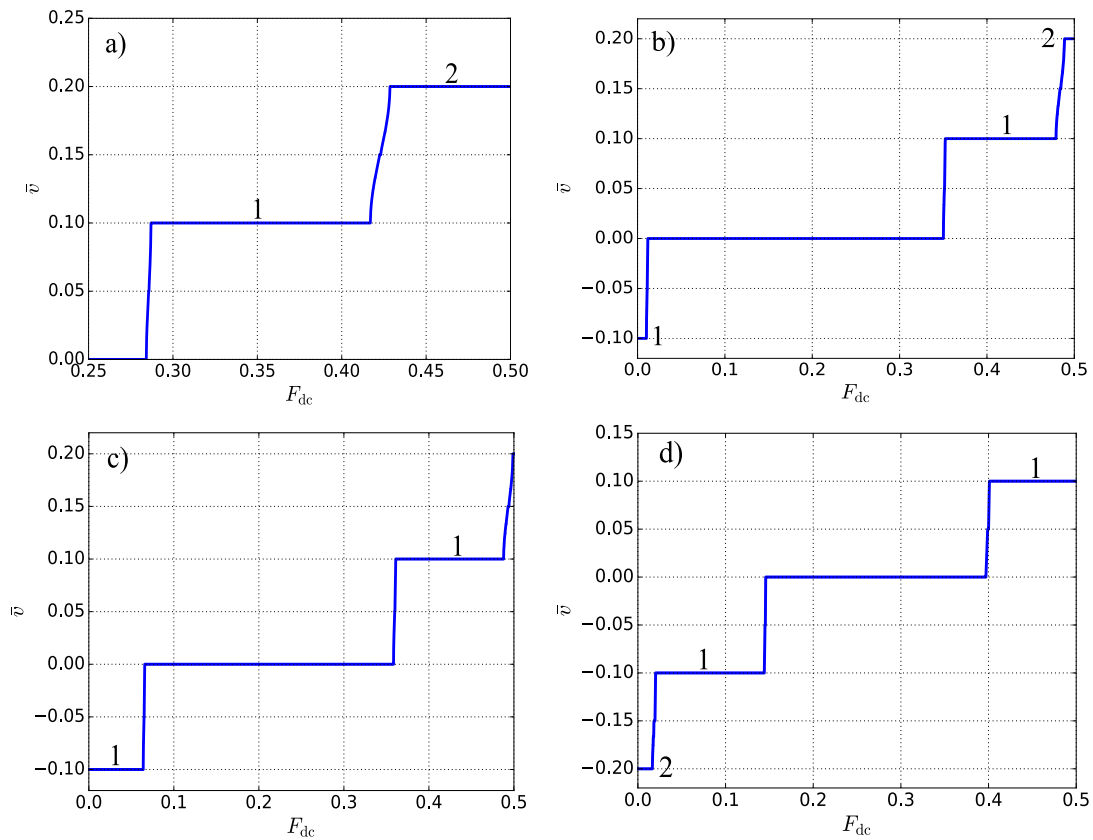
Rezultati su prikazani za dve vrednosti amplitude ac sile, $F_{ac} = 0.2$ i $F_{ac} = 0.4$, i četiri vrednosti dc sile, koje se nalaze u blizini vrednosti kritične sile F_c , tako da za svaku vrednost amplitude ac sile jedna vrednost dc sile odgovara stacionarnom, a druga dinamičkom režimu. Uočava se da su u stacionarnom režimu pozicije čestica ograničene na vrlo uski prostor, dok je u dinamičkom režimu kolektivno kretanje prilično izraženo. S obzirom na ciklične granične uslove, nakon što jedna od čestica dođe do kraja grafika (poslednje jame), ona se vraća na početak. Takođe, uočava se izvesni procep u relativnom kretanju čestica na slici 3.16 d), što sugerise da za ovaj odabir parametara dolazi do značajnog preskakanja jama supstratnog potencijala.

3.5 Dinamičko zaključavanje u oba smera kretanja čestica

Kao što je rečeno u prethodnom segmentu, u slučaju neharmonijskog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena, član sa diskretnim laplasijanom je u određenim trenucima tokom numeričkog računa pozitivan, dok je u drugim negativan, ali je sa grafika na slici 3.15 jasno da je preferentan smer koji je suprotan u odnosu na smer delovanja dc sile. Upravo ovaj efekat utiče na povećanje kritične sile F_c . Ovakav zaključak mogao bi imati veoma zanimljive implikacije. Recimo, možemo pretpostaviti da bismo podesnim odabirom parametara h i f mogli doći u situaciju da vrednost kritične sile F_c padne na nulu. U tom slučaju je sama međučestična sila dovoljno jaka da izgura čestice iz potencijalnih jama, koje teže da ih zarobe, u smeru suprotnom od smera pretpostavljene dc sile. Na slici 3.18 prikazani su dokazi da je takav rezon prilično opravdan.



Slika 3.17: Poankarevi preseci za dve susedne čestice, čije su koordinate u_1 i u_2 , u slučaju FK modela sa međučestičnim potencijalom eksponencijalnog oblika (3.22) za dati skup parametara: $\omega = 1/2$, $K = 4.0$ i $\nu_0 = 0.2$. Vrednosti dc sile su sledeće: a) $F_{dc} = 0.23$, b) $F_{dc} = 0.25$, c) $F_{dc} = 0.09$ i d) $F_{dc} = 0.1$.



Slika 3.18: Zavisnost srednje brzine od primenjene dc sile u slučaju modela sa međučestičnim potencijalom oblika polinoma četvrtog stepena (3.20) za $\omega = 1/2$, $F_{ac} = 0.2$, $K = 4.0$, $\nu_0 = 0.2$, $g = 1$ i nekoliko vrednosti parametara h i f : a) $h = f = 1.25$, b) $h = f = 2$, c) $h = 4$, $f = 10$ i d) $h = 20$, $f = 140$. Numerisani stepenici su harmonijski.

Na slici 3.18 a), gde su vrednosti parametara $h = f = 1.25$, međučestična sila još uvek nije dovoljna da izgura čestice iz njihovih pozicija u potencijalnim jamama i kritična sila je veća nego što je bila u slučaju izbora parametara $g = h = f = 1$, prikazanom na slici 3.10. Ova situacija rezultat je činjenice da je preferentan smer međučestične sile suprotan u odnosu na smer dc sile. Međutim, porastom vrednosti parametara h i f , čestice su u stanju da iz svojih pozicija budu izgurane u smeru suprotnom od smera delovanja dc sile, čak i za $F_{dc} = 0$, upravo posredstvom delovanja intenzivne međučestične sile, što možemo uočiti na slikama 3.18 b), c) i d).

Naravno, ne treba izgubiti iz vida da je negativan znak srednje brzine samo posledica smera kretanja čestica, koji je suprotan smeru delovanja dc sile. Dinamičko zaključavanje, odnosno Šapirove stepenike, uočavamo u oba smera kretanja čestica. Tako su stepenici detektovani pri očekivanim rezonantnim vrednostima srednje brzine: $\bar{v} = 0.1$ (slika 3.18 b), c) i d)) i $\bar{v} = 0.2$ (slika 3.18 d)), ali sada negativnog predznaka usled suprotnog smera kretanja. Kada dc sila postane dovoljno jaka da se suprotstavi preferentnom smeru međučestične sile, srednja brzina padne na nulu. Daljim porastom dc sile dolazi do manifestovanja ponašanja koje je potpuno analogno već razmatranom ponašanju sa slika 3.8 i 3.10. Tada je dc sila ta koja preovlađuje nad međučestičnom silom, te se kretanje nadalje odvija u smeru njenog delovanja.

3.6 Realni sistemi na koje je moguće primeniti generalizovani Frenkel-Kontorova model sa neharmonijskim međučestičnim potencijalima

U samom uvodu spomenuto je da postoje brojni fizički sistemi kod kojih je uočena pojava dinamičkog zaključavanja i prelaz između stacionarnog i dinamičkog režima. S obzirom na to da su ovi sistemi često veoma kompleksni, interesantno je da je jedan jednostavan model lanca čestica smeštenih u izvesni periodični supstratni potencijal, koje interaguju sa svojim najbližim susedima, u stanju da reprodukuje dostupne eksperimentalne rezultate. Stoga će ovaj segment biti posvećen poređenju rezultata doktorata sa fizičkim rezultatima u nekim srodnim sistemima. Kako čista harmoničnost nije toliko česta pojava u prirodi, jasno je da bi rezultati doktorata mogli biti značajni za brojne sisteme, od kojih će biti izloženi neki od najbitnijih - talasi gustine naboja, sistemi Džozefsonovih spojeva i koloidni sistemi.

3.6.1 Talasi gustine naboja

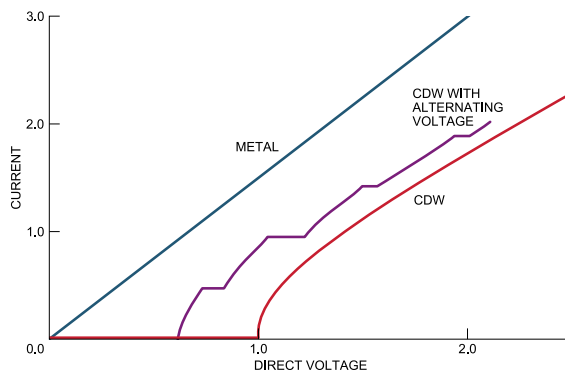
Rudolf Perls (*Rudolf Peierls*) prvi je ustanovio da jednodimenziona metalna rešetka postaje nestabilna na niskim temperaturama, bliskim apsolutnoj nuli, kada prolazi kroz fazni prelaz II vrste u neprovodno stanje [226]. Temperatura koja uslovljava fazni prelaz iz jednog u drugo stanje karakteristika je materijala, a u čast naučniku koji je pojavu razotkrio, prelaz je nazvan Perlsov prelaz. Pojava je povezana sa distorzijom periodičnosti rešetke [226, 249]. Na nivou elektrona dolazi do sparivanja i međusobnog odbijanja parova [249]. Ovakva promena izaziva modulaciju gustine naboja u materijalu, što je poznato kao talas gustine naboja (*charge density wave*). Elektroni ispoljavaju kolektivno ponašanje, te se mogu posmatrati kao jedna celina (slično lancu čestica u FK modelu). Njihov režim postaje stacionaran i primena malih električnih polja nije u stanju da "razdrma" inertne elektrone. Pojava talasa gustine naboja karakteristična je za sisteme visoke anizotropije zonalne strukture, poput raznih organskih i neorganskih jedinjenja, ali su za nas svakako najznačajnija neorganska jedinjenja linearne strukture, poput NbSe_3 , TaSe_3 , $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ i drugih, radi uporedivosti sa razmatranim jednodimenzionim FK modelom [226].

S obzirom na to da su talasi gustine naboja povezani sa distorzijom periodične rešetke, ove strukture u opštem slučaju su nesamerljive [226]. Ispostavlja se da se ponašanje modulacije naboja može podesno opisati modelom elastičnog medijuma na koji deluju sile koje teže da ga zaključaju u stacionarnu konfiguraciju, pri čemu je realna varijabla od interesa faza talasa gustine naboja φ_j , odnosno distorzija u odnosu na čvor j razmatrane rešetke [226, 247]. I zaista, ako osmotrimo Midltonov oblik jednačina kretanja jako prigušenih talasa gustine naboja podvrgnutih dejstvu spoljašnje periodične sile $F(t)$ [247]:

$$\dot{\varphi}_j = \nabla^2 \varphi_j + V_j'(\varphi_j) + F(t), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.28)$$

gde je ∇^2 diskretni laplasijan rešetke, a V_j odgovara potencijalu koji zaključava talas gustine naboja u stacionarnu konfiguraciju (ostavljena je mogućnost da se oblik potencijala razlikuje od čvora do čvora rešetke), jasno se uočava dualnost sa razmatranim jednodimenzionim FK modelom.

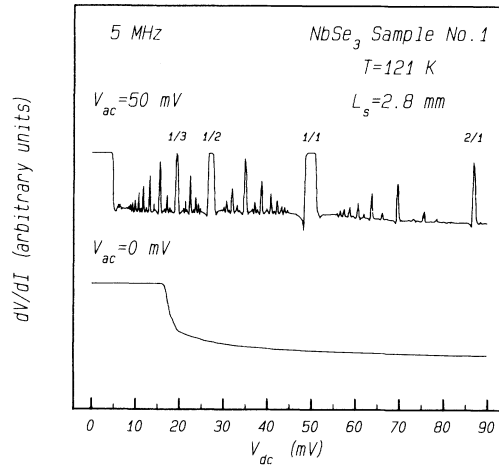
Odzivna funkcija od interesa je zavisnost registrovane jačine struje od primenjenog dc napona. Shodno predočenom, za ove sisteme karakteristična je pojava praga napona, odnosno kritične vrednosti napona pri kom dolazi do proticanja struje. Stoga se i u ovom slučaju registruju stacionarni i dinamički režim, koji uveliko zavise od temperature, nehomogenosti rešetke, veličine uzorka i sličnih karakteristika posmatranog materijala [226]. Osim toga, ukoliko se sistem podvrgne istovremenom uticaju i ac i dc napona, na grafiku odzivne funkcije registruju se dobro poznati platoi, što je prikazano na slici 3.19.



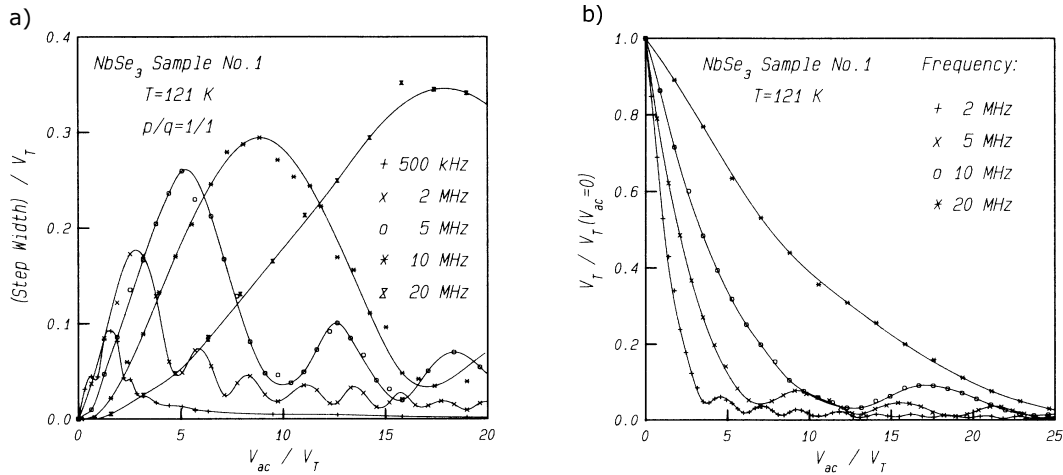
Slika 3.19: Volt-amperska karakteristika metala i talasa gustine naboja u slučaju primene dc i ac+dc napona. Slika je preuzeta iz [249].

Postojećih eksperimentalnih rezultata u ovim sistemima ne manjka [204–206]. Za NbSe_3 ispitan je diferencijalni otpor u funkciji od primenjenog dc napona, pri čemu se Šapirovi stepenici registruju kao pikovi diferencijalnog otpora [205]. Registrovani stepenici su i harmonijski i subharmonijski, kao što se može videti na slici 3.20. Možemo primetiti da je ovakva situacija u potpunosti analogna FK modelima pod dejstvom ac+dc sila razmatranim u doktoratu u slučaju srednjeg međučestičnog rastojanja $\omega = 1/2$, gde zumiranjem pojedinih segmenata, pored harmonijskih, uočavamo i subharmonijske stepenike. Takođe, vidljivo je da u slučaju dejstva samo dc napona dolazi do iščezavanja stepenika.

Za isti materijal izvršeno je i merenje amplitudne zavisnosti širine prvog harmonijskog stepenika i kritične vrednosti dc napona. Rezultati su prikazani na slici 3.21. Uočavamo da razmatranje neharmonijskog međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena (3.20), umesto standardnog harmonijskog, donosi izvesne pogodnosti prilikom poređenja sa eksperimentalnim rezultatima u realnim sistemima s obzirom na činjenicu da i u ovom slučaju minimumi kritične sile imaju nenulte vrednosti. Osim toga, ponašanje obe funkcije je beselovskog tipa, kao što je slučaj i sa modelima razmatranim u doktoratu.



Slika 3.20: Diferencijalni otpor u zavisnosti od primenjenog dc napona. Merenja su izvršena za NbSe₃ na temperaturi od 121 K, pri frekvenciji ac napona od 5 MHz. Numerisani su subharmonijski (1/3, 1/2) i harmonijski (1/1, 2/1) stepenici. Slika je preuzeta iz [205].



Slika 3.21: Amplitudne zavisnosti širine prvog harmonijskog stepenika a) i kritične vrednosti dc napona b) za različite frekvencije ac napona. Merenja su izvršena za NbSe₃ na temperaturi od 121 K. Slika je preuzeta iz [205].

Dakle, u skladu sa dostupnim eksperimentalnim podacima, možemo zaključiti da je FK model sa neharmonijskim međučestičnim potencijalima oblika (3.20) i (3.22) podvrgnut dejstvu periodičnih sila u stanju da na podesan način opiše dinamiku sistema talasa gustine naboja.

3.6.2 Sistemi Džozefsonovih spojeva

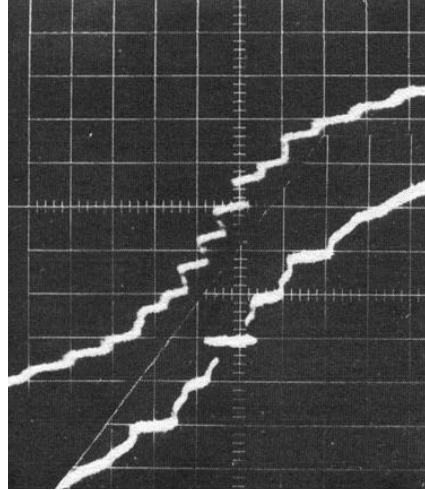
Džozefsonovi spojevi predstavljaju možda i najčešće izučavan sistem kod kog dolazi do ispoljavanja pojave dinamičkog zaključavanja. Sam spoj formiraju dva superprovodnika razdvojena tankim slojem izolatora između njih. Da bismo ustanovili mogućnost postojanja veze sa jednodimenzionim FK modelom, razmatraćemo šta se dešava povezivanjem više Džozefsonovih spojeva u jedan paralelni niz. U ovom slučaju, relevantne varijable su fazne razlike duž svakog spoja φ_i . Dinamika paralelno nanizanih Džozefsonovih spojeva može se konzistentno opisati pomoću sledećih jednačina evolucije faznih razlika [225]:

$$\ddot{\varphi}_j + \gamma \dot{\varphi}_j + \sin(\varphi_j) = \lambda(\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}) + i_{\text{spolj}}(t), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.29)$$

gde je N broj spojeva u nizu, γ disipativni parametar, λ predstavlja parametar kapacitivnog kuplovanja među spojevima, dok je i_{spolj} primenjena spoljašnja radijacija, koja je periodična funkcija vremena:

$$i_{\text{spolj}} = I + A \sin(\nu_0 t), \quad (3.30)$$

pri čemu je I njen konstantan (dc) deo, A amplituda njenog ac dela, a ν_0 frekvencija ac komponente. U slučaju male kapacitivnosti spojeva, maseni član (drugi izvod) može se zanemariti i tada uočavamo problematiku analognu razmatranom jednodimenzionom jako prigušenom FK modelu pod dejstvom ac+dc sila [231].



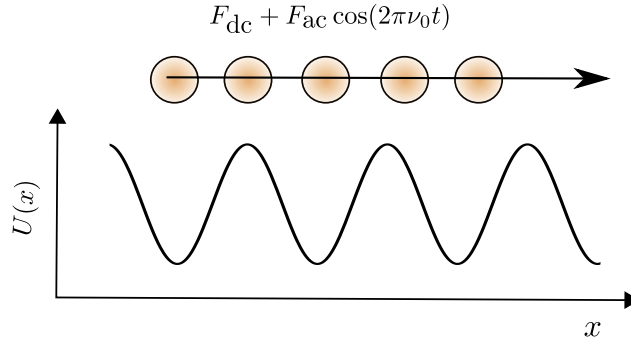
Slika 3.22: Volt-amperska karakteristika sistema Džozefsonovih spojeva. Prvi uočeni Šapirovi stepenici. Slika je preuzeta iz [199].

U ovom slučaju dolazi do takmičenja između intristične frekvencije Džozefsonove plazme i frekvencije primenjene spoljašnje radijacije ν_0 , što ukazuje na činjenicu da su Šapirovi stepenici ponovo očekivani. Ove stepenike je, baš u sistemima Džozefsonovih spojeva, prvi put uočio Sidni Šapiro, a na slici 3.22 nalazi se prikaz volt-amperske karakteristike koju je snimio [199]. Kao što se vidi na slici, odzivne funkcije znatno podsećaju na odzivne funkcije razmatranih FK modela podvrgnutih dejstvu periodičnih sila.

3.6.3 Koloidni sistemi

Posebna pažnja je poslednje decenije posvećena izučavanju koloidnih sistema [196, 198, 200, 201, 203]. U pitanju su sistemi čvrstih čestica, dimenzija između nekoliko nanometara i nekoliko mikrometara, suspendovanih u određenoj fluidnoj fazi. Najčešće se čestice nalaze pod dejstvom periodičnog supstratnog potencijala, obično sinusoidalne forme [196, 198, 200, 202], formiranog pomoću raznoraznih varijacija sistema lasera, poput optičkih pinceta, kojima se sa lakoćom uskim laserskim snopom može po želji delovati na veoma male čestice. Pažljivim odabirom čestica može se uticati i na njihovu međusobnu interakciju, pa se tako, recimo, može inicirati određeni vid magnetne interakcije među česticama [198]. Potom se na čestice lako može delovati spoljašnjom periodičnom silom u željenom smeru. Primer ovakve eksperimentalne jednodimenzione postavke prikazan je na slici 3.23.

Šapirovi stepenici eksperimentalno su detektovani u ovakvim sistemima i nastaju kao rezultat rezonancije između frekvencije supstratnog potencijala, koja je pridružena poznatoj talasnoj dužini laserskog sistema λ_{sup} , i frekvencije primenjene periodične sile. Interesantno je da su harmonijski stepenici uočeni i u sistemima u kojima interakcija između čestica nije posebno inicirana, kao i u sistemima gde je ona nametnuta magnetnom prirodom odabranih čestica [198].



Slika 3.23: Šema eksperimentalne postavke iz [198]. Koloidne čestice nalaze se u supstratnom potencijalu poznate talasne dužine λ_{sup} , pri čemu na njih deluje spoljašnja periodična sila, koja poseduje dc i ac komponentu.

Eksperimentalne podatke moguće je reprodukovati pomoću Lanževenove jednačine (*Langevin equation*) u jako prigušenom režimu [196]:

$$\zeta v(x, t) = F_{\text{dc}} + F_{\text{ac}} \sin(2\pi\nu_0 t) + F_{\text{sup}}(x) + \xi(t), \quad (3.31)$$

gde je $v(x, t)$ brzina čestice, ζ konstanta prigušenja, a F_{dc} spoljašnja dc sila. F_{ac} i ν_0 su amplituda i frekvencija ac sile, respektivno, F_{sup} sila koja odgovara dejstvu supstratnog potencijala i u opštem slučaju može imati komplikovaniji oblik od jednostavne sinusoidalne forme razmatrane u doktoratu, a ξ Gausov beli šum (*Gaussian white noise*). Srednja vrednost Gausovog belog šuma jednaka je nuli:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (3.32)$$

dok je odgovarajuća standardna devijacija:

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2\zeta k_B T \delta(t_1 - t_2). \quad (3.33)$$

Dobijeni rezultati u tom slučaju gotovo se podudaraju sa eksperimentalnim [196], a sličnost sa razmatranim FK modelom je očigledna. Za više informacija o FK modelu podvrgnutom dejstvu spoljašnjih periodičnih sila i Gausovog belog šuma čitalac se upućuje na [264, 265].

Možemo uočiti da u ovim sistemima postoji najveća sličnost sa opisanim standardnim i generalizovanim FK modelima podvrgnutim dejstvu ac+dc sila, što ovakve postavke čini favoritima za dalja ispitivanja modela. Međutim, iako se supstratni potencijal, kao i dejstvo spoljašnje sile, mogu lako prilagoditi želji istraživača, to nije slučaj sa međučestičnom interakcijom. Nalaženje potencijalnog rešenja u ovom pogledu omogućilo bi ispitivanje uticaja međučestičnog potencijala oblika polinoma četvrtog stepena i, samim tim, kolektivnog kretanja čestica bez uplitanja dc sile, kao i pojave Šapirovih stepenika u suprotnom smeru od smera primenjene dc sile.

Zaključak

U sklopu doktorata razmatrana su tri značajna problema u teorijskoj fizici kondenzovanog stanja posredstvom dualnog pristupa. Dakle, za rešavanje problema od interesa korišćeni su modeli razvijeni za neke druge oblasti teorijske fizike, čime je i spektar raspoloživih metoda i alata proširen. Videli smo na koji način se eksitonska disperzija ugljovodonika može razmatrati posredstvom Hajzenbergovih hamiltonijana, kako se kvantno-informatičke veličine mogu izračunati u sistemima spinskih kubita, baziranim na kvantnim tačkama, polazeći od XY Hajzenbergovog modela sa Đalošinski-Moriya tipom interakcije, ali i da se generalizovan Frenkel-Kontorova model podvrgnut dejstvu spoljašnjih periodičnih sila može koristiti prilikom analize realnih fizičkih sistema, poput sistema talasa gustine naboja, Džozefsonovih spojeva i koloidnih sistema.

Prilikom istraživanja aromatičnih ugljovodonika iskorišćena je korespodencija između Paulijevog eksitonskog i Hajzenbergovog spinskog hamiltonijana u slučaju $S = 1/2$, pri čemu su integrali izmene fitovani pomoću postojećih eksperimentalnih podataka za dati materijal. Utvrđeno je da ovako dobijena disperzija poseduje istu periodičnost kao eksperimentalni podaci u svim razmatranim slučajevima. Osim toga, izvršeno je prilagođavanje hamiltonijana, pomoću direktne sume, kako bi se ispitali slučajevi kada je eksperimentalnim putem registrovana pojava Davidovljevoj cepanja. Čak i tada, teorijske krive podražavaju periodičnost eksperimentalnih podataka i nalaze se u domenu eksperimentalnih grešaka. Ustanovili smo i da je disperzija kod acena (pentacena i tetracena) anizotropna za razliku od fenacena (picena i hrizena), gde je ona skoro izotropna i konstantna. Dakle, ovakva slika, formirana pomoću neinteragujućih Frenkelovih eksitona kao vodećih eksitona u razmatranim materijalima, sasvim je dovoljna za konzistentno reprodukovanje eksperimentalnih podataka i CT eksitoni, iako njihov uticaj može doprineti boljoj korespodenciji između eksperimenta i teorije, nemaju toliki značaj za disperziju kao što je to prethodno sugerisano [24, 26, 30]. U radu je ispitan i uticaj eksiton-eksiton interakcija na eksitonsku disperziju, te smo utvrdili da su one zanemarljive na temperaturama izvršenih merenja. Zadovoljavajuće poklapanje između teorije i eksperimenta u razmatranim slučajevima ukazuje na činjenicu da se predstavljeni rezultati mogu primeniti i na druga organska jedinjenja u kojima je uticaj CT eksitona mali, što ukazuje na značaj razmatrane tematike.

Kako bismo ispitali ponašanje kvantno-informatičkih veličina u sistemima kubita, baza nam je bio XY spinski hamiltonijan sa Đalošinski-Moriya interakcijom i dva tipa anizotropije, pri čemu parametri modela nisu intristična svojstva razmatranih sistema, već su eksperimentalno podesivi. Istraživanje je vršeno u sistemima od svega tri čvora, ali i u većim sistemima, za čije smo razmatranje koristili metod renormalizacije grupe. Cilj je bio da se utvrdi korelacija između kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti, te su veličine od interesa bile parna konkurentnost i relativna entropija koherentnosti, respektivno. Uočili smo da razmatrane veličine ispoljavaju obrnuto ponašanje, gde minimumi jedne veličine odgovaraju maksimumima druge i obrnuto, nezavisno od jačine Đalošinski-Moriya interakcije, integrala izmene, tipa i vrednosti parametra anizotropije, ali i veličine sistema. Kako su obe veličine ključne u kvantno-informatičkim sistemima, jasno je da je poželjno postići neki balans između njih, a ne težiti ekstremnim vrednostima. Takođe, analizirana je primenljivost kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti prilikom ispitivanja kvantnih faznih prelaza u sistemu. Ranije je ustanovljeno da u sistemu sa simetričnim odabirom anizotropije dolazi do kvantnog faznog prelaza pri kritičnoj vrednosti parametra anizotropije $\gamma = 0$, kao i da se kvantni fazni prelaz ne može indukovati variranjem parametra Đalošinski-Moriya interakcije [143, 145]. Sa druge strane, u doktoratu je

utvrđeno da je situacija malo drugačija u slučaju asimetričnog odabira anizotropije. Tada se kvantni fazni prelaz ispoljava pri vrednosti parametra anizotropije $M = -1$ (koji je analogan prethodno istaknutom prelazu u slučaju simetričnog izbora anizotropije), ali i za $M = +1$ pri $\tilde{D} = 0$. Dakle, u ovom slučaju Đalošinski-Morija interakcija utiče na pojavu kvantnog faznog prelaza u sistemu, pri čemu su svi spomenuti prelazi fazni prelazi druge vrste.

Da bismo utvrdili vezu sa sistemima talasa gustine naboja, Džozefsonovih spojeva i koloidnim sistemima, u poslednjem segmentu doktorata istražene su karakteristike disipativnog Frenkel-Kontorova modela sa neharmonijskim konveksnim međučestičnim potencijalima podvrgnutog uticaju spoljašnjih periodičnih sila. Odabrana su dva tipa međučestičnih potencijala - jedan ima oblik polinoma četvrtog stepena, a drugi eksponencijalnu formu. Izvršena su poređenja sa dostupnim rezultatima u slučaju standardnog Frenkel-Kontorova modela, u kom je konveksni međučestični potencijal harmonijskog oblika. Utvrđeno je da postoji izvesna korespondencija između modela sa konkveksnim odabirom međučestične interakcije, što možemo pripisati poštovanju Midltonovog pravila u ovim sistemima, te odzivna funkcija i Ljapunovljev eksponent ispoljavaju slično ponašanje. Međutim, vrednosti kritične sile i širine Šapirovihi stepenika itekako se menjaju sa promenom izbora konveksnog potencijala. Osim toga, uočili smo da se odzivne funkcije u oba slučaja poklapaju sa odzivnom funkcijom standardnog Frenkel-Kontorova modela pod dejstvom $ac+dc$ sila, za isti skup parametara, pri celobrojnim vrednostima parametra srednjeg međučestičnog rastojanja, ali i da se na grafiku registruju samo harmonijski stepenici. Subharmonijske stepenike nije bilo moguće uočiti ni zumiranjem grafika jer oni uopšte ne postoje. Odatle se može izvući zaključak da se i pri odabranim neharmonijskim potencijalima model svodi na jednočestični za celobrojne vrednosti parametra ω .

Ispitivanjem amplitudnih zavisnosti kritične sile, širine prvog harmonijskog Šapirovihi stepenika i najvećeg Ljapunovljevihi eksponenta za $F_{dc} = 0$, ustanovljene su još neke devijacije u odnosu na standardni model. Naime, ogledalska slika između amplitudne zavisnosti kritične sile i najvećeg Ljapunovljevihi eksponenta, ustanovljena prilikom ispitivanja standardnog modela [230], održana je samo u slučaju eksponencijalnog izbora međučestičnog potencijala, ali ne i kada je međučestična interakcija oblika polinoma četvrtog stepena. Otuda se ovakvo ponašanje ne može generalizovati. Takođe, uočili smo da minimumi kritične sile u slučaju međučestične interakcije oblika polinoma četvrtog stepena ne padaju na nulu u širem intervalu amplitude ac sile. Ovakvo ponašanje posledica je činjenice da odabrani međučestični potencijal utiče na tendenciju čestica da se kreću u smeru suprotnom u odnosu na smer delovanja dc sile. Drugim rečima, preferentan smer delovanja međučestične sile suprotan je smeru delovanja dc sile. Naravno, kada dc sila postane dovoljno jaka, u stanju je da prevlada nad dejstvom međučestične sile i čestice se tada pokreću u smeru njenog delovanja. Samim tim je i vrednost kritične sile veća nego što je bila u slučaju harmonijskog oblika međučestičnog potencijala. U disertaciji je ukazana i mogućnost ispoljavanja dinamičkog zaključavanja u oba smera kretanja. Naime, ukoliko se u startu odabere međučestična sila koja je dovoljno jaka da izgura čestice iz njihovih jama i potom postepeno primenjuje sve jača i jača dc sila, na grafiku odzivne funkcije Šapirovihi stepenici biće registrovani i pri pozitivnim i pri negativnim vrednostima srednje brzine. Treba napomenuti da je negativni znak srednje brzine posledica kretanja čestica u suprotnom smeru u odnosu na smer delovanja dc sile. Na samom kraju trećeg segmenta izvršeno je poređenje sa dostupnim eksperimentalnim podacima u realnim fizičkim sistemima, kao što su sistemi talasa gustine naboja, Džozefsonovih spojeva i koloidnih čestica. Ustanovljeno je da generalizovan Frenkel-Kontorova model sa neharmonijskim konveksnim međučestičnim potencijalima može predstavljati podesan način za dualno pristupanje ispitivanju navedenih kompleksnijih fizičkih problema, što može igrati značajnu ulogu prilikom njihove buduće eksploatacije.

Prilozi

Prilog A

A.1 Razdvajanje slobodnog i interakcionog dela efektivnog lagranžijana

U doktoratu je prikazan princip računanja prve perturbativne popravke upotrebom metoda efektivne teorije polja. Tom prilikom korišćen je efektivni lagranžijan Hajzenbergovog feromagneta u spoljašnjem magnetnom polju:

$$\mathcal{L}_{\text{eff}} = \Sigma \frac{\partial_t U^1 U^2 - \partial_t U^2 U^1}{1 + U^3} - \frac{F^2}{2} \sum_{\alpha, i} \partial_\alpha U^i \partial_\alpha U^i + \Sigma \mu \widetilde{\mathcal{H}} U^3, \quad (\text{A.1})$$

gde je jedinično vektorsko polje $\mathbf{U} = [\pi^1(\mathbf{x}), \pi^2(\mathbf{x}), U^3(\mathbf{x})]$ definisano uvođenjem dva realna Goldstonova polja $\pi^1(\mathbf{x})$ i $\pi^2(\mathbf{x})$, te važi veza $U^3(\mathbf{x}) = \sqrt{1 - \boldsymbol{\pi}^2(\mathbf{x})}$.

Najpre ćemo iz lagranžijana izdvojiti slobodni deo:

$$\mathcal{L}_{\text{free}} = \frac{\Sigma}{2} (\partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1) - \frac{F^2}{2} \sum_{\alpha} \partial_\alpha \boldsymbol{\pi} \partial_\alpha \boldsymbol{\pi} - \frac{1}{2} \Sigma \mu \widetilde{\mathcal{H}} \boldsymbol{\pi}^2, \quad (\text{A.2})$$

gde smo u obzir uzeli razvoj:

$$U^3 = \sqrt{1 - \boldsymbol{\pi}^2} = 1 - \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2} - \frac{\boldsymbol{\pi}^4}{8} - \frac{\boldsymbol{\pi}^6}{16} - \frac{5\boldsymbol{\pi}^8}{128} + \dots \quad (\text{A.3})$$

kao i:

$$\left(2 - \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2} - \frac{\boldsymbol{\pi}^4}{8} - \frac{\boldsymbol{\pi}^6}{16} - \frac{5\boldsymbol{\pi}^8}{128} + \dots \right)^{-1} = \frac{1}{2} + \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{8} + \frac{\boldsymbol{\pi}^4}{16} + \frac{5\boldsymbol{\pi}^6}{128} + \frac{7\boldsymbol{\pi}^8}{256} + \dots \quad (\text{A.4})$$

pri čemu smo se zadržali na članovima u kojima figurišu proizvodi maksimalno dva Goldstonova polja, dok će u interakcionom delu figurisati članovi sa po četiri i više Goldstonovih polja, kod kojih je kuplovanje derivativnog tpa. S obzirom na to da smo u radu račun bazirali na prvom redu popravke, prilikom konstrukcije interakcionog dela od interesa će biti članovi dati proizvodom maksimalno četiri Goldstonova polja:

$$\mathcal{L}_{\text{int}} \approx \frac{\Sigma}{8} \boldsymbol{\pi}^2 (\partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1) - \frac{F^2}{2} \sum_{\alpha} (\boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha \boldsymbol{\pi}) (\boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha \boldsymbol{\pi}). \quad (\text{A.5})$$

Drugi član slobodnog dela lagranžijana, ali i drugi član interakcionog dela, mogu se zapisati u mnogo kompaktnijoj formi ukoliko ih raspišemo. Poći ćemo od drugog člana izraza (A.2). Naime, možemo uočiti da je:

$$\partial_\alpha (\boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha \boldsymbol{\pi}) = \partial_\alpha \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha \boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\alpha \partial_\alpha \boldsymbol{\pi}. \quad (\text{A.6})$$

Član sa leve strane predstavlja divergenciju polja u zagradi i, u skladu sa Gausovom teoremom, njegova integracija po zapremini daće nulu. Dakle, članove sa divergencijom možemo i ubuduće odbaciti pošto će se efektivni hamiltonijan svakako kasnije kreirati na osnovu efektivnog lagranžijana putem integracije po zapremini. Sada se slobodni deo lagranžijana može zapisati u obliku:

$$\mathcal{L}_{\text{free}} = \frac{\Sigma}{2} (\partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1) + \frac{F^2}{2} \boldsymbol{\pi} \nabla^2 \boldsymbol{\pi} - \frac{1}{2} \Sigma \mu \widetilde{\mathcal{H}} \boldsymbol{\pi}^2, \quad (\text{A.7})$$

što je i konačan oblik koji smo videli u prvoj glavi doktorata.

Drugi član izraza (A.5) možemo zapisati u podesnijoj formi nakon kraćeg računa:

$$\partial_\alpha(\pi^2 \partial_\alpha \pi^2) = 2(\pi \cdot \partial_\alpha \pi) \partial_\alpha \pi^2 + \pi^2 \cdot \partial_\alpha \partial_\alpha \pi^2 = 4(\pi \cdot \partial_\alpha \pi)(\pi \cdot \partial_\alpha \pi) + \pi^2 \cdot \partial_\alpha \partial_\alpha \pi^2. \quad (\text{A.8})$$

Ponovo ćemo odbaciti divergenciju polja u zagradi i time dolazimo do izraza:

$$(\pi \cdot \partial_\alpha \pi)(\pi \cdot \partial_\alpha \pi) = -\frac{1}{4} \pi^2 \cdot \partial_\alpha \partial_\alpha \pi^2, \quad (\text{A.9})$$

što drugi član (A.5) svodi na:

$$-\frac{F^2}{2} \sum_\alpha (\pi \cdot \partial_\alpha \pi)(\pi \cdot \partial_\alpha \pi) = \frac{F^2}{8} \sum_\alpha \pi^2 \cdot \partial_\alpha \partial_\alpha \pi^2. \quad (\text{A.10})$$

Međutim, možemo uočiti da i interakcioni član efektivnog lagranžijana sadrži izvode po vremenu, koji generalno usložnjavaju problem prilikom kanonske kvantizacije. Kao što je i spomenuto u samom doktoratu, ove poteškoće lako ćemo se rešiti ako iz interakcionog dela lagranžijana eliminišemo vremenske izvode pomoću Landau-Lifšicove jednačine kretanja:

$$\partial_t U^a + \frac{F^2}{\Sigma} \sum_{i,j} \varepsilon_{aij} (\nabla^2 U^i) U^j = 0. \quad (\text{A.11})$$

U našem slučaju se to svodi na:

$$\begin{aligned} \partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1 &= \frac{F^2}{\Sigma} (\nabla^2 U^3) \pi^2 \pi^2 - \frac{F^2}{\Sigma} (\nabla^2 \pi^2) U^3 \pi^2 + \frac{F^2}{\Sigma} (\nabla^2 U^3) \pi^1 \pi^1 - \frac{F^2}{\Sigma} (\nabla^2 \pi^1) U^3 \pi^1 = \\ &= -\frac{F^2}{\Sigma} (\nabla^2 \pi^2) \left(1 - \frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^4}{8} - \frac{\pi^6}{16} - \frac{5\pi^8}{128} + \dots\right) \pi^2 \\ &\quad + \frac{F^2}{\Sigma} \left(\nabla^2 \left(1 - \frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^4}{8} - \frac{\pi^6}{16} - \frac{5\pi^8}{128} + \dots\right)\right) \pi^2 \pi^2 \\ &\quad + \frac{F^2}{\Sigma} \left(\nabla^2 \left(1 - \frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^4}{8} - \frac{\pi^6}{16} - \frac{5\pi^8}{128} + \dots\right)\right) \pi^1 \pi^1 \\ &\quad - \frac{F^2}{\Sigma} (\nabla^2 \pi^1) \left(1 - \frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^4}{8} - \frac{\pi^6}{16} - \frac{5\pi^8}{128} + \dots\right) \pi^1, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

što u konačnom izrazu dobija formu:

$$\begin{aligned} \partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1 &= -\frac{F^2}{\Sigma} \pi \cdot \nabla^2 \pi \left(1 - \frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^4}{8} - \frac{\pi^6}{16} - \frac{5\pi^8}{128} + \dots\right) \\ &\quad + \frac{F^2}{\Sigma} \pi^2 \nabla^2 \left(1 - \frac{\pi^2}{2} - \frac{\pi^4}{8} - \frac{\pi^6}{16} - \frac{5\pi^8}{128} + \dots\right). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Sada je neophodno zadržati samo članove koji doprinose prvom redu popravke i odbaciti više, te je prvi član izraza (A.5) oblika:

$$\frac{\Sigma}{8} \pi^2 \partial_t \pi^1 \pi^2 - \partial_t \pi^2 \pi^1 \approx -\frac{F^2}{8} \pi^2 \pi \cdot \nabla^2 \pi. \quad (\text{A.14})$$

Dakle, interakcioni lagranžijan (A.5) postaje:

$$\mathcal{L}_{\text{int}} \approx \frac{F^2}{8} \pi^2 \nabla^2 \pi^2 - \frac{F^2}{8} \pi^2 \pi \cdot \nabla^2 \pi, \quad (\text{A.15})$$

što u potpunosti odgovara relaciji datoj u prvog glavi doktorata.

A.2 Dijagrami sa jednom petljom

U prvoj glavi doktorata računali smo prvu popravku disperzije, koja se može slikovito prikazati Fajnmanovim dijagramima sa jednom petljom. Dakle, na osnovu raspisanih izraza:

$$\text{Diagram 4(a)} = \text{Diagram 4(a) with loop } + \text{Diagram 4(a) with loop} = \frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 (\widehat{\mathbf{k}}^2 + \widehat{\mathbf{p}}^2) \quad (\text{A.16})$$

i:

$$\text{Diagram 4(b)} = \text{Diagram 4(b) with loop } + \text{Diagram 4(b) with loop} = -\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}}^2, \quad (\text{A.17})$$

došli smo do konačnog oblika prve popravke:

$$\frac{1}{S} \frac{v_0}{2m_0} \sum_{j=1}^3 \frac{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2}{2D} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{p}}_j^2 \widehat{\mathbf{k}}_j^2, \quad (\text{A.18})$$

pri čemu smo iskoristili:

$$\int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}}_j^2 = \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \left(\widehat{\mathbf{k}}_j^2 + \widehat{\mathbf{p}}_j^2 - \frac{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2}{2D} \widehat{\mathbf{k}}_j^2 \widehat{\mathbf{p}}_j^2 \right), \quad (\text{A.19})$$

gde se j odnosi na vrstu suseda. U ovom prilogu detaljno ćemo raspisati izraz (A.19) da bismo se uverili u njegovu validnost. Naime, pođimo od definicije svojstvene vrednosti diskretnog laplasijana na rešetki:

$$\widehat{\mathbf{k}}_j^2 = \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2} \left(1 - \frac{1}{z_j} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right). \quad (\text{A.20})$$

Najpre ćemo raspisati zagradu iz (A.19):

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{k}}_j^2 + \widehat{\mathbf{p}}_j^2 - \frac{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2}{2D} \widehat{\mathbf{k}}_j^2 \widehat{\mathbf{p}}_j^2 &= \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2} \left(1 - \frac{1}{z_j} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right) + \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2} \left(1 - \frac{1}{z_j} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right) \\ &\quad - \frac{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2}{2D} \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2} \left(1 - \frac{1}{z_j} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right) \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2} \left(1 - \frac{1}{z_j} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right) = \\ &= \frac{2D}{|\boldsymbol{\lambda}_j|^2} \left(1 - \frac{1}{z_j^2} \left(\sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right) \cdot \left(\sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j} \right) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Podsetićemo se da su geometrijski faktori, koje smo uveli u prvoj glavi:

$$\gamma_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{z_j} \sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_j\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_j}, \quad (\text{A.22})$$

za tri različite vrste suseda oblika: $\gamma_1(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})$, $\gamma_2(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b})$ i $\gamma_3(\mathbf{k}) = \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}}{2}\right)$. Dakle, član sa proizvodom suma iz (A.21) za prvi tip suseda može se zapisati u obliku:

$$\frac{1}{z_1^2} \left(\sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_1\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_1} \right) \cdot \left(\sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_1\}} e^{i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\lambda}_1} \right) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{a}), \quad (\text{A.23})$$

dok za drugi tip važi:

$$\frac{1}{z_2^2} \left(\sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_2\}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda}_2} \right) \cdot \left(\sum_{\{\boldsymbol{\lambda}_2\}} e^{i\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\lambda}_2} \right) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{b}), \quad (\text{A.24})$$

a za treći:

$$\frac{1}{z_3^2} \left(\sum_{\{\lambda_3\}} e^{i\mathbf{k}\cdot\lambda_3} \right) \cdot \left(\sum_{\{\lambda_3\}} e^{i\mathbf{p}\cdot\lambda_3} \right) = \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{b}}{2}\right). \quad (\text{A.25})$$

Poznat nam je izraz za kosinus razlike:

$$\cos((\mathbf{k} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \sin(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}), \quad (\text{A.26})$$

a takođe i činjenica da je integral neparne funkcije u simetričnim granicama jednak nuli. Stoga su prilikom integracije po impulsu \mathbf{p} u (A.19), a s obzirom na činjenicu da je funkcija distribucije slobodnih eksitona $\langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0$ parna funkcija, u konačnom izrazu eliminisani sinusni članovi i preostaje nam samo:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \widehat{\mathbf{k} - \mathbf{p}_3}^2 &= \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \frac{2D}{|\lambda_3|^2} \left(1 - \cos\left(\frac{(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{b}}{2}\right) \right) = \\ &= \int_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle_0 \frac{2D}{|\lambda_3|^2} \left(1 - \gamma_3(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

čime je polazna relacija dokazana u slučaju trećeg tipa suseda, a još je lakše pokazati da isto važi i u slučaju preostale dve vrste suseda.

Prilog B

B.1 Redukovana matrica gustine. Parcijalni trag

Već je nagovešteno da je tehnika bazirana na matricama gustine često znatno elegantnije sredstvo prilikom analiziranja ponašanja nekog sistema u odnosu na svoj ekvivalent - pristup zasnovan na vektorima stanja. U matrici gustine sadržane su sve nužne informacije o datom kvantnom sistemu. Takođe, utvrđena su i izvesna pravila koja svaka matrica gustine ρ mora zadovoljavati:

1. svojstvo ermitovosti $\rho = \rho^\dagger$,
2. svojstvo normiranosti $\text{Tr} \rho = 1$,
3. svojstvo pozitivnosti $\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0$ za sva stanja $|\Psi\rangle$,
4. svojstvo $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$, pri čemu znak jednakosti važi samo za čista stanja.

Uočavamo da je, na osnovu četvrte navedene osobine, matrica gustine dobar pokazatelj prirode stanja, te razlikuje čista stanja od mešanih. Naime, matrica gustine čistog stanja data je u obliku:

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad (\text{B.1})$$

te za njih možemo ustanoviti važenje jednakosti $\rho^2 = \rho$. U slučaju da se sistem nalazi u mešanom stanju, pripadna matrica gustine je oblika:

$$\rho = \sum_i p_i |\Psi^i\rangle\langle\Psi^i|, \quad (\text{B.2})$$

pri čemu su p_i verovatnoće pojavljivanja stanja $|\Psi^i\rangle$ u datoj mešavini. Takođe, bitno je istaći da se iz oblika matrice gustine ne može doneti zaključak o pripadnom ansamblu stanja s obzirom na to dva različita ansambla stanja mogu dati istu matricu gustine. Dakle, informacija o stanju

sistema sa datom matricom gustine bazira se na samoj matrici gustine i ne može se ispratiti do ansambla stanja sistema bez dodatnih informacija.

Poseban značaj matrica gustine ima u kvantnoj informatici, gde ne samo da sadrži neophodne informacije o stanju sistema već omogućava i njegovu dekompoziciju na sastavne delove. Naime, ako se posmatra trokubitni sistem, pri čemu su dati oblici matrice \mathcal{A} :

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

koja pripada podsistemu iz prostora \mathcal{H}_A , matrice \mathcal{B} :

$$\mathcal{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.4})$$

koja pripada podsistemu iz prostora \mathcal{H}_B , i matrice \mathcal{C} iz prostora \mathcal{H}_C :

$$\mathcal{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

trag matrice $\mathcal{A} \otimes \mathcal{B} \otimes \mathcal{C}$ iz prostora $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$ nalazimo na sledeći način:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\mathcal{A} \otimes \mathcal{B} \otimes \mathcal{C}) &= \text{Tr} \left(\begin{bmatrix} a_{11}\mathcal{B} & a_{12}\mathcal{B} \\ a_{21}\mathcal{B} & a_{22}\mathcal{B} \end{bmatrix} \otimes \mathcal{C} \right) = \text{Tr} \begin{bmatrix} a_{11}b_{11}\mathcal{C} & a_{11}b_{12}\mathcal{C} & a_{12}b_{11}\mathcal{C} & a_{12}b_{12}\mathcal{C} \\ a_{11}b_{21}\mathcal{C} & a_{11}b_{22}\mathcal{C} & a_{12}b_{21}\mathcal{C} & a_{12}b_{22}\mathcal{C} \\ a_{21}b_{11}\mathcal{C} & a_{21}b_{12}\mathcal{C} & a_{22}b_{11}\mathcal{C} & a_{22}b_{12}\mathcal{C} \\ a_{21}b_{21}\mathcal{C} & a_{21}b_{22}\mathcal{C} & a_{22}b_{21}\mathcal{C} & a_{22}b_{22}\mathcal{C} \end{bmatrix} = \\ &= \text{Tr} \begin{bmatrix} a_{11}b_{11}c_{11} & a_{11}b_{11}c_{12} & a_{11}b_{12}c_{11} & a_{11}b_{12}c_{12} & a_{12}b_{11}c_{11} & a_{12}b_{11}c_{12} & a_{12}b_{12}c_{11} & a_{12}b_{12}c_{12} \\ a_{11}b_{11}c_{21} & a_{11}b_{11}c_{22} & a_{11}b_{12}c_{21} & a_{11}b_{12}c_{22} & a_{12}b_{11}c_{21} & a_{12}b_{11}c_{22} & a_{12}b_{12}c_{21} & a_{12}b_{12}c_{22} \\ a_{11}b_{21}c_{11} & a_{11}b_{21}c_{12} & a_{11}b_{22}c_{11} & a_{11}b_{22}c_{12} & a_{12}b_{21}c_{11} & a_{12}b_{21}c_{12} & a_{12}b_{22}c_{11} & a_{12}b_{22}c_{12} \\ a_{11}b_{21}c_{21} & a_{11}b_{21}c_{22} & a_{11}b_{22}c_{21} & a_{11}b_{22}c_{22} & a_{12}b_{21}c_{21} & a_{12}b_{21}c_{22} & a_{12}b_{22}c_{21} & a_{12}b_{22}c_{22} \\ a_{21}b_{11}c_{11} & a_{21}b_{11}c_{12} & a_{21}b_{12}c_{11} & a_{21}b_{12}c_{12} & a_{22}b_{11}c_{11} & a_{22}b_{11}c_{12} & a_{22}b_{12}c_{11} & a_{22}b_{12}c_{12} \\ a_{21}b_{11}c_{21} & a_{21}b_{11}c_{22} & a_{21}b_{12}c_{21} & a_{21}b_{12}c_{22} & a_{22}b_{11}c_{21} & a_{22}b_{11}c_{22} & a_{22}b_{12}c_{21} & a_{22}b_{12}c_{22} \\ a_{21}b_{21}c_{11} & a_{21}b_{21}c_{12} & a_{21}b_{22}c_{11} & a_{21}b_{22}c_{12} & a_{22}b_{21}c_{11} & a_{22}b_{21}c_{12} & a_{22}b_{22}c_{11} & a_{22}b_{22}c_{12} \\ a_{21}b_{21}c_{21} & a_{21}b_{21}c_{22} & a_{21}b_{22}c_{21} & a_{21}b_{22}c_{22} & a_{22}b_{21}c_{21} & a_{22}b_{21}c_{22} & a_{22}b_{22}c_{21} & a_{22}b_{22}c_{22} \end{bmatrix} = \\ &= a_{11}b_{11}(c_{11} + c_{22}) + a_{11}b_{22}(c_{11} + c_{22}) + a_{22}b_{11}(c_{11} + c_{22}) + a_{22}b_{22}(c_{11} + c_{22}) = \\ &= (a_{11} + a_{22})(b_{11} + b_{22})(c_{11} + c_{22}) = \text{Tr}\mathcal{A} \text{Tr}\mathcal{B} \text{Tr}\mathcal{C}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

te je očigledno da parcijalni trag po odgovarajućem podsistemu može predstavljati dobro sredstvo za eliminaciju stepeni slobode tog podsistema iz celokupnog sistema. Shodno tome, matrica gustine željenog podsistema $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_C$, iz celokupnog sistema $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$, dobija se traženjem parcijalnog traga po podsistemu B:

$$\rho^{\text{AC}} = \text{Tr}_B \rho^{\text{ABC}}. \quad (\text{B.7})$$

Konkretno, za matricu gustine trokubitnog sistema datu formom:

$$\rho^{123} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} & \rho_{15} & \rho_{16} & \rho_{17} & \rho_{18} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{25} & \rho_{26} & \rho_{27} & \rho_{28} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} & \rho_{35} & \rho_{36} & \rho_{37} & \rho_{38} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} & \rho_{45} & \rho_{46} & \rho_{47} & \rho_{48} \\ \rho_{51} & \rho_{52} & \rho_{53} & \rho_{54} & \rho_{55} & \rho_{56} & \rho_{57} & \rho_{58} \\ \rho_{61} & \rho_{62} & \rho_{63} & \rho_{64} & \rho_{65} & \rho_{66} & \rho_{67} & \rho_{68} \\ \rho_{71} & \rho_{72} & \rho_{73} & \rho_{74} & \rho_{75} & \rho_{76} & \rho_{77} & \rho_{78} \\ \rho_{81} & \rho_{82} & \rho_{83} & \rho_{84} & \rho_{85} & \rho_{86} & \rho_{87} & \rho_{88} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

redukovana matrica gustine koja se traži vršenjem parcijalnog traga po drugom čvoru dobija se u skladu sa:

$$\rho^{13} = \text{Tr}_2 \rho^{123}, \quad (\text{B.9})$$

dok se u slučaju matrice gustine u kojoj su sačuvani stepeni slobode dva susedna kubita može pisati:

$$\rho^{12} = \text{Tr}_3 \rho^{123} \quad (\text{B.10})$$

ili:

$$\rho^{23} = \text{Tr}_1 \rho^{123}. \quad (\text{B.11})$$

Pošto je u ovom doktoratu korišćena redukovana matrica gustine oblika ρ^{13} , do nje dolazimo na sledeći način:

$$\begin{aligned} \rho^{13} = \text{Tr}_2 \rho^{123} &= \begin{bmatrix} \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{13} \\ \rho_{31} & \rho_{33} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{12} & \rho_{14} \\ \rho_{32} & \rho_{34} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{15} & \rho_{17} \\ \rho_{35} & \rho_{37} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{16} & \rho_{18} \\ \rho_{36} & \rho_{38} \end{bmatrix} \\ \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{21} & \rho_{23} \\ \rho_{41} & \rho_{43} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{22} & \rho_{24} \\ \rho_{42} & \rho_{44} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{25} & \rho_{27} \\ \rho_{45} & \rho_{47} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{26} & \rho_{28} \\ \rho_{46} & \rho_{48} \end{bmatrix} \\ \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{51} & \rho_{53} \\ \rho_{71} & \rho_{73} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{52} & \rho_{54} \\ \rho_{72} & \rho_{74} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{55} & \rho_{57} \\ \rho_{75} & \rho_{77} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{56} & \rho_{58} \\ \rho_{76} & \rho_{78} \end{bmatrix} \\ \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{61} & \rho_{63} \\ \rho_{81} & \rho_{83} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{62} & \rho_{64} \\ \rho_{82} & \rho_{84} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{65} & \rho_{67} \\ \rho_{85} & \rho_{87} \end{bmatrix} & \text{Tr} \begin{bmatrix} \rho_{66} & \rho_{68} \\ \rho_{86} & \rho_{88} \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \rho_{11} + \rho_{33} & \rho_{12} + \rho_{34} & \rho_{15} + \rho_{37} & \rho_{16} + \rho_{38} \\ \rho_{21} + \rho_{43} & \rho_{22} + \rho_{44} & \rho_{25} + \rho_{47} & \rho_{26} + \rho_{48} \\ \rho_{51} + \rho_{73} & \rho_{52} + \rho_{74} & \rho_{55} + \rho_{77} & \rho_{56} + \rho_{78} \\ \rho_{61} + \rho_{83} & \rho_{62} + \rho_{84} & \rho_{65} + \rho_{87} & \rho_{66} + \rho_{88} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

u skladu sa čime su dobijene redukovane matrice gustine (2.59) i (2.64). Za više informacija o samim matricama gustine, kao i o redukovanim matricama gustine i njihovoj ulozi u kvantnoj informatici, čitalac se upućuje na [86, 87, 182–184].

Prilog C

C.1 Runge-Kuta metod četvrtog reda

U trećem poglavlju doktorata spomenuto je da se diferencijalne jednačine prvog reda (3.21) i (3.23) rešavaju numeričkom integracijom Runge-Kuta metodom četvrtog reda [251–253]. Naime, cilj je rešiti jednačinu oblika:

$$\dot{u} = f(t, u), \quad u(t^0) = u^0 \quad (\text{C.1})$$

nad intervalom $[t^0, t^n]$, sa zadatim vremenskim korakom Δt . Ukoliko se krene od početnog uslova $u(t^0) = u^0$, svaki sledeći korak evolucije varijable u sa vremenskim korakom Δt računa se na sledeći način:

$$u^{i+1} = u^i + \frac{1}{6}(k^1 + 2k^2 + 2k^3 + k^4), \quad (\text{C.2})$$

pri čemu su koeficijenti k^i dati relacijama:

$$k^1 = \Delta t f(t^i, u^i), \quad k^2 = \Delta t f\left(t^i + \frac{\Delta t}{2}, u^i + \frac{k^1}{2}\right), \quad k^3 = \Delta t f\left(t^i + \frac{\Delta t}{2}, u^i + \frac{k^2}{2}\right) \quad (\text{C.3})$$

i:

$$k^4 = \Delta t f(t^i + \Delta t, u^i + k^3). \quad (\text{C.4})$$

Međutim, u slučaju od interesa treba rešiti sistem od $N = 8$ jednačina, te zadatku prilazimo sa većom pažnjom. Primena Runge-Kuta metoda četvrtog reda najpre će biti predstavljena

na primeru Frenkel-Kontorova modela podvrgnutog dejstvu ac+dc sila sa međučestičnim potencijalom oblika polinoma četvrtog stepena. Dakle, polazimo od sistema jednačina kretanja oblika:

$$\dot{u}_j = g\nabla^2 u_j - h(\nabla^2 u_j)^2 + f(\nabla^2 u_j)^3 - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j) + F_{\text{dc}} + F_{\text{ac}} \cos(2\pi\nu_0 t), \quad (\text{C.5})$$

pri čemu je $j = 1, 2, \dots, 8$ i:

$$\nabla^2 u_j = u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j. \quad (\text{C.6})$$

U proračunima je odabran vremenski korak $\Delta t = 0.02\nu_0^{-1} = 0.1$, a integracija se vrši do vremenskog trenutka t^n . Za početni trenutak uzima se $t^0 = 0$, a odgovarajuća polazna konfiguracija je $\{u_j(t^0)\} = \{j\omega\}$, tj.

$$u_1^0 = 0.5, \quad u_2^0 = 1.0, \quad u_3^0 = 1.5, \quad u_4^0 = 2.0, \quad u_5^0 = 2.5, \quad u_6^0 = 3.0, \quad u_7^0 = 3.5, \quad u_8^0 = 4.0. \quad (\text{C.7})$$

U tom slučaju, izraz (C.2) poprima formu:

$$u_j^{i+1} = u_j^i + \frac{1}{6}(k_j^1 + 2k_j^2 + 2k_j^3 + k_j^4), \quad (\text{C.8})$$

gde koeficijente k_j^1 , k_j^2 , k_j^3 i k_j^4 računamo na osnovu:

$$k_j^1 = \Delta t \left(g(u_{j+1}^i + u_{j-1}^i - 2u_j^i) - h(u_{j+1}^i + u_{j-1}^i - 2u_j^i)^2 + f(u_{j+1}^i + u_{j-1}^i - 2u_j^i)^3 - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j^i) + F_{\text{dc}} + F_{\text{ac}} \cos(2\pi\nu_0 t^i) \right), \quad (\text{C.9})$$

$$k_j^2 = \Delta t \left(g\left(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^1}{2} + u_{j-1}^i + \frac{k_{j-1}^1}{2} - 2u_j^i - 2\frac{k_j^1}{2}\right) - h\left(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^1}{2} + u_{j-1}^i + \frac{k_{j-1}^1}{2} - 2u_j^i - 2\frac{k_j^1}{2}\right)^2 + f\left(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^1}{2} + u_{j-1}^i + \frac{k_{j-1}^1}{2} - 2u_j^i - 2\frac{k_j^1}{2}\right)^3 - \frac{K}{2\pi} \sin\left(2\pi\left(u_j^i + \frac{k_j^1}{2}\right)\right) + F_{\text{dc}} + F_{\text{ac}} \cos\left(2\pi\nu_0\left(t^i + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) \right), \quad (\text{C.10})$$

$$k_j^3 = \Delta t \left(g\left(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^2}{2} + u_{j-1}^i + \frac{k_{j-1}^2}{2} - 2u_j^i - 2\frac{k_j^2}{2}\right) - h\left(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^2}{2} + u_{j-1}^i + \frac{k_{j-1}^2}{2} - 2u_j^i - 2\frac{k_j^2}{2}\right)^2 + f\left(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^2}{2} + u_{j-1}^i + \frac{k_{j-1}^2}{2} - 2u_j^i - 2\frac{k_j^2}{2}\right)^3 - \frac{K}{2\pi} \sin\left(2\pi\left(u_j^i + \frac{k_j^2}{2}\right)\right) + F_{\text{dc}} + F_{\text{ac}} \cos\left(2\pi\nu_0\left(t^i + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) \right) \quad (\text{C.11})$$

i:

$$k_j^4 = \Delta t \left(g\left(u_{j+1}^i + k_{j+1}^3 + u_{j-1}^i + k_{j-1}^3 - 2u_j^i - 2k_j^3\right) - h\left(u_{j+1}^i + k_{j+1}^3 + u_{j-1}^i + k_{j-1}^3 - 2u_j^i - 2k_j^3\right)^2 + f\left(u_{j+1}^i + k_{j+1}^3 + u_{j-1}^i + k_{j-1}^3 - 2u_j^i - 2k_j^3\right)^3 - \frac{K}{2\pi} \sin\left(2\pi\left(u_j^i + k_j^3\right)\right) + F_{\text{dc}} + F_{\text{ac}} \cos\left(2\pi\nu_0\left(t^i + \Delta t\right)\right) \right), \quad (\text{C.12})$$

uz upotrebu cikličnih graničnih uslova ($u_0^i = u_N^i - N\omega$, $u_{N+1}^i = u_1^i + N\omega$). Treba napomenuti da se procedura ponavlja sve dok se ne dosegne konačno vreme t^n (odnosno dok ne dođemo

do koraka $i = n = \frac{t^n - t^0}{\Delta t}$, pri čemu se tokom svakog vremenskog intervala Δt računa pozicija svake čestice u sistemu.

U slučaju eksponencijalnog odabira međučestične interakcije polazimo od sistema jednačina:

$$\dot{u}_j = e^{-(u_j - u_{j-1})} - e^{-(u_{j+1} - u_j)} - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j) + F_{dc} + F_{ac} \cos(2\pi \nu_0 t), \quad j = 1, 2, \dots, 8 \quad (\text{C.13})$$

pri čemu je ponovo odabrana polazna konfiguracija (C.7), početni trenutak $t^0 = 0$, kao i vremenski korak $\Delta t = 0.02\nu_0^{-1} = 0.1$. Pozicije nakon svakog vremenskog koraka ponovo se računaju u skladu sa (C.8), gde su sada koeficijenti k_j^1 , k_j^2 , k_j^3 i k_j^4 dati izrazima:

$$k_j^1 = \Delta t \left(e^{-(u_j^i - u_{j-1}^i)} - e^{-(u_{j+1}^i - u_j^i)} - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_j^i) + F_{dc} + F_{ac} \cos(2\pi \nu_0 t^i) \right), \quad (\text{C.14})$$

$$k_j^2 = \Delta t \left(e^{-(u_j^i + \frac{k_j^1}{2} - u_{j-1}^i - \frac{k_{j-1}^1}{2})} - e^{-(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^1}{2} - u_j^i - \frac{k_j^1}{2})} - \frac{K}{2\pi} \sin \left(2\pi \left(u_j^i + \frac{k_j^1}{2} \right) \right) + F_{dc} \right. \\ \left. + F_{ac} \cos \left(2\pi \nu_0 \left(t^i + \frac{\Delta t}{2} \right) \right) \right), \quad (\text{C.15})$$

$$k_j^3 = \Delta t \left(e^{-(u_j^i + \frac{k_j^2}{2} - u_{j-1}^i - \frac{k_{j-1}^2}{2})} - e^{-(u_{j+1}^i + \frac{k_{j+1}^2}{2} - u_j^i - \frac{k_j^2}{2})} - \frac{K}{2\pi} \sin \left(2\pi \left(u_j^i + \frac{k_j^2}{2} \right) \right) + F_{dc} \right. \\ \left. + F_{ac} \cos \left(2\pi \nu_0 \left(t^i + \frac{\Delta t}{2} \right) \right) \right), \quad (\text{C.16})$$

i:

$$k_j^4 = \Delta t \left(e^{-(u_j^i + k_j^3 - u_{j-1}^i - k_{j-1}^3)} - e^{-(u_{j+1}^i + k_{j+1}^3 - u_j^i - k_j^3)} - \frac{K}{2\pi} \sin \left(2\pi \left(u_j^i + k_j^3 \right) \right) + F_{dc} \right. \\ \left. + F_{ac} \cos \left(2\pi \nu_0 \left(t^i + \Delta t \right) \right) \right). \quad (\text{C.17})$$

Problem se nadalje rešava analogno opisanoj proceduri u slučaju međučestične interakcije oblika polinoma četvrtog stepena.

Literatura

- [1] J. Northrup, M. L. Chabinye, *Gap states in organic semiconductors: Hydrogen- and oxygen-induced states in pentacene*, Physical Review B **68**, 041202 (2003).
- [2] T. Smith, D. Vogel, K. Vogel, *Substituted pentacene semiconductors*, U.S. Patent No 6,864,396 (2005).
- [3] H. Morisaki, T. Koretsune, C. Hotta, J. Takeya, T. Kimura, Y. Wakabayashi, *Large surface relaxation in the organic semiconductor tetracene*, Nature Communications **5**, 5400 (2014).
- [4] A. Okemoto, K. Kishishita, S. Maeda, S. Gohda, M. Misaki, Y. Koshihara, K. Ishida, T. Horie, K. Taniya, Y. Ichihashi, S. Nishiyama, *Application of picene thin-film semiconductor as a photocatalyst for photocatalytic hydrogen formation from water*, Applied Catalysis B: Environmental **192**, 88 (2016).
- [5] T. Yang, F. Dai, H. Iino, M. Kanehara, X. Liu, T. Minari, C. Liu, J. Hanna, *Solution-processable liquid crystalline chrysene semiconductors with wide band gap: Self-organization and carrier transport properties*, Organic Electronics **63**, 184 (2018).
- [6] Y. Wang, L. Sun, C. Wang, F. Yang, X. Ren, X. Zhang, H. Dong, W. Hu, *Organic crystalline materials in flexible electronics*, Chemical Society Reviews **48**, 1492 (2019).
- [7] M. Gershenson, V. Podzorov, A. Morpurgo, *Colloquium: Electronic transport in single-crystal organic transistors*, Reviews of Modern Physics **78**, 973 (2006).
- [8] P. Peumans, S. Uchida, S. R. Forrest, *Materials for Sustainable Energy: A Collection of Peer-Reviewed Research and Review Articles from Nature Publishing Group* (str. 94-98) (World Scientific, 2011).
- [9] G. Li, V. Shrotriya, J. Huang, Y. Yao, T. Moriarty, K. Emery, Y. Yang, *High-efficiency solution processable polymer photovoltaic cells by self-organization of polymer blends*, Nature Materials **4**, 864 (2011).
- [10] M. A. Baldo, D. O'Brien, Y. You, A. Shoustikov, S. Sibley, M. Thompson, S. R. Forrest, *Highly efficient phosphorescent emission from organic electroluminescent devices*, Nature **395**, 151 (1998).
- [11] S. R. Forrest, *The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic*, Nature **428**, 911 (2004).
- [12] R. Mitsuhashi, Y. Suzuki, Y. Yamanari, H. Mitamura, T. Kambe, N. Ikeda, H. Okamoto, A. Fujiwara, M. Yamaji, N. Kawasaki, Y. Maniwa, Y. Kubozono, *Superconductivity in alkali-metal-doped picene*, Nature **464**, 76 (2010).
- [13] S. R. Forrest, *Ultrathin Organic Films Grown by Organic Molecular Beam Deposition and Related Techniques*, Chemical Reviews **97**, 1793 (1997).
- [14] V. Agranovich, *Excitations in organic solids* (Oxford University Press, 2008).
- [15] A. Rustagi, A. Kemper, *Photoemission signature of excitons*, Physical Review B **97**, 235310 (2018).
- [16] N. S. Averkiev, D. A. Zaitsev, G. M. Savchenko, R. P. Seisyan, *"Exciton" photoconductivity in GaAs crystals*, Semiconductors **48**, 1275 (2014).

- [17] E. J. H. Lee, C. Ribeiro, T. R. Giraldi, E. Longo, E. R. Leite, *Photoluminescence in quantum-confined SnO₂ nanocrystals: Evidence of free exciton decay*, Applied Physics Letters **84**, 1745 (2004).
- [18] V. Agranovich, G. Bassani, *Thin Films and Nanostructures: Electronic Excitations in Organic Based Nanostructures, Volume 31* (Elsevier Academic Press, 2003).
- [19] V. Agranovich, V. Ginzburg, *Crystal Optics with Spatial Dispersion and Excitons* (Springer-Verlag Berlin and Heidelberg, 1984).
- [20] B. Tošić, *Statistička fizika* (Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu, Institut za fiziku, 1978).
- [21] V. May, O. Kühn, *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems* (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA Weinheim, 2011).
- [22] F. Roth, B. Mahns, S. Hampel, M. Nohr, H. Berger, B. Büchner, M. Knupfer, *Exciton properties of selected aromatic hydrocarbon systems*, The European Physical Journal B **86**, 66 (2013).
- [23] F. Roth, M. Knupfer, *Electronic excitation spectrum of doped organic thin films investigated using electron energy-loss spectroscopy*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **204**, 23 (2015).
- [24] M. Knupfer, H. Berger, *Dispersion of electron-hole excitations in pentacene along (100)*, Chemical Physics **325**, 92 (2006).
- [25] R. Schuster, M. Knupfer, H. Berger, *Exciton Band Structure of Pentacene Molecular Solids: Breakdown of the Frenkel Exciton Model*, Physical Review Letters **98**, 037402 (2007).
- [26] F. Roth, R. Schuster, A. König, M. Knupfer, H. Berger, *Momentum dependence of the excitons in pentacene*, The Journal of Chemical Physics **136**, 204708 (2012).
- [27] F. Roth, M. Nohr, S. Hampel, M. Knupfer, *Low-energy exciton pocket at finite momentum in tetracene molecular solids*, Europhysics Letters **112**, 37004 (2015).
- [28] F. Roth, B. Mahns, B. Büchner, M. Knupfer, *Exciton character in picene molecular solids*, Physical Review B **83**, 165436 (2011).
- [29] F. Roth, B. Mahns, R. Schönfelder, S. Hampel, M. Nohr, B. Büchner, M. Knupfer, *Comprehensive studies of the electronic structure of pristine and potassium doped chrysene investigated by electron energy-loss spectroscopy*, The Journal of Chemical Physics **137**, 114508 (2012).
- [30] M. Pope, C. Swenberg, *Electronic processes in organic solids*, Annual Review of Physical Chemistry **35**, 613 (1984).
- [31] J. Cornil, J. P. Calbert, J. L. Brdas, *Electronic Structure of the Pentacene Single Crystal: Relation to Transport Properties*, Journal of the American Chemical Society **123**, 1250 (2001).
- [32] D. Holmes, S. Kumaraswamy, A. J. Matzger, K. P. C. Vollhardt, *On the Nature of Non-planarity in the [N]Phenylenes*, Chemistry – A European Journal **5**, 3399 (1999).
- [33] P. Cudazzo, F. Sottile, A. Rubio, M. Gatti, *Exciton dispersion in molecular solids*, Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 113204 (2015).
- [34] V. Stehr, J. Pfister, R. F. Fink, B. Engels, C. Deibel, *First-principles calculations of anisotropic charge-carrier mobilities in organic semiconductor crystals*, Physical Review B **83**, 155208 (2011).

- [35] P. Cudazzo, M. Gatti, A. Rubio, *Excitons in molecular crystals from first-principles many-body perturbation theory: Picene versus pentacene*, Physical Review B **86**, 195307 (2012).
- [36] P. Cudazzo, M. Gatti, A. Rubio, F. Sottile, *Frenkel versus charge-transfer exciton dispersion in molecular crystals*, Physical Review B **88**, 195152 (2013).
- [37] L. Kronik, J. B. Neaton, *Excited-State Properties of Molecular Solids from First Principles*, Annual Review of Physical Chemistry **67**, 587 (2016).
- [38] S. Sharifzadeh, P. Darancet, L. Kronik, J. B. Neaton, *Low-Energy Charge-Transfer Excitons in Organic Solids from First-Principles: The Case of Pentacene*, The Journal of Physical Chemistry Letters **4**, 2197 (2013).
- [39] S. Gombar, P. Mali, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, S. Radošević, *Dynamics of Frenkel Excitons in Pentacene*, Materials **11**, 2219 (2018).
- [40] M. Rutonjski, P. Mali, S. Radošević, S. Gombar, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, *Exciton dynamics in different aromatic hydrocarbon systems*, Chinese Physics B **29**, 107103 (2020).
- [41] J. Frenkel, *On the Transformation of light into Heat in Solids. I*, Physical Review **37**, 17 (1931),
- [42] J. Frenkel, *On the Transformation of light into Heat in Solids. II*, Physical Review **37**, 1276 (1931).
- [43] V. van Amerongen, L. Valkunas, R. van Grondelle, *Photosynthetic Excitons* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. Singapore, 2000).
- [44] L. Valkunas, D. Abramavicius, T. Mančal, *Molecular Excitation Dynamics and Relaxation* (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA Weinheim, 2013).
- [45] V. Agranovich, B. Toshich, *Collective Properties of Frenkel Excitons*, Soviet Physics JETP **26**, 104 (1968).
- [46] V. Janković, T. Mančal, *Exact description of excitonic dynamics in molecular aggregates weakly driven by light*, The Journal of Chemical Physics **153**, 244122 (2020).
- [47] S. V. Tyablikov, *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (Springer New York, 1967).
- [48] P. Fröbrich, P. J. Kuntz, *Many-body Green's function theory of Heisenberg films*, Physics Reports **432**, 223 (2006).
- [49] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer New York, 2012).
- [50] E. Manousakis, *The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides*, Reviews of Modern Physics **63**, 1 (1991).
- [51] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism* (Springer New York, 2009).
- [52] A. W. Sandvik, J. Kurkijärvi, *Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems*, Physical Review B **43**, 5950 (1991).
- [53] M. Pantić, D. Kapor, S. Radošević, P. Mali, *Phase diagram of spin-1/2 quantum Heisenberg J_1 - J_2 antiferromagnet on the body-centered-cubic lattice in random phase approximation*, Solid State Communications **182**, 55 (2014).
- [54] C. P. Hofmann, *Spin-wave scattering in the effective Lagrangian perspective*, Physical Review B **60**, 388 (1999).

- [55] C. P. Hofmann, *Low-temperature properties of two-dimensional ideal ferromagnets*, Physical Review B **86**, 054409 (2012).
- [56] S. Radošević, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, D. Kapor, *Magnon Energy Renormalization and Low-Temperature Thermodynamics of $O(3)$ Heisenberg Ferromagnets*, Annals of Physics **339**, 382 (2013).
- [57] S. Radošević, *Magnon-Magnon Interactions in $O(3)$ Ferromagnets and Equations of Motion for Spin Operators*, Annals of Physics **362**, 336 (2015).
- [58] Grupa autora, *Jubilej Zvonka Marića* (Sveske fizičkih nauka (SFIN), godina V, broj 2, str. 27-49, Beograd, 1992).
- [59] F. Dyson, *General Theory of Spin-Wave Interactions*, Physical Review **102**, 1217 (1956).
- [60] M. Knupfer, H. Berger, *Dispersion of electron-hole excitations in pentacene along (100)*, Chemical Physics **325**, 92 (2006).
- [61] H. Marciniak, M. Fiebig, M. Huth, S. Schiefer, B. Nickel, F. Selmaier, S. Lochbrunner, *Ultrafast Exciton Relaxation in Microcrystalline Pentacene Films*, Physical Review Letters **99**, 176402 (2007).
- [62] A. S. Davydov, *Theory of molecular excitons*, Soviet Physics Uspekhi **7**, 145 (1964).
- [63] R. B. Campbell, J. Monteath Robertson, J. Trotter, *The crystal and molecular structure of pentacene*, Acta Crystallographica **14**, 705 (1961).
- [64] D. Faltermeier, B. Gompf, M. Dressel, A. K. Tripathi, J. Pflaum, *Optical properties of pentacene thin films and single crystals*, Physical Review B **74**, 125416 (2006).
- [65] D. Stancil, A. Prabhakar, *Spin Waves: Theory and Applications* (Springer New York, 2009).
- [66] S. Sarker, C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, M. Ma, *Bosonic mean-field theory of quantum Heisenberg spin systems: Bose condensation and magnetic order*, Physical Review B **40**, 5028 (1989).
- [67] V. Agranovich, B. Toshich, *Collective properties of Frenkel excitons*, Soviet Physics JETP **26**, 104 (1968).
- [68] H. Leutwyler, *Nonrelativistic effective Lagrangians*, Physical Review D **49**, 3033 (1994).
- [69] Y. Nambu, G. Jona-Lasinio, *Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. I*, Physical Review **122**, 345 (1961).
- [70] Y. Nambu, G. Jona-Lasinio, *Dynamical model of elementary particles based on an analogy with superconductivity. II*, Physical Review **124**, 246 (1961).
- [71] J. Goldstone, *Field theories with \llcorner Superconductor \ggcorner solutions*, Il Nuovo Cimento **19**, 154 (1961).
- [72] S. Radošević, Doktorska disertacija: *Termodinamička svojstva složenih antiiferomagnetnih sistema opisanih Hajzenbergovim modelom* (Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Novom Sadu, 2012).
- [73] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields, Volume I Foundations*, (Cambridge University Press, 1995).
- [74] R. Lange, *Nonrelativistic Theorem Analogous to the Goldstone Theorem*, Physical Review **146**, 301 (1966).

- [75] H. Leutwyler, *On the foundations of chiral perturbation theory*, Annals of Physics **235**, 165 (1994).
- [76] C. K. Chow, *Discretization errors and rotational symmetry: the Laplacian operator on non-hypercubical lattices*, Nuclear Physics B **547**, 281 (1999).
- [77] R. Mattuck, *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem* (Dover Publications, Inc., New York, 1967).
- [78] J. Zinn-Justin, *Phase Transitions and Renormalization Group* (Oxford University Press, 2007).
- [79] A. Fetter, J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1971).
- [80] T. Brauner, M. F. Jakobsen, *Scattering amplitudes of massive Nambu-Goldstone bosons*, Physical Review D **97**, 025021 (2018).
- [81] S. Gongyo, Y. Kikuchi, T. Hyodo, T. Kunihiro, *Effective field theory and the scattering process for magnons in ferromagnets, antiferromagnets, and ferrimagnets*, Progress of Theoretical and Experimental Physics **2016**, 083B01 (2016).
- [82] F. Dyson, *General Theory of Spin-Wave Interactions*, Physical Review **102**, 1217 (1956).
- [83] F. Dyson, *Thermodynamic Behavior of an Ideal Ferromagnet*, Physical Review **102**, 1230 (1956).
- [84] G. E. Moore, *Cramming more components onto integrated circuits*, Electronics **38**,114 (1965).
- [85] D. Geer, *Chip makers turn to multicore processors*, Computer **38**,11 (2005).
- [86] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2000).
- [87] V. Vedral, *Introduction to Quantum Information Science* (Oxford University Press, 2006).
- [88] I. Dolinka, *Kratak uvod u analizu algoritama* (Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Novom Sadu, 2018).
- [89] R. P. Feynman, *Simulating physics with computers*, International Journal of Theoretical Physics **21**, 467 (1982).
- [90] D. Deutsch, *Quantum theory, the Church–Turing principle and the universal quantum computer*, Proceedings of the Royal Society of London A **400**, 97 (1985).
- [91] P. S. Emani, J. Warrell, A. Anticevic, S. Bekiranov, M. Gandal, M. J. McConnell, G. Sapiro, A. Aspuru-Guzik, J. T. Baker, M. Bastiani, J. D. Murray, S. N. Sotiropoulos, J. Taylor, G. Senthil, T. Lehner, M. B. Gerstein, A. W. Harrow, *Quantum computing at the frontiers of biological sciences*, Nature Methods (2021).
- [92] B. P. Lanyon, J. D. Whitfield, G. G. Gillett, M. E. Goggin, M. P. Almeida, I. Kassal, J. D. Biamonte, M. Mohseni, B. J. Powell, M. Barbieri, A. Aspuru-Guzik, A. G. White, *Towards quantum chemistry on a quantum computer*, Nature Chemistry **2**, 106 (2010).
- [93] Y. Cao, J. Romero, J. P. Olson, M. Degroote, P. D. Johnson, M. Kieferova, I. D. Kivlichan, T. Menke, B. Peropadre, N. P. D. Sawaya, S. Sim, L. Veis, A. Aspuru-Guzik, *Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing*, Chemical Reviews **119**, 10856 (2019).

- [94] J. I. Colless, V. V. Ramasesh, D. Dahlen, M. S. Blok, M. E. Kimchi-Schwartz, J. R. McClean, J. Carter, W. A. de Jong, I. Siddiqi, *Computation of Molecular Spectra on a Quantum Processor with an Error-Resilient Algorithm*, Physical Review X **8**, 011021 (2018).
- [95] R. Orús, S. Mugeld, E. Lizasod, *Quantum computing for finance: Overview and prospects*, Reviews in Physics **4**, 100028 (2019).
- [96] L. K. Grover, *A fast quantum mechanical algorithm for database search*, (STOC '96: Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of Computing, str. 212, Philadelphia, 1996).
- [97] P. W. Shor, *Algorithms for quantum computing* (Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society Press, str. 124, California, 1994).
- [98] J. S. Bell, *On the Einstein Podolsky Rosen Paradox*, Physics **1**, 195 (1964).
- [99] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, R. A. Holt, *Proposed Experiment to Test Local Hidden-Variable Theories*, Physical Review Letters **23**, 880 (1969).
- [100] Y. Wang, Y. Li, Z. Yin, B. Zeng, *6-qubit IBM universal quantum computer can be fully entangled*, npj Quantum Information volume **4**, 46 (2018).
- [101] N. Friis, O. Marty, C. Maier, C. Hempel, M. Holzäpfel, P. Jurcevic, M. B. Plenio, M. Huber, C. Roos, R. Blatt, B. Lanyon, *Observation of Entangled States of a Fully Controlled 20-Qubit System*, Physical Review X **8**, 021012 (2018).
- [102] W. G. Unruh, *Maintaining coherence in quantum computers*, Physical Review A **51**, 992 (1995).
- [103] D. Stucki, N. Gisin, O. Guinnard, G. Ribordy, H. Zbinden, *Quantum Key Distribution over 67 km with a plug & play system*, New Journal of Physics **4**, 41 (2002).
- [104] C. Gobby, Z. L. Yuan, A. J. Shields, *Quantum key distribution over 122 km of standard telecom fiber*, Applied Physics Letters **84**, 3762 (2004).
- [105] S. Gröblacher, T. Jennewein, A. Vaziri, G. Weihs, A. Zeilinger, *Experimental quantum cryptography with qutrits*, New Journal of Physics **8**, 75 (2006).
- [106] T. Brecht, W. Pfaff, C. Wang, Y. Chu, L. Frunzio, M. H. Devoret, R. J. Schoelkopf, *Multilayer microwave integrated quantum circuits for scalable quantum computing*, npj Quantum Information volume **2**, 16002 (2016).
- [107] G. Moody, C. McDonald, A. Feldman, T. Harvey, R. P. Mirin, K. L. Silverman, *Electronic Enhancement of the Exciton Coherence Time in Charged Quantum Dots*, Physical Review Letters **116**, 037402 (2016).
- [108] P. W. Deelman, L. F. Edge, C. A. Jackson, *Metamorphic materials for quantum computing*, MRS Bulletin **41**, 224 (2016).
- [109] B. Hacker, S. Welte, G. Rempe, S. Ritter, *A photon-photon quantum gate based on a single atom in an optical resonator*, Nature **536**, 193 (2016).
- [110] M. Saffman, *Quantum computing with atomic qubits and Rydberg interactions: progress and challenges*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **49**, 202001 (2016).
- [111] X.-L. Wang, L.-K. Chen, W. Li, H.-L. Huang, C. Liu, C. Chen, Y.-H. Luo, Z.-E. Su, D. Wu, Z.-D. Li, H. Lu, Y. Hu, X. Jiang, C.-Z. Peng, L. Li, N.-L. Liu, Y.-A. Chen, C.-Y. Lu, J.-W. Pan, *Experimental Ten-Photon Entanglement*, Physical Review Letters **117**, 210502 (2016).

- [112] M. Veldhorst, H. G. J. Eenink, C. H. Yang, A. S. Dzurak, *Silicon CMOS architecture for a spin-based quantum computer*, Nature Communications **8**, 1766 (2017).
- [113] D. M. Zajac, A. J. Sigillito, M. Russ, F. Borjans, J. M. Taylor, G. Burkard, J. R. Petta, *Resonantly driven CNOT gate for electron spins*, Science **359**, 439 (2018).
- [114] C. E. Bradley, J. Randall, M. H. Abobeih, R. C. Berrevoets, M. J. Degen, M. A. Bakker, M. Markham, D. J. Twitchen, T. H. Taminiau, *A Ten-Qubit Solid-State Spin Register with Quantum Memory up to One Minute*, Physical Review X **9**, 031045 (2019).
- [115] Benjamin Schumacher, *Quantum coding*, Physical Review A **51**, 2738 (1995).
- [116] I. Kassal, J. D. Whitfield, A. Perdomo-Ortiz, M.-H. Yung, A. Aspuru-Guzik, *Simulating Chemistry Using Quantum Computers*, Annual Review of Physical Chemistry **62**, 185 (2011).
- [117] K. Osbourne, J. M. Martinis, *Superconducting Qubits and the Physics of Josephson Junctions* (Les Houches conference proceedings, 2003).
- [118] M. H. Devoret, A. Wallraff, J. M. Martinis, *Superconducting Qubits: A Short Review*, arXiv:cond-mat/0411174 (2004).
- [119] P. C. E. Stampa, A. Gaita-Arinoa, *Spin-based quantum computers made by chemistry: hows and whys*, Journal of Materials Chemistry **19**, 1718 (2009).
- [120] J. Schliemann, D. Loss, A. H. MacDonald, *Double-occupancy errors, adiabaticity, and entanglement of spin qubits in quantum dots*, Physical Review B **63**, 085311 (2001).
- [121] Q. Li, L. Cywiński, D. Culcer, X. Hu, S. D. Sarma, *Exchange coupling in silicon quantum dots: Theoretical considerations for quantum computation*, Physical Review B **81**, 085313 (2010).
- [122] T. D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, Y. Nakamura, C. Monroe, J. L. O'Brien, *Quantum computers*, Nature **464**, 45 (2010).
- [123] D. Loss, D. P. DiVincenzo, *Quantum computation with quantum dots*, Physical Review A **57**, 120 (1998).
- [124] Y. P. Kandel, H. Qiao, S. Fallahi, G. C. Gardner, M. J. Manfra, J. M. Nichol, *Coherent spin-state transfer via Heisenberg exchange*, Nature **573**, 553 (2019).
- [125] D. Loss, D.P. DiVincenzo, *Quantum computation with quantum dots*, Physical Review A **57**, 120 (1998).
- [126] C. J. Wellard, L. C. L. Hollenberg, F. Parisoli, L. M. Kettle, H.-S. Goan, J. A. L. McIntosh, D. N. Jamieson, *Electron exchange coupling for single-donor solid-state spin qubits*, Physical Review B **68**, 195209 (2003).
- [127] M. Manojlović, M. Pavkov, M. Škrinjar, M. Pantić, D. Kapor, S. Stojanović, *Spin-wave dispersion and transition temperature in the cuprate antiferromagnet La_2CuO_4* , Physical Review B **68**, 014435 (2003).
- [128] M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, M. Sigrist, *Field- and pressure-induced magnetic quantum phase transitions in $TlCuCl_3$* , Physical Review B **69**, 054423 (2004).
- [129] M. Manojlović, M. Pavkov, M. Škrinjar, M. Pantić, D. Kapor, S. Stojanović, *Mermin-Wagner theorem analogous treatment of the long-range order in La_2CuO_4 -type compound spin models*, Physical Review B **71**, 132510 (2005).
- [130] S. Radošević, M. Pavkov-Hrvojević, M. Pantić, M. Rutonjski, D. Kapor, M. Škrinjar, *Magnetic properties of quasi two-dimensional antiferromagnet Rb_2MnCl_4 with XXZ interaction anisotropy*, The European Physical Journal B **68**, 511 (2009).

- [131] P. Dai, *Antiferromagnetic order and spin dynamics in iron-based superconductors*, Reviews of Modern Physics **87**, 855 (2015).
- [132] K. Yang, K. Moon, L. Zheng, A. H. MacDonald, S. M. Girvin, D. Yoshioka, Shou-Cheng Zhang, *Quantum ferromagnetism and phase transitions in double-layer quantum Hall systems*, Physical Review Letters **72**, 732 (1994).
- [133] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2013).
- [134] R. Fazio, H. van der Zant, *Quantum phase transitions and vortex dynamics in superconducting networks*, Physical Reports **355**, 235 (2001).
- [135] X. G. Wen, *Quantum Field Theory of Many Body Systems* (Oxford University Press, 2007).
- [136] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, 2011).
- [137] M. R. Pantić, D. V. Kapor, S. M. Radošević, P. Mali, *Phase diagram of spin-1/2 quantum Heisenberg $J_1 - J_2$ antiferromagnet on the body-centered-cubic lattice in random phase approximation*, Solid State Communications **182**, 55 (2014)
- [138] P. Müller, J. Richter, A. Hauser, D. Ihle, *Thermodynamics of the frustrated $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnet on the body-centered cubic lattice with arbitrary spin*, The European Physical Journal B **88**, 159 (2015).
- [139] D. J. J. Farnell, O. Götze, J. Richter, *Ground-state ordering of the $J_1 - J_2$ model on the simple cubic and body-centered cubic lattices*, Physical Review B **93**, 235123 (2016).
- [140] A. Auerbach, *Interacting electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag New York, 1998).
- [141] P. Müller, J. Richter, D. Ihle, *Thermodynamics of frustrated ferromagnetic spin-1/2 Heisenberg chains: Role of interchain coupling*, Physical Review B **95**, 134407 (2017).
- [142] Q. Meng, X. Sheng-Long, T. Ying-Juan, T. Dong-Ping, *Thermal entanglement in a two-qubit Heisenberg XY chain with the Dzyaloshinskii–Moriya interaction*, Chinese Physics B **17**, 2800 (2008).
- [143] F.-W. Ma, S.-X. Liu, X.-M. Kong, *Quantum entanglement and quantum phase transition in the XY model with staggered Dzyaloshinskii–Moriya interaction*, Physical Review A **84**, 042302 (2011).
- [144] F. Ares, J. G. Esteve, F. Falceto, A. R. de Queiroz, *Entanglement in fermionic chains with finite-range coupling and broken symmetries*, Physical Review A **92**, 042334 (2015).
- [145] G.-Q. Zhang, J.-B. Xu, *Quantum coherence of an XY spin chain with Dzyaloshinskii–Moriya interaction and quantum phase transition*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **50**, 265303 (2017).
- [146] J.-Q. Cheng, W. Wu, J.-B. Xu, *Multipartite entanglement in an XXZ spin chain with Dzyaloshinskii–Moriya interaction and quantum phase transition*, Quantum Information Processing **16**, 231 (2017).
- [147] Y.-Y. Yang, W.-Y. Sun, W.-N. Shi, F. Ming, D. Wang, L. Ye, *Dynamical characteristic of measurement uncertainty under Heisenberg spin models with Dzyaloshinskii–Moriya interactions*, Frontiers of Physics volume **14**, 31601 (2019).

- [148] Y.-Y. Yang, W.-Y. Sun, W.-N. Shi, F. Ming, D. Wang, L. Ye, *Dynamical characteristic of measurement uncertainty under Heisenberg spin models with Dzyaloshinskii–Moriya interactions*, *Frontiers of Physics* volume **14**, 31601 (2019).
- [149] F. Ares, J. G. Esteve, F. Falceto, A. R. de Queiroz, *Entanglement in fermionic chains with finite-range coupling and broken symmetries*, *Physical Review A* **92**, 042334 (2015).
- [150] J. Zou, S. K. Kim, Y. Tserkovnyak, *Tuning entanglement by squeezing magnons in anisotropic magnets*, *Physical Review B* **101**, 014416 (2020).
- [151] A. A. Migdal, *Phase transitions in gauge and spin-lattice systems*, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **42**, 743 (1975).
- [152] L. P. Kadanoff, *Notes on Migdal’s recursion formulas*, *Annals of Physics* **100**, 359 (1976).
- [153] J. Zinn-Justin, *Phase Transitions and Renormalization Group* (Oxford University Press, 2005).
- [154] P. Kopietz, L. Bartosch, F. Schütz, *Introduction to the Functional Renormalization Group* (Springer-Verlag Berlin and Heidelberg, 2010).
- [155] A. J. Berlinsky, C. Kallin, *Finite-temperature quantum renormalization-group theory for the one-dimensional anisotropic Heisenberg model*, *Physical Review B* **23**, 2247 (1981).
- [156] B. Hu, *Introduction to real-space renormalization-group methods in critical and chaotic phenomena*, *Physics Reports* **91**, 233 (1982).
- [157] S. Gombar, Master rad: *Kvantna zamr usenost i kvantna koherentnost XY spinskog lanca sa Đalošinski-Moriya interakcijom i kvantni fazni prelaz u modelu* (Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Novom Sadu, 2017).
- [158] S. Gombar, P. Mali, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, S. Radošević, *Correlation between Quantum Entanglement and Quantum Coherence in the Case of XY Spin Chains with the Dzyaloshinskii–Moriya Interaction*, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* volume **131**, 209 (2020).
- [159] A. Buchleitner, C. Viviescas, M. Tiersch, *Entanglement and Decoherence: Foundations and Modern Trends* (Springer-Verlag Berlin and Heidelberg, 2009).
- [160] J. Bub, *Quantum information and computation*, arXiv:quant-ph/0512125 (2006).
- [161] Č. Brukner, V. Vedral, *Macroscopic Thermodynamical Witnesses of Quantum Entanglement*, arXiv:quant-ph/0406040 (2004).
- [162] Vlatko Vedral, *Quantifying entanglement in macroscopic systems*, *Nature*, **453**, 1004 (2008).
- [163] V. Vedral, M. B. Plenio, *Entanglement measures and purification procedures*, *Physical Review A* **57**, 1619 (1998).
- [164] H. Fan, K. Matsumoto, H. Imai, *Quantify entanglement by concurrence hierarchy*, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, 4151 (2003).
- [165] A. Wong, N. Christensen, *Potential multiparticle entanglement measure*, *Physical Review A* **63**, 044301 (2001).
- [166] A. Osterloh, R. Schützhold, *Four-concurrence in the transverse XY spin-1/2 chain*, *Physical Review A* **96**, 012331 (2017).
- [167] W. K. Wootters, *Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*, *Physical Review Letters* **80**, 2245 (1998).

- [168] A. Streltsov, G. Adesso, M. B. Plenio, *Colloquium: Quantum coherence as a resource*, Reviews of Modern Physics **89**, 041003 (2017).
- [169] J. Åberg, *Quantifying Superposition*, arXiv:quant-ph/0612146 (2006).
- [170] T. Baumgratz, M. Cramer, M. B. Plenio, *Quantifying Coherence*, Physical Review Letters **113**, 140401 (2014).
- [171] Z. Xi, Y. Li, H. Fan, *Quantum coherence and correlations in quantum system*, Scientific Reports **5**, 10922 (2015).
- [172] A. Streltsov, U. Singh, H. Shekhar Dhar, M. Nath Bera, G. Adesso, *Measuring Quantum Coherence with Entanglement*, **115** 020403 (2015).
- [173] N. Stüsser, U. Schotte, A. Hoser, M. Meschke, M. Meissner, J. Wosnitza, *A neutron diffraction study of the magnetic phases of CsCuCl₃ for in-plane fields up to 17 T*, Journal of Physics: Condensed Matter **14**, 5161 (2002).
- [174] V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins, G. Nisbet, G. Beutier, Y. O. Kvashnin, V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, *Measuring the Dzyaloshinskii–Moriya interaction in a weak ferromagnet*, Nature Physics **10**, 202 (2014).
- [175] I. Dzyaloshinsky, *A thermodynamic theory of weak ferromagnetism of antiferromagnetics*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **4**, 241 (1958).
- [176] T. Moriya, *Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism*, Physical Review **120**, 91 (1960).
- [177] Bernd Zimmermann, Diplomski rad: *Calculation of the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction in ultrathin magnetic Films: Cr/W(110)* (Fakultat für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, 2010).
- [178] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, R. Fazio, *Scaling of entanglement close to a quantum phase transition*, Nature **416**, 608 (2002).
- [179] X. M. Liu, W. W. Cheng, J.-M. Liu, *Renormalization-group approach to quantum Fisher information in an XY model with staggered Dzyaloshinskii-Moriya interaction*, Scientific Reports **6**, 19359 (2016).
- [180] B. Q. Liu, B. Shao, J. G. Li, J. Zou, L. A. Wu, *Quantum and classical correlations in the one-dimensional XY model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction*, Physical Review A **83**, 052112 (2011).
- [181] M. Kargarian, R. Jafari, A. Langari, *Dzyaloshinskii-Moriya interaction and anisotropy effects on the entanglement of the Heisenberg mode*, Physical Review A **79**, 042319 (2009).
- [182] S. Radošević, P. Mali, *Zbirka zadataka iz matematičke fizike drugo prošireno izdanje* (Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Novom Sadu, 2020).
- [183] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, (Plenum Press New York, 1996).
- [184] J. A. Bergou, M. Hillery, *Introduction to the Theory of Quantum Information Processing* (Springer New York, 2013).
- [185] Y. Ishikawa, N. Miura, *Physics and Engineering Applications of Magnetism* (Springer-Verlag Berlin and Heidelberg, 1991).
- [186] S. Maekawa, T. Tohyama, S. E. Barnes, S. Ishihara, W. Koshibae, G. Khaliullin, *Physics of Transition Metal Oxides*, (Springer-Verlag Berlin and Heidelberg, 2004).

- [187] J. Liu, H.-J. Koo, H. Xiang, R. K. Kremer, M.-H. Whangbo, *Most spin-1/2 transition-metal ions do have single ion anisotropy*, Journal of Chemical Physics **141**, 124113 (2014).
- [188] J. R. Laguna, *Real Space Renormalization Group Techniques and Applications* (arXiv:cond-mat/0207340, 2002).
- [189] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, D. A. Lidar, *Quantum Phase Transitions and Bipartite Entanglement*, Physical Review Letters **93**, 250404 (2004).
- [190] M. Bennett, M. F. Schatz, H. Rockwood, K. Wiesenfeld, *Huygens's clocks*, Proceedings of the Royal Society of London A **458**, 563 (2002).
- [191] J. Buck, E. Buck, *Mechanism of Rhythmic Synchronous Flashing of Fireflies*, Science **159**, 1319 (1968).
- [192] E. Post, M. C. Forchhammer, *Synchronization of animal population dynamics by large-scale climate*, Nature **420**, 168 (2002).
- [193] S. C. Nicolis, J. Fernández, C. Pérez-Penichet, C. Noda, F. Tejera, O. Ramos, D. J. T. Sumpter, E. Altshuler, *Foraging at the Edge of Chaos: Internal Clock versus External Forcing*, Physical Review Letters **110**, 268104 (2013).
- [194] Z. Néda, E. Ravasz, Y. Brechet, T. Vicsek, A.-L. Barabási, *The sound of many hands clapping*, Nature **403**, 849 (2000).
- [195] Z. Néda, E. Ravasz, T. Vicsek, Y. Brechet, A. L. Barabási, *Physics of the rhythmic applause*, Physical Review E **61**, 6987 (2000).
- [196] M. P. N. Juniper, U. Zimmermann, A. V. Straube, R. Besseling, D. G. A. L. Aarts, H. Löwen, R. P. A. Dullens, *Dynamic mode locking in a driven colloidal system: experiments and theory*, New Journal of Physics **19**, 013010 (2017).
- [197] N. Kokubo, R. Besseling, P. H. Kes, *Dynamic ordering and frustration of confined vortex rows studied by mode-locking experiments*, Physical Review B **69**, 064504 (2004).
- [198] M. P. N. Juniper, A. V. Straube, R. Besseling, D. G. A. L. Aarts, R. P. A. Dullens, *Microscopic dynamics of synchronization in driven colloids*, Nature Communications **6**, 7187 (2015).
- [199] S. Shapiro, *Josephson Currents in Superconducting Tunneling: The Effect of Microwaves and Other Observations*, Physical Review Letters **11**, 80 (1963).
- [200] T. Brazda, C. July and C. Bechinger, *Experimental observation of Shapiro-steps in colloidal monolayers driven across time-dependent substrate potentials*, Soft Matter **13**, 4024 (2017).
- [201] M. P. N. Juniper, R. Besseling, D. G. A. L. Aarts, R. P. A. Dullens, *Acousto-optically generated potential energy landscapes: Potential mapping using colloids under flow*, Optics Express **20**, 28707 (2012).
- [202] M. P. N. Juniper, A. V. Straube, D. G. A. L. Aarts, R. P. A. Dullens, *Colloidal particles driven across periodic optical-potential-energy landscapes*, Physical Review E **93**, 012608 (2016).
- [203] S. V. Paronuzzi Ticco, G. Fornasier, N. Manini, G. E. Santoro, E. Tosatti, A. Vanossi, *Subharmonic Shapiro steps of sliding colloidal monolayers in optical lattices*, Journal of Physics: Condensed Matter **28**, 134006 (2016).

- [204] R. E. Thorne, W. G. Lyons, J. W. Lyding, J. R. Tucker, J. Bardeen, *Charge-density-wave transport in quasi-one-dimensional conductors. I. Current oscillations*, Physical Review B **35**, 6348 (1987).
- [205] R. E. Thorne, W. G. Lyons, J. W. Lyding, J. R. Tucker, J. Bardeen, *Charge-density-wave transport in quasi-one-dimensional conductors. II. ac-dc interference phenomena*, Physical Review B **35**, 6360 (1987).
- [206] R. E. Thorne, J. S. Hubacek, W. G. Lyons, J. W. Lyding, J. R. Tucker, *ac-dc interference, complete mode locking, and origin of coherent oscillations in sliding charge-density-wave systems*, Physical Review B **37**, 10055 (1988).
- [207] C. Reichhardt, R. T. Scalettar, G. T. Zimányi, N. Grønbech-Jensen, *Phase-locking of vortex lattices interacting with periodic pinning*, Physical Review B **61**, R11914 (2000).
- [208] N. Kokubo, R. Besseling, V. M. Vinokur, P. H. Kes, *Mode Locking of Vortex Matter Driven through Mesoscopic Channels*, Physical Review Letters **88**, 247004 (2002).
- [209] P. H. Kes, N. Kokubo, R. Besseling, *Vortex matter driven through mesoscopic channels*, Physica C: Superconductivity **408-410**, 478 (2004).
- [210] S. P. Benz, M. S. Rzchowski, M. Tinkham, C. J. Lobb, *Fractional giant Shapiro steps and spatially correlated phase motion in 2D Josephson arrays*, Physical Review Letters **64**, 693 (1990).
- [211] H. C. Lee, R. S. Newrock, D. B. Mast, S. E. Hebboul, J. C. Garland, C. J. Lobb, *Subharmonic Shapiro steps in Josephson-junction arrays*, Physical Review B **44**, 921 (1991).
- [212] Yu. M. Shukrinov, I. R. Rahmonov, M. Nashaat, *Staircase structure of Shapiro steps*, Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters **102**, 803 (2015).
- [213] H. B. Wang, S. M. Kim, S. Urayama, M. Nagao, T. Hatano, S. Arisawa, T. Yamashita, P. H. Wu, *Shapiro steps observed in annular intrinsic Josephson junctions at low microwave frequencies*, Applied Physics Letters **88**, 063503 (2006).
- [214] W. Buckel, R. Kleiner, *Superconductivity: Fundamentals and Applications* (Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, 2004).
- [215] G. Grüner, *The dynamics of charge-density waves*, Reviews of Modern Physics **60**, 1129 (1988).
- [216] S. E. Hebboul, J. C. Garland, *rf power dependence of subharmonic voltage spectra of two-dimensional Josephson-junction arrays*, Physical Review B **47**, 5190 (1993).
- [217] H. Sellier, C. Baraduc, F. Lefloch, R. Calemczuk, *Half-Integer Shapiro Steps at the $0 - \pi$ Crossover of a Ferromagnetic Josephson Junction*, Physical Review Letters **92**, 257005 (2004).
- [218] J. Tekić, P. Mali, *The Frenkel-Kontorova model* (Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Novom Sadu, 2015).
- [219] O. M. Braun, Y. S. Kivshar, *The Frenkel-Kontorova model: Concepts, Methods and Applications* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004).
- [220] S. Li, G. Wang, *Introduction to Micromechanics and Nanomechanics* (World Scientific, 2008).
- [221] A. V. Ustinov, M. Cirillo, B. A. Malomed, *Fluxon dynamics in one-dimensional Josephson-junction arrays*, Physical Review B **47**, 8357 (1993).

- [222] J. Blackburn, M. Cirillo, N. Grønbech-Jensen, *A survey of classical and quantum interpretations of experiments on Josephson junctions at very low temperatures*, Physics Reports **611**, 1 (2016).
- [223] I. R. Rahmonov, J. Tekić, P. Mali, A. Irie, A. Plecenik, Yu. M. Shukrinov, *Resonance phenomena in an annular array of underdamped Josephson junctions*, Physical Review B **101**, 174515 (2020).
- [224] I. R. Rahmonov, J. Tekić, P. Mali, A. Irie, Yu. M. Shukrinov, *ac-driven annular Josephson junctions: The missing Shapiro steps*, Physical Review B **101**, 024512 (2020).
- [225] L. M. Floría, C. Baesens, J. Gómez-Gardeñes, *Dynamics of Coupled Map Lattices and of Related Spatially Extended Systems* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005).
- [226] L. M. Floría, J. J. Mazo, *Dissipative dynamics of the Frenkel-Kontorova model*, Advances in Physics **45**, 505 (1996).
- [227] A. Alan Middleton, O. Biham, P. B. Littlewood, P. Sibani, *Complete mode locking in models of charge-density waves*, Physical Review Letters **68**, 1586 (1992).
- [228] B. Hu, J. Tekić, *Amplitude and frequency dependence of the Shapiro steps in the dc- and ac-driven overdamped Frenkel-Kontorova model*, Physical Review E **75**, 056608 (2007).
- [229] J. Tekić, P. Mali, Z. Ivić, M. Pantić, *Size effect of the subharmonic Shapiro steps on the interference phenomena in the Frenkel-Kontorova model with realistic substrate potentials*, Journal of Applied Physics **114**, 174504 (2013).
- [230] J. Odavić, P. Mali, J. Tekić, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, *Application of largest Lyapunov exponent analysis on the studies of dynamics under external forces*, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation **47**, 100 (2017).
- [231] I. Sokolović, P. Mali, J. Odavić, S. Radošević, S. Yu. Medvedeva, A. E. Botha, Yu. M. Shukrinov, J. Tekić, *Devil's staircase and the absence of chaos in the dc- and ac-driven overdamped Frenkel-Kontorova model*, Physical Review E **96**, 022210 (2017).
- [232] J. Tekić, B. Hu, *Properties of the Shapiro steps in the ac driven Frenkel-Kontorova model with deformable substrate potential*, Physical Review E **81**, 036604 (2010).
- [233] A. Vanossi, J. Röder, A. R. Bishop, V. Bortolani, *Driven, underdamped Frenkel-Kontorova model on a quasiperiodic substrate*, Physical Review E **63**, 017203 (2000).
- [234] A. Vanossi, J. Röder, A. R. Bishop, V. Bortolani, *Underdamped commensurate dynamics in a driven Frenkel-Kontorova-type model*, Physical Review E **67**, 016605 (2003).
- [235] J. Tekić, A. E. Botha, P. Mali, Yu. M. Shukrinov, *Inertial effects in the dc+ac driven underdamped Frenkel-Kontorova model: Subharmonic steps, chaos, and hysteresis*, Physical Review E **99**, 022206 (2019).
- [236] S. Marianer, A. R. Bishop, *Frenkel-Kontorova model with nonconvex-interparticle interactions and strain gradients*, Physical Review B **37**, 9893 (1988).
- [237] A. Milchev, *Solitary waves in a Frenkel-Kontorova model with non-convex interactions*, Physica D: Nonlinear Phenomena **41**, 262 (1990).
- [238] I. Markov, *Static multikink solutions in a discrete Frenkel-Kontorova model with anharmonic interactions*, Physical Review B **48**, 14016 (1993).
- [239] A. Milchev, G. M. Mazzucchelli, *Frenkel-Kontorova model with anharmonic interactions*, Physical Review B **38**, 2808 (1988).

- [240] Yu. M. Shukrinov, F. Mahfouzi, *Influence of Coupling between Junctions on Breakpoint Current in Intrinsic Josephson Junctions*, Physical Review Letters **98**, 157001 (2007).
- [241] O. M. Braun, Y. S. Kivshar, *Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model with impurities*, Physical Review B **43**, 1060 (1991).
- [242] E. V. Kholopov, *Instability of the uniform atomic chain with a convex interatomic potential*, Solid State Communications **47**, 187 (1983).
- [243] C. Bernardin, P. Goncalves, *Anomalous Fluctuations for a Perturbed Hamiltonian System with Exponential Interactions*, Communications in Mathematical Physics **325**, 291 (2014).
- [244] S. Gombar, P. Mali, S. Radošević, J. Tekić, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, *Influence of anharmonic convex interparticle potential and Shapiro steps in the opposite direction of driving force*, Physica Scripta **96**, 035211 (2021).
- [245] P. Mali, Doktorska disertacija: *Nelinearna dinamika u okviru Frenkel-Kontorova modela pod dejstvom spoljašnjih periodičnih sila* (Prirodno-matematički fakultet Univerziteta u Novom Sadu, 2015).
- [246] A. Saadatpour, M. Levi, *Traveling waves in chains of pendula*, Physica D: Nonlinear Phenomena **244**, 68 (2013).
- [247] A. A. Middleton, *Asymptotic uniqueness of the sliding state for charge-density waves*, Physical Review Letters **68**, 670 (1992).
- [248] S. Slijepčević, *Stability of synchronization in dissipatively driven Frenkel-Kontorova models*, Chaos **25**, 083108 (2015).
- [249] S. Brown, G. Grüner, *Charge and Spin Density Waves*, Scientific American **270**, 50 (1994).
- [250] F. Falo, L. M. Floría, P. J. Martínez, J. J. Mazo, *Unlocking mechanism in the ac dynamics of the Frenkel-Kontorova model*, Physical Review B **48**, 7434 (1993).
- [251] Lj. Teofanov, N. M. Ralević, *Odabrana poglavlja iz numeričke matematike* (Fakultet tehničkih nauka Univerziteta u Novom Sadu, 2019).
- [252] M. L. Abell, J. P. Braselton, *Differential Equations with Mathematica* (Elsevier Academic Press, 2016).
- [253] L. Zheng, X. Zhang, *Modeling and Analysis of Modern Fluid Problems* (Elsevier Academic Press, 2017).
- [254] M. J. Renné, D. Polder, *Some analytical results for the resistively shunted Josephson junction*, Revue de Physique Appliquee **9**, 25 (1974).
- [255] J. R. Waldram, P. H. Wu, *An alternative analysis of the nonlinear equations of the current-driven Josephson junction*, Journal of Low Temperature Physics **47**, 363 (1982).
- [256] A. Pikovsky, A. Politi, *Lyapunov Exponents: A Tool to Explore Complex Dynamics* (Cambridge University Press, 2016).
- [257] J. Odavić, P. Mali, *Random matrix ensembles in hyperchaotic classical dissipative dynamic systems*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2021**, 043204 (2021).
- [258] H. Kantz, *A robust method to estimate the maximal Lyapunov exponent of a time series*, Physics Letters A **185**, 77 (1994).

- [259] M. Cencini, F. Cecconi, A. Vulpiani, *Chaos: From Simple Models to Complex Systems* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 2010).
- [260] R. Hilborn, *Chaos and Nonlinear Dynamics: An Introduction for Scientists and Engineers* (Oxford University Press, 2001).
- [261] J. Odavić, P. Mali, J. Tekić, *Farey sequence in the appearance of subharmonic Shapiro steps*, Physical Review E **91**, 052904 (2015).
- [262] J. C. Sprott, *Numerical Calculation of Largest Lyapunov Exponent* <http://sprott.physics.wisc.edu/chaos/lyapexp.htm>. (2013).
- [263] A. Prieto-Guerrero, G. Espinosa-Paredes, *Linear and Non-Linear Stability Analysis in Boiling Water Reactors* (Woodhead Publishing, 2019).
- [264] P. Mali, J. Tekić, Z. Ivić, M. Pantić, *Effects of noise on interference phenomena in the presence of subharmonic Shapiro steps*, Physical Review E **86**, 046209 (2012).
- [265] P. Mali, A. Šakota, J. Tekić, S. Radošević, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, *Complexity of Shapiro steps*, Physical Review E **101**, 032203 (2020).

Kratka biografija

Sonja Gombar rođena je 12.3.1993. u Zrenjaninu. Osnovnu školu "Dr Jovan Cvijić" završila je u Zrenjaninu, nakon čega je upisala Zrenjaninsku gimnaziju. Shodno naklonosti koju je tokom svog dvanaestogodišnjeg školovanja razvila prema prirodnim naukama, 2012. godine upisala je osnovne akademske studije fizike na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novom Sadu, smer fizičar istraživač, koje je završila u roku, sa prosečnom ocenom 10.00. Nakon završetka osnovnih studija, 2016. godine upisala je master akademske studije, pri čemu je joj je izborna oblast bila teorijska fizika. Položila je sve ispite u roku, sa prosečnom ocenom 10.00, i potom uspešno odbranila master rad naslovljen *Kvantna zamršenost i kvantna koherentnost XY spinskog lanca sa Đalošinski-Morija interakcijom i kvantni fazni prelaz u modelu*. Tokom osnovnih i master studija bila je dobitnica studentskog kredita i stipendija Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja, stipendija Humanitarnog fonda "Ljilja i Milka Mijatov" i Fonda za mlade talente Republike Srbije. Osim toga, bila je dobitnica godišnjih nagrada Univerziteta u Novom Sadu i Prirodno-matematičkog fakulteta za izuzetan uspeh u toku studija. Tokom 2017. godine učestvovala je na Internacionalnoj konferenciji studenata fizike ICPS, održanoj u Torinu, gde je prezentovala rad *Applications of ac+dc driven Frenkel-Kontorova model*.



Iste godine upisala je doktorske akademske studije pri Katedri za teorijsku fiziku kondenzovanog stanja. Postala je stipendista Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja 2018. godine, u sklopu projekta evidencionog broja OI 171009, a po završetku projektnog ciklusa, od 2020. godine, nastavila je istraživački rad kao stipendista iste institucije. U toku doktorskih studija učestvovala je na ICPS konferencijama održanim u Helsinkiju (2018. godine) i Kelnu (2019. godine), gde je prezentovala rezultate postignute u oblasti kvantne zamršenosti i koherentnosti, kao i eksitonske dinamike, respektivno. Godine 2019. rezultate istraživanja promovisala je i u sklopu radionice Excitation Energy Transport in Physical, Chemical and Biological Systems, održane u Novom Sadu, i Simpozijuma fizike kondenzovane materije SFKM, organizovanog u Beogradu, gde je prezentovala rad na analizi dinamike Frenkelovih eksitona u organskim molekulima. Koautor je četiri naučna rada objavljena u međunarodnim časopisima sa SCI liste kategorija M23 i M22. Godine 2020. stiče zvanje istraživač pripravnik na Prirodno-matematičkom fakultetu Univerziteta u Novom Sadu. Uspešno je položila sve ispite predviđene planom i programom i ostvarila prosečnu ocenu 10.00, te stekla uslov za prijavu i odbranu doktorske teze.

Novi Sad, 01.10.2021.

Sonja Gombar

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

OBRAZAC - 5a

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA¹

Vrsta rada:	Doktorska disertacija
Ime i prezime autora:	Sonja Gombar
Mentor (titula, ime, prezime, zvanje, institucija):	Dr Petar Mali, docent Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Novom Sadu
Naslov rada:	Dualni pristupi u teorijskoj fizici kondenzovanog stanja
Jezik publikacije (pismo):	Srpski (latinica)
Fizički opis rada:	107 stranica / 3 poglavlja / 265 referenci / 3 tabele / 52 slike / 3 priloga
Naučna oblast:	Fizika
Uža naučna oblast (naučna disciplina):	Teorijska fizika kondenzovane materije
Ključne reči / predmetna odrednica:	Frenkelovi eksitoni, Hajzenbergov model, efektivna teorija polja, Đalošinski-Moriya interakcija, kvantna zamršenost, kvantna koherentnost, kvantni fazni prelaz, Frenkel-Kontorova model, neharmonijski konveksni međučestični potencijal, Šapirovi stepenici
Rezime na jeziku rada:	U ovoj disertaciji su obrađena tri značajna problema u teorijskoj fizici kondenzovanog stanja posredstvom dualnih pristupa. Prvi deo doktorata obuhvata ispitivanje eksitonske disperzije četiri aromatična ugljovodonika. Teorijske krive, bazirane na modelu Frenkelovih neinteragujućih eksitona, upoređene su sa eksperimentalnim podacima i uočeno je zadovoljavajuće slaganje. Perturbativne korekcije, koje potiču od eksiton-eksiton interakcija, su zanemarljive. U drugoj glavi doktorata ispitana je korelacija između kvantne zamršenosti i kvantne koherentnosti u sistemima spinskih kubita. Veza je istražena u sistemima sa Đalošinski-Moriya interakcijom, kao i dva tipa anizotropije. Metod kvantne renormalizacione grupe korišćen je za uočavanje korelacije u sistemima različitih dimenzija, ali i za ispitivanje veze dve kvantno-informatičke veličine sa kvantnim faznim prelazima sistema. Treća glava doktorata posvećena je analizi odzivne funkcije i najvećeg Ljapunovljevog eksponenta jako prigušenog Frenkel-Kontorova modela sa dva tipa neharmonijskog konveksnog međučestičnog potencijala. Dobijeni rezultati su upoređeni sa rezultatima standardnog Frenkel-Kontorova modela, kao i sa dostupnim eksperimentalnim podacima u sistemima talasa gustine naboja, Džozefsonovih spojeva i koloidnim sistemima. Uočeni su tragovi dinamičkog zaključavanja i Šapirovi stepenici u oba smera kretanja čestica.

¹ Autor doktorske disertacije potpisao je i priložio sledeće obrasce:

5b - Izjava o autorstvu;

5v - Izjava o istovetnosti štampane i elektronske verzije i o ličnim podacima;

5g - Izjava o korišćenju.

Ove Izjave se čuvaju na fakultetu u štampanom i elektronskom obliku i ne koriće se sa tezom.

Datum prihvatanja teme od strane nadležnog veća:	02.7.2020.
Datum odbrane (popunjava odgovarajuća služba):	
Članovi komisije (titula, ime, prezime, zvanje, institucija):	Predsednik: dr Milica Pavkov Hrvojević, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Novom Sadu Član: dr Slobodan Radošević, vanredni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Novom Sadu Član: dr Petar Mali, docent Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Novom Sadu Član: dr Božidar Nikolić, vanredni profesor Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu
Napomena:	Nema

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES

KEY WORD DOCUMENTATION²

Document type:	Doctoral dissertation
Author:	Sonja Gombar
Supervisor (title, first name, last name, position, institution):	Dr Petar Mali, Assistant Professor at Faculty of Sciences, University of Novi Sad
Thesis title:	Dual approach in theoretical condensed matter physics
Language of text (script):	Serbian language (latin script)
Physical description:	107 pages / 3 chapters / 265 references / 3 tables / 52 illustrations / 3 appendices
Scientific field:	Physics
Scientific subfield (scientific discipline):	Theoretical condensed matter physics
Subject, Key words:	Frenkel excitons, Heisenberg model, effective field theory, Dzyaloshinskii-Moriya interaction, quantum entanglement, quantum coherence, quantum phase transition, Frenkel-Kontorova model, anharmonic convex interparticle potential, Shapiro steps
Abstract in English language:	In this doctoral thesis, a dual approach is used to examine three significant condensed matter physics problems. In the first part of the thesis, the exciton dispersion is examined in the case of four aromatic hydrocarbons. The theoretical curves, based on the model of noninteracting Frenkel excitons, are compared to the experimental data and they agree satisfyingly. The perturbative corrections, originating from exciton-exciton interactions, are negligible. In the second chapter of the thesis, correlation between quantum entanglement and quantum coherence is examined for spin qubit systems. The correlation is explored in the systems with Dzyaloshinskii-Moriya interaction and two types of anisotropy. The quantum renormalization group method is used not only to examine the mentioned bond in both smaller and larger systems but also to investigate the connection between two quantum information entities and the system's quantum phase transitions. Analysis of the response function and the largest Lyapunov exponent of the overdamped Frenkel-Kontorova model with two types of anharmonic convex interparticle potentials is presented in the third chapter. The results are compared to the standard Frenkel-Kontorova model results as well as the experimental data obtained in systems of charge density waves, Josephson junction arrays and colloidal systems. The dynamical mode-locking and Shapiro steps are observed in both directions of particles' motion.

²The author of doctoral dissertation has signed the following Statements:

5b – Statement on the authority,

5v – Statement that the printed and e-version of doctoral dissertation are identical and about personal data,

5g – Statement on copyright licenses.

The paper and e-versions of Statements are held at the faculty and are not included into the printed thesis.

Accepted on Scientific Board on:	2/7/2020
Defended (filled by the faculty service):	
Thesis Defend Board (title, first name, last name, position, institution):	President: dr Milica Pavkov Hrvojević, Full Professor at Faculty of Sciences, University of Novi Sad Member: dr Slobodan Radošević, Associate Professor at Faculty of Sciences, University of Novi Sad Member: dr Petar Mali, Assistant Professor at Faculty of Sciences, University of Novi Sad Member: dr Božidar Nikolić, Associate Professor at Faculty of Physics, University of Belgrade
Note:	None