

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

021



REŠENJE MODELNOG O-H-O BOND - A

- diplomski rad -

Kandidat:

Vladislav Hadžija

NOVI SAD 1980.

Koristim priliku da se na ovom mestu zahvalim Prof. Dr. Bratislavu Tošiću, redovnom profesoru PMF , rukovodiocu Laboratorije za teorijsku fiziku Instituta za fiziku i mentoru ovog rada na ukazanoj stručnoj pomoći prilikom izrade ovog rada. Zahvaljujem se takodje Milanu Stanojeviću, tehničkom saradniku Instituta za fiziku na izvršenoj tehničkoj redakciji.

S A D R Ź A J

U V O D	1
1. STRUKTURE SA O-H-O BOND-ovima	2
2. ZNAČAJ PROCESA U O-H-O BOND-ovima ZA BIOFIZIKU	5
3. MODELNI POTENCIJAL ZA O-H-O BOND	7
4. RAZVIJANJE PERIODIČNIH FUNKCIJA U FURIJEOV RED I NEKE VAŽNE SUME	9
5. SVOJSTVENI PROBLEM PROTONA U O-H-O BOND-u I DVA TIPA REŠENJA	12
6. NEGATIVNE ENERGIJE - RAZNI TIPOVI REŠENJA	16
7. PROTONSKE STRUJE I BRZINA PROTONA U BOND-u	20
8. HAMILTONIJAN KRISTALA SA MODELNIM O-H-O BOND-ovima	23
Z A K L J U Č A K	26
L I T E R A T U R A	27

U V O D

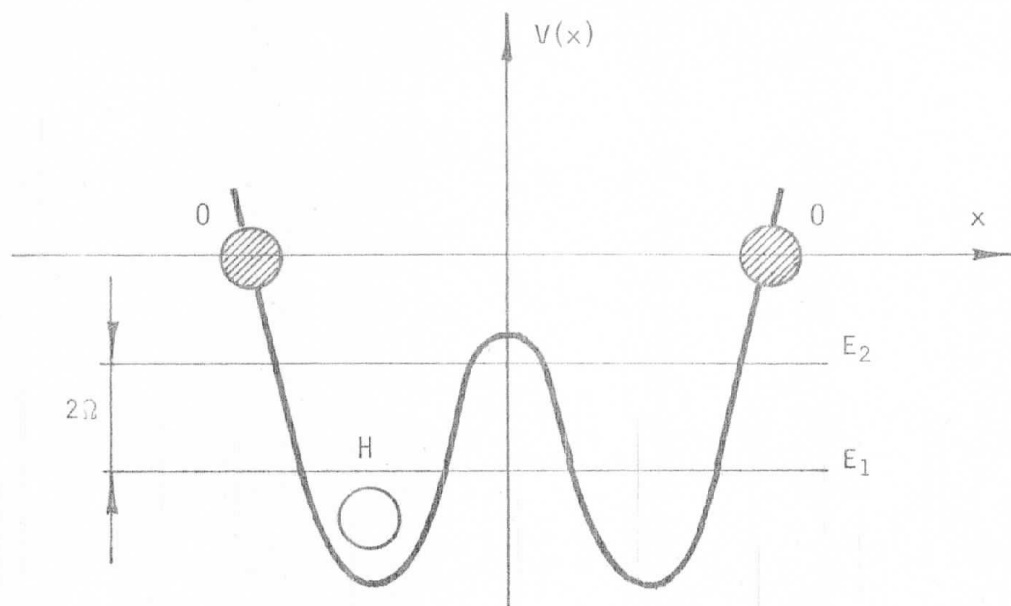
Cilj ovog diplomskog rada je da ispitivanjem ponašanja protona u izolovanom O-H-O bond-u pruži elemente za fizičku i biofizičku analizu feroelektričnih materijala. Za potencijal bond-a koristi se kombinacija δ -potencijala, jer ovakve analitičke forme dopuštaju egzaktno rešenje, a može da im se nadje dobro fizičko opravdanje.

1. STRUKTURE SA O-H-O BOND-ovima

Osnovne strukture čiju dinamiku karakterišu procesi u O-H-O bond-ovima su feroelektrici. U najpoznatije predstavnike feroelektrika ubraja se kalijumdihidrofosfat (KH_2PO_4). U kristalima KH_2PO_4 se pojavljuje spontani električni moment i otuda oni poseduju feroelektrična svojstva. Ponašanje feroelektrika je, u izvesnom smislu, slično feromagnetiku. Kao i kod feromagnetika, spontani moment kod feroelektrika je maksimalan na apsolutnoj nuli i opada sa porastom temperature. Na temperaturama od oko 200 K spontani moment iščezava i feroelektrik prelazi u paraelektričnu fazu, u kojoj je spontani električni moment jednak nuli, a do pojave električnog momenta može da dodje samo pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja. Prelaz koji se vrši iz feroelektrične u paraelektričnu fazu je fazni prelaz prve vrste, sličan faznom prelazu druge vrste. Ovakva definicija feroelektričnog faznog prelaza sledi iz činjenice da se kritična i Kirijeva temperatura kod feroelektrika ne poklapaju, ali su veoma bliske. Kod feromagnetika, međjutim, postoji čist fazni prelaz druge vrste, jer se pomenute dve temperature poklapaju.

Navedeno ponašanje feroelektrika je tipično za order-disorder strukture, pa se postavlja pitanje koji su delovi molekula feroelektrika odgovorni za egzistenciju uredjenih električnih momenata. Ideja za objašnjenje ponašanja feroelektrika je uzeta iz analogije sa feromagnetima. Uredjeni sistem magnetnih momenata kod feromagnetika nastaje usled uredjenosti spinova u 3d ljusci svih atoma u kristalu. Sa porastom temperature spinovi se razuredjuju tako da na Kirijevoj temperaturi spontani magnetni moment postaje jednak nuli. Očigledno je da kod feroelektrika postoje uredjeni električni momenti koji se sa porastom temperature razuredjuju. Teorijska i eksperimentalna ispitivanja feroelektrika pokazala su da uredjene električne momente stvaraju protoni u O-H-O bond-ovima, a koji su opet sastavni delovi molekula KH_2PO_4 . Načinjen je model kvazi-spina, čija je suština sledeća: između dva atoma kiseonika kreće se jezgro vodonika i to u potencijalu sa dvostrukim (vidi sliku 1.) dnom





Sl. 1.

Proton može da tuneluje iz jednog kraja jame u drugi sa izvesnom frekvencijom koja se naziva frekvencija tunelovanja. Frekvenciji tunelovanja odgovara energija koja je u šuštini jednaka razlici energija protona u levoj i desnoj jami bond-a. U osnovnom stanju proton zauzima energiju E_1 , a pod uticajem toplotnih kvanata on ima mogućnost da pređe u desnu jamu i zauzme stanje sa višom energijom E_2 . Energija tunelovanja, koja je označena sa 2Ω , data je sa:

$$2\Omega = E_2 - E_1 \quad (1.1)$$

Na osnovu ovog modela pretpostavlja se da se svi protoni u svim molekulima kristala nalaze u levim jamama (energija E_1) i da to stvara maksimalni spontani električni moment sistema. Kada se sistem zagreva, pojavljuje se mogućnost prelaska protona u desnu jamu (energija E_2) i usled ovih prelazaka spontani električni moment celog kristala počinje da se smanjuje. Kada energija toplotnih kvanata dostigne veliku vrednost, preskoci protona iz leve u desnu jamu i obrnuto su toliko česti, da je, statistički posmatrano, moguće da se uzme da su svi oni na sredini bond-a, a ovo opet označava potpunu razuredjenost električnih momenata bond-ova i iščezavanje momenta celokupnog kristala. Temperatura, na kojoj se ovo dešava, je temperatura prelaza u paraelektričnu

fazu.

Teorija feroelektrika je danas veoma dobro razvijena i možda je njena najnejasnija tačka upravo ponašanje protona u izolovanom bond-u. Ovo je pre svega usled toga što je potencijal sa dvostrukim dnom (v. sl.1) samo modelna predstava i analitički oblik ovog potencijala zadaje se u literaturi na veoma različite načine. Svaka zadata forma potencijala dovodi do različitih zaključaka o ponašanju protona u bond-u. Osim toga, veoma mali broj analitički zadatih potencijala dopušta egzaktno rešenje, pa mora da se ide na manje ili više grube aproksimacije, što sa svoje strane unosi još više nejasnoća u pomenuti problem. U istraživanjima vršenim u ovom radu koriste se eksperimentalni podaci za bond-ove u KH_2PO_4 . Podaci su sledeći:

$$\begin{aligned} \text{širina bond-a} &\Rightarrow 2L = 0.70 \text{ \AA} \\ \text{energija tunelovanja} &\Rightarrow 2\Omega = 200 - 400 \text{ cm}^{-1} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Analitička forma potencijala koja se koristi u radu predstavlja kombinaciju δ -funkcije. Ovakav se model uvodi iz dva razloga: Prvi je taj što pomenuta kombinacija dopušta tačno analitičko rešenje, dok drugi proizlazi iz činjenice da je prolaz kroz δ -potencijal moguć iako je on beskonačan. Ovo poslednje, tj. prolaz kroz δ -potencijal, može da bude interesantno u vezi sa idejama iz biofizike o tome da penetracija protona iz bond-a u bond (protonske struje), predstavlja jedan od fundamentalnih procesa u biomateriji.

2. ZNAČAJ PROCESA U O-H-O BOND-ovima ZA BIOFIZIKU

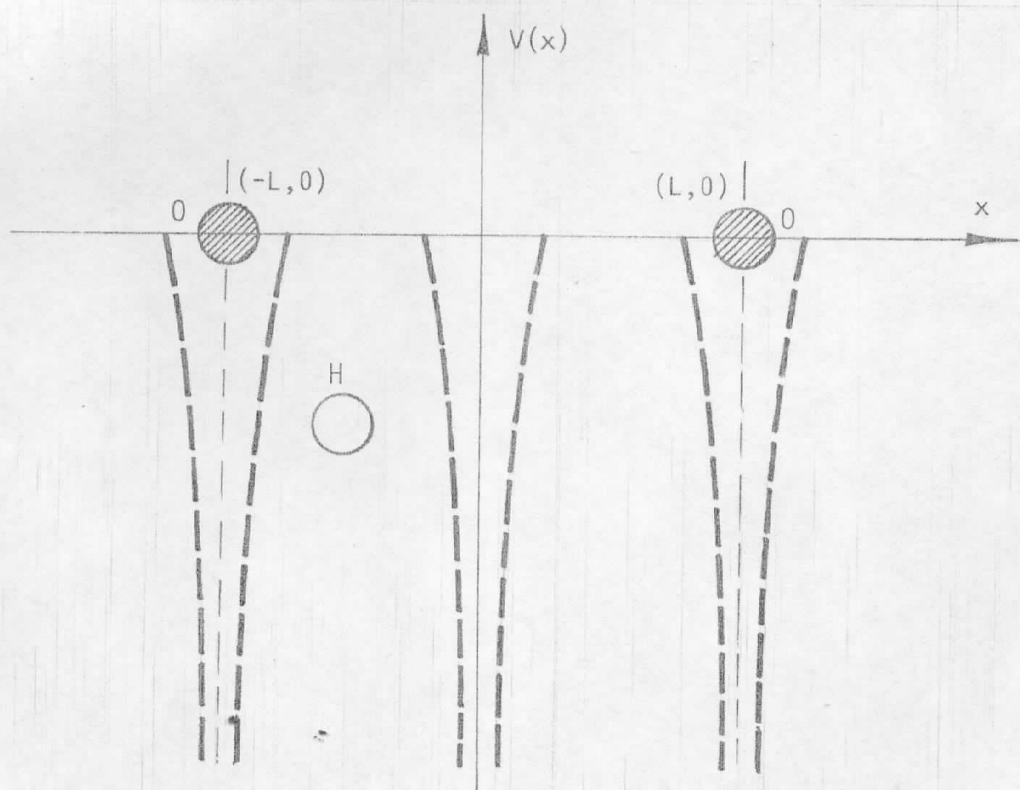
Rezultati dosadašnjih biofizičkih istraživanja nedvosmisleno ukazuju na činjenicu da su proteini i aminokiseline one osnovne supstance u kojima se odigrao prelaz od nežive organske materije u živu. Danas postoji veliki broj radova, kako eksperimentalnih, tako i teorijskih u vezi sa ponašanjem pomenutih supstanci i njihovim specifičnostima, usled kojih dolazi do skoka neživo-živo. Ono što je karakteristično za pomenute supstance je činjenica da su one veoma bogate O-H-O, N-H-N i C-H-C bond-ovima, pa je sasvim prirodno što je procesima u ovim bond-ovima obraćena posebna pažnja sa aspekta biofizike. Usled prisustva bond-ova, očigledno je da u aminokiselinama mogu da se pojave feroelektrična pobudjenja (kolektivizirani preskoci protona u bond-ovima). Hamiltonijan feroelektričnog sistema sadrži u sebi jedan deo koji odgovara simultanom kreiranju, odnosno anihiliranju parova feroelektričnih pobudjenja. Usled ovoga, broj feroelektričnih pobudjenja u sistemu nije održan, što za sobom povlači veoma specifičnu entropiju sistema. Entropija ovakvog sistema zavisi od vremena i predstavlja periodičnu funkciju sa prigušenjem. Prema kriterijumima Prigožina i Ajgena, ovakav tip entropije predstavlja osnovni preduslov za samoorganizaciju materije čiji je krajnji rezultat u izvesnim slučajevima prelaz neživo-živo. S obzirom na pomenuto, jedna od uloga feroelektričnih pobudjenja, koja nastaju u smeši aminokiselina i proteina, sastojala bi se u tome da služi kao izvor periodične informacije za smešu supstanci. Radi se o tome, da energija feroelektričnog sistema, iako je periodična funkcija vremena u krajnjem rezultatu posle dovoljno dugog vremena naraste, a to drugim rečima znači da je sistem feroelektričnih pobudjenja primio deo entropije smeše supstanci u kojoj je ponikao. Smanjenje entropije smeše supstanci ekvivalentno je prilivu informacije, a ovo opet dovodi do privilegovanih hemijskih reakcija, tj. do samoorganizacije.

Osim ovog, čisto statističkog tumačenja uloge feroelektrika u bioprocima, postoji i jedno čisto dinamičko, koje

su dali Krik i Watson. Prema idejama Krika i Watsona, protoni mogu da prelaze iz jednog bond-a u drugi i da tako stvaraju slabe protonske struje. Ove struje su odgovorne, kako za prenos mase, energija i impulsa, tako i za prenos informacije, koja opet dovodi do biološkog uređivanja u smislu odabiranja optimalnih procesa za živu materiju. Analize koje su ovde izvršene u okviru pretpostavljenog modela za O-H-O bond odnose se na mogućnost nastanka protonskih struja u bond-u i na ispitivanje njihovih osnovnih karakteristika.

3. MODELNI POTENCIJAL ZA O-H-O BOND

Kao što je već ranije napomenuto, za potencijal sa dvostrukim dnom sa sl.1 koristi se analitička forma koja se sastoji od kombinacije δ -potencijala. Centar bond-ova postavljen je u koordinatni početak, a atomi kiseonika se nalaze u tačkama $(-L,0)$ i $(L,0)$, (v. sl.2). Smatra se da atomi kiseonika stavljaju na put protona beskonačnu potencijalnu prepreku (bilo da je jama, ili barijera), pa je na ovim mestima potencijal predstavljen δ -funkcijama. Interakcija između atoma kiseonika je, prema uve-



Sl. 2.

denom modelu, takva da i na sredini bond-a stvara dopunski δ -potencijal. Prva pretpostavka o δ -potencijalima na krajevima bond-a je i fizički opravdana, jer prema eksperimentima i prema teoriji, proton ili ne izlazi, ili veoma teško izlazi iz bond-a, pa je potpuno logično da u bond-u bude ograničen beskonačnim potencijalima koji ipak mogu da dopuste i prolaz (δ -potencijali). Dopunski δ -potencijal na sredini bond-a na ovaj način ne može da se

opravda. On je više uzet zbog toga, da bi se simulirala već opšte priznata forma potencijala sa sl.1, koja kao što se vidi, sadrži i jednu potencijalnu prepreku na sredini. U skladu prethodno rečenim, modelni potencijal je uzet u sledećem obliku:

$$V(x) = V_1\delta(x) + \frac{V_2}{2} [\delta(x-L) + \delta(x+L)] \quad (3.1)$$

Veličine V_1 i V_2 čije su dimenzije [Jm], mogu da budu proizvoljnog znaka. Kasnije će se videti kakav znak one nužno moraju da imaju da bi se zadovoljili eksperimentalni podaci za dužinu bond-a $2L$ i energiju tunelovanja 2Ω .

4. RAZVIJANJE PERIODIČNIH FUNKCIJA U FURIJEOV RED I NEKE VAŽNE SUME

Ovo je poglavlje zanimljivo kao matematički uvod u dalju analizu kretanja protona u 0-H-0 bond-u. Za potencijale tipa (3.1) Šredingerov problem može da se rešava razvijanjem funkcija u Furijeov integral, ili u Laplasov integral, ali takođe može da se koristi i razvoj funkcija u Furijeov red. S obzirom da je bond sa sl.2 ograničene dužine $2L$ i da se takvi bond-ovi periodično ponavljaju u feroelektričnom kristalu, sama simetrija problema zahteva da talasna funkcija protona bude periodična sa periodom $2L$, pa se problem zato rešava razvijanjem talasne funkcije u Furijeov red. Ako je funkcija $f(x)$ periodična sa periodom $2L$, tj.

$$f(x) = f(x + 2L) \quad (4.1)$$

ona može da se razvije u Furijeov red na sledeći način:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} f_k e^{i k \frac{\pi}{L} x} \quad (4.2)$$

Posle množenja relacije (4.2) sa $e^{-i k' \frac{\pi}{L} x}$ i integracije po x , u granicama od $-L$ do L , uz korišćenje relacije:

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx e^{i(k-k') \frac{\pi}{L} x} = \delta_{kk'} \quad (4.3)$$

dolazi se do izraza za koeficijente f_k i oni su dati sa:

$$f_k = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx e^{-i k \frac{\pi}{L} x} f(x) \quad (4.4)$$

U daljim analizama potrebne su i vrednosti sledećih suma:

$$\sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{1}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \pm \lambda^2} ; \quad \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \pm \lambda^2} \quad (4.5)$$

Da bi se našle ove sume, u Furijeov red (4.1) potrebno je da se razviju sledeće funkcije:

$$\begin{aligned} f(x) &= \cos \lambda x & f(x) &= \operatorname{ch} \lambda x \\ \cos \lambda x &= \cos \lambda(x \pm 2L) & \operatorname{ch} \lambda x &= \operatorname{ch} \lambda(x \pm 2L) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Ove su funkcije podvučene talasastom linijom da bi se istakla njihova periodičnost sa periodom $2L$. Naročito je značajno da se ovo istakne kod periodične funkcije $\cos \lambda x$, jer je ona periodična sa periodom $2\pi/\lambda$. Funkcija $\cos \lambda x$ periodična je sa periodom $2L$ i poklapa se sa funkcijom $\cos \lambda x$ samo u intervalu $[-L, L]$. S obzirom na (4.1) i (4.3), može da se napiše:

$$\cos \lambda x = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} a_k e^{ik \frac{\pi}{L} x}; \quad a_k = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx e^{-ik \frac{\pi}{L} x} \cos \lambda x \quad (4.7)$$

Integral iz (4.7) može jednostavno da se reši, pa se dobija sledeći rezultat:

$$\cos \lambda x = -\frac{\lambda \operatorname{sin} \lambda L}{L} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k e^{ik \frac{\pi}{L} x}}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - \lambda^2} \quad (4.8)$$

Kako je $\operatorname{ch} z = \cos iz$ i $\operatorname{sh} z = i \operatorname{sin} iz$, u relaciji (4.8) može da se izvrši prelaz $\lambda \rightarrow \lambda i$, posle čega se dobija:

$$\operatorname{ch} \lambda x = \frac{\lambda \operatorname{sh} \lambda L}{L} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k e^{ik \frac{\pi}{L} x}}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \quad (4.9)$$

Ako se u relacijama (4.8) i (4.9) uvede $x=0$, tada se dobija:

$$\sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - \lambda^2} = \frac{-L}{\lambda \operatorname{sin} \lambda L}; \quad \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} = \frac{L}{\lambda \operatorname{sh} \lambda L} \quad (4.10)$$

Na ovaj su način dobijeni izrazi za dve od pomenutih suma. Ako se u sumama (4.8) i (4.9) uzme $x = \pm 1$, tada se dobija:

$$\sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{1}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - \lambda^2} = -\frac{L}{\lambda} \frac{\cos \lambda L}{\operatorname{sin} \lambda L}; \quad \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{1}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} = \frac{L}{\lambda} \frac{\operatorname{ch} \lambda L}{\operatorname{sh} \lambda L} \quad (4.11)$$

U toku daljih izračunavanja takodje su potrebne i sledeće sume:

$$\sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{e^{ik \frac{\pi}{L} x}}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - \lambda^2}; \quad \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{e^{ik \frac{\pi}{L} x}}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \quad (4.12)$$

Očigledno je da se i do ove sume može doći iz relacija (4.8) i (4.9) i to ukoliko se izvrši prelaz $x \rightarrow x \pm L$, tada se dobija sle-

deći rezultat:

$$\underline{\cos \lambda(x \pm L)} = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{e^{ik \frac{\pi}{L} x}}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - \lambda^2} \quad (4.13)$$

i

$$\underline{\operatorname{ch} \lambda(x \pm L)} = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{e^{ik \frac{\pi}{L} x}}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \quad (4.14)$$

Kao što se vidi, poslednje dve sume nisu jednoznačno definisane.

5. SVOJSTVENI PROBLEM PROTONA U O-H-O BOND-u I
DVA TIPa REŠENJA

S obzirom na relaciju (3.1) i činjenicu da se analizira jednodimenzioni problem, hamiltonijan protona u bond-u dat je sa:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1 \delta(x) + \frac{1}{2} V_2 [\delta(x-L) + \delta(x+L)] \quad (5.1)$$

gde je $m = 1.6739 \times 10^{-27}$ kg - masa protona. S obzirom na oblik hamiltonijana, svojstveni problem $H\Psi = E\Psi$ svodi se na:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} \pm \lambda^2\Psi = \{W_1\delta(x) + \frac{1}{2} W_2[\delta(x-L) + \delta(x+L)]\}\Psi \quad (5.2)$$

$$\lambda^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad W_1 = \frac{2mV_1}{\hbar^2}; \quad W_2 = \frac{2mV_2}{\hbar^2}$$

Pozitivnim energijama odgovara znak + ispred λ^2 , dok negativnim, odgovara -. U daljoj se analizi ispituje slučaj negativnih energija. Talasna funkcija se i dalje označava sa Ψ . Rešava se, prema tome, problem:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \lambda^2\Psi = \{W_1\delta(x) + \frac{1}{2} W_2[\delta(x-L) + \delta(x+L)]\}\Psi \quad (5.3)$$

Kao što je već ranije napomenuto, talasna funkcija Ψ , kao i ostale veličine koje figurišu u relaciji (5.3), razvijaju se u Furijeov red tipa (4.2), pa je:

$$\Psi(x) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \Psi_k e^{ik\frac{\pi}{L}x}; \quad \Psi_k = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx \Psi(x) e^{-ik\frac{\pi}{L}x} \quad (5.4)$$

$$\delta(x-x_0) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \Delta_k(x_0) e^{ik\frac{\pi}{L}x}; \quad \Delta_k(x_0) = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx \delta(x-x_0) e^{ik\frac{\pi}{L}x} = \frac{e^{-ik\frac{\pi}{L}x_0}}{2L} \quad (5.5)$$

Zamenom (5.4) i (5.5) u (5.3), posle množenja sa $e^{ik'\frac{\pi}{L}x}$ i integracije po x u granicama od $-L$ do L , za koeficijente Ψ_k dobijaju se sledeći izrazi:

$$\Psi_k = \frac{-1}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \left[\frac{W_1}{2L} A_1 + (-1)^k \frac{W_2}{2L} A_2 \right] \quad (5.6)$$

gde je:

$$A_1 = \sum_{k=-\infty}^{r=+\infty} \Psi_k ; \quad A_2 = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} (-1)^k \Psi_k .$$

Relacija (5.6) najpre se sumira samo po k , a zatim se pomnoži sa $(-1)^k$ i ponovo izvrši sumiranje po k . Na taj se način dobija sistem algebarskih jednačina za određivanje konstanta A_1 i A_2 . Sistem ima sledeći oblik:

$$\left. \begin{aligned} \left[1 + \frac{W_1}{2L} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{1}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \right] A_1 + \left[\frac{W_2}{2L} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \right] A_2 = 0 \\ \left[\frac{W_1}{2L} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{(-1)^k}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \right] A_1 + \left[1 + \frac{W_2}{2L} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \frac{1}{\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 + \lambda^2} \right] A_2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.7)$$

S obzirom na (4.10) i (4.11), ovaj sistem može da se napiše u obliku:

$$\left. \begin{aligned} \left[1 + \frac{W_1}{2\lambda} \operatorname{cth} \lambda L \right] A_1 + \frac{W_2}{2\lambda} \frac{1}{\delta h \lambda L} A_2 = 0 \\ \frac{W_1}{2\lambda} \frac{1}{\delta h \lambda L} A_1 + \left[1 + \frac{W_2}{2\lambda} \operatorname{cth} \lambda L \right] A_2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.8)$$

A njegova sekularna jednačina, koja predstavlja uslov za dobijanje netrivialnih rešenja, ima oblik:

$$1 + \frac{W_1 W_2}{4\lambda^2} + \frac{W_1 + W_2}{2\lambda} \operatorname{cth} \lambda L = 0 \quad (5.9)$$

Analizirani slučaj odgovara negativnim energijama kakve postoje u 0-H-0 kond-u za KH_2PO_4 . Kako, prema sl.1, postoje dve negativne energije, parametri u sekularnoj jednačini (5.9) moraju da budu pdešeni tako, da ona dâ dva negativna rešenja za energiju. Analiza jednačine (5.9) pokazuje da je to moguće samo u slučaju kada su ispunjeni sledeći uslovi:

$$W_1 = -|W| ; \quad W_2 = -\beta^2 |W| ; \quad \frac{2\beta}{1+\beta^2} < 1 ; \quad \frac{2(1+\beta^2)}{\beta^2 L |W|} < 1 \quad (5.10)$$

Dalja analiza ovih uslova izvodi se u sledećem poglavlju. Na ovom je mestu potrebno da se nadje talasna funkcija $\Psi(x)$. Na osnovu relacija (5.6) i (4.14), rešenje jednačine (5.3) može da se napiše u obliku:

$$\Psi_{\pm}(x) = \frac{A_1 |W|}{2L} \left[\operatorname{ch} \lambda(x \pm L) + \nu \operatorname{ch} \lambda \right] \quad (5.11)$$

gde je:

$$v = \beta^2 \frac{A_2}{A_1}$$

Od rešenja (5.11) mogu da se obrazuju dve linearne kombinacije i to: $\Psi_I = \Psi_+ + \Psi_-$ i $\Psi_{II} = \Psi_+ - \Psi_-$. Jednostavan račun pokazuje da je:

$$\Psi_I(x) = C_I \underline{ch \lambda x} \quad ; \quad \Psi_{II}(x) = C_{II} \underline{sh \lambda x} \quad (5.12)$$

Kako funkcija $sh \lambda x$ u tačkama 0 i $\pm L$ ima vrednost 0, očigledno je da relacija (5.3) zadovoljava funkciju Ψ_{II} . U cilju pojednostavljenja pisanja indeks II je nadalje izostavljen, a rešenje postavljenog problema je izraženo funkcijom:

$$\Psi(x) = C \underline{sh \lambda x} \quad (5.13)$$

Rešenje se normira uslovom:

$$\int_{-L}^L dx \Psi^2(x) = 1 \quad (5.14)$$

tako da normirana talasna funkcija (5.14) protona u bondu u slučaju kada on ima negativnu energiju, ima konačan oblik:

$$\Psi(x) = \frac{\underline{sh \lambda L}}{\sqrt{L \left(\frac{sh 2\lambda L}{2\lambda L} - 1 \right)}} \quad (5.15)$$

U neposrednoj analizi rešava se jednačina (5.2) u slučajevima pozitivnih energija. U ovom je slučaju talasna funkcija označena sa Φ , a jednačina za $E > 0$ glasi:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \lambda^2\Phi = \left\{ W_1 \delta(x) + \frac{1}{2} W_2 [\delta(x-L) + \delta(x+L)] \right\} \Phi \quad (5.16)$$

Kao što se vidi, jednačina (5.16) se razlikuje od (5.3) samo po znaku ispred λ^2 . To znači da svi rezultati za ovaj slučaj mogu da se dobiju iz rezultata za prethodni, ukoliko se u njima izvrši prelaz $\lambda \rightarrow \lambda i$. Na osnovu rečenog, konačni rezultati su sledeći. Sekularna jednačina ima oblik:

$$1 - \frac{W_1 W_2}{4\lambda^2} - \frac{W_1 + W_2}{2\lambda} \operatorname{ctg} \lambda L = 0 \quad (5.17)$$

a normirana talasna funkcija data je sa:

$$\Phi(x) = \frac{\sin \lambda x}{\sqrt{L \left(1 - \frac{\sin 2\lambda L}{2\lambda L}\right)}} \quad (5.18)$$

Potrebno je da se naglasi, da u ovom slučaju sekularna jednačina uvek ima rešenje bez obzira na W_1 i W_2 .



6. NEGATIVNE ENERGIJE - RAZNI TIPOVI REŠENJA

Ovde se detaljnije analizira slučaj negativnih energija, jer on odgovara 0-H-0 bond-ovima u feroelektricima. Za bond u KH_2PO_4 postoje eksperimentalni podaci:

$$L = 0.35 \text{ \AA} ; \quad 2\Omega = 200 - 400 \text{ cm}^{-1} \quad (6.1)$$

Sekularna jednačina u ovom slučaju može da se napiše u obliku:

$$\text{cth } Z = \frac{2}{M(1+\beta^2)} Z + \frac{\beta^2 M}{2(1+\beta^2)} \frac{1}{Z} \quad (6.2)$$

$$Z = \lambda L ; \quad M = L|W| \quad (6.3)$$

Ukoliko se izvrši sledeći izbor parametara:

$$\beta = 1.02 ; \quad M = 10.2 ; \quad L = 0.35 \text{ \AA} \quad (6.4)$$

Iz (6.2) za Z se dobijaju dva rešenja i to:

$$Z_1 = 5.315 ; \quad Z_2 = 5.100 \quad (6.5)$$

Ovim vrednostima Z odgovaraju dve vrednosti λ

$$\lambda_1 = \frac{Z_1}{L} = 15.186 \times 10^8 \text{ cm}^{-1} ; \quad \lambda_2 = \frac{Z_2}{L} = 14.571 \times 10^8 \text{ cm}^{-1} \quad (6.6)$$

i dva nivoa energije (koja su takodje izražena u $[\text{cm}^{-1}]$):

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \lambda_1^2}{2m} = -3856 \text{ cm}^{-1} ; \quad E_2 = -\frac{\hbar^2 \lambda_2^2}{2m} = -3550 \text{ cm}^{-1} \quad (6.7)$$

Normirane talasne funkcije za ovaj slučaj su:

$$\Psi_1(x) = 0.03833 \times 10^4 \text{ sh } \lambda_1 x ; \quad \Psi_2(x) = 0.04656 \times 10^4 \text{ sh } \lambda_2 x \quad (6.8)$$

Razmak izmedju dva negativna nivoa predstavlja energiju tunelovanja i ona iznosi:

$$2\Omega = E_2 - E_1 = 306 \text{ cm}^{-1} \quad (6.9)$$

što se dobro uklapa u eksperimentalne rezultate navedene pod (6.1). Jednostavno može da se proveriti da funkcije $\Psi_1(x)$ i $\Psi_2(x)$ nisu ortogonalne, jer je:

$$\int_{-L}^L dx \Psi_1(x) \Psi_2(x) \neq 0 \quad (6.10)$$

Kako bi rezultati, dobijeni za jedan bond, mogli da budu primenjeni na ceo kristal, neophodno je da se od stanja Ψ_1 i Ψ_2 predje na ortogonalna stanja koja bi bila linearna kombinacija stanja Ψ_1 i Ψ_2 . Neka su pomenute linearne kombinacije odabrane u sledećem obliku:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(x) &= \underline{\text{sh } \lambda_1 x} - a \underline{\text{sh } \lambda_2 x}; & a &= A e^{i\varphi} \\ \Phi_2(x) &= \underline{\text{sh } \lambda_1 x} - b \underline{\text{sh } \lambda_2 x}; & b &= \xi e^{i\eta} a \end{aligned} \right\} \quad (6.11)$$

Uzimajući uslov:

$$\int_{-L}^L dx \Phi_1^*(x) \Phi_2(x) = 0 \quad (6.12)$$

za određivanje parametara A , ξ , φ i η dobija se sledeći sistem jednačina:

$$\left. \begin{aligned} 1 - \frac{I_{12}}{I_2} \frac{1}{\xi} [\cos(\varphi + \eta) + \xi \cos \varphi] A^{-1} + \frac{I_1}{I_2} \frac{1}{\xi} A^{-1} \cos \eta &= 0 \\ I_{12} A^{-1} [\sin(\varphi + \eta) - \xi \sin \varphi] - I_1 A^{-2} \sin \eta &= 0 \\ I_1 = \int_{-L}^L dx \text{sh}^2 \lambda_1 x; & I_2 = \int_{-L}^L dx \text{sh}^2 \lambda_2 x \\ I_{12} = \int_{-L}^L dx \text{sh } \lambda_1 x \text{sh } \lambda_2 x & \end{aligned} \right\} \quad (6.13)$$

Ukoliko je izabrana vrednost $\eta = -\frac{\pi}{2}$, jednačine (6.13) svode se na:

$$\left. \begin{aligned} \sin 2\varphi &= \frac{2\xi}{\xi^2 + 1} \left(\frac{I_1 I_2}{I_{12}^2} - 1 \right) \\ A &= \frac{I_1}{I_{12} (\xi \sin \varphi + \cos \varphi)} \end{aligned} \right\} \quad (6.14)$$

Uzima se zatim da ugao φ leži u III kvadrantu. Da bi kvadratna jednačina po ξ (prva u sistemu (6.14)) imala realna rešenja mora da se uzme da je:

$$\varphi = \pi + \varepsilon; \quad \varepsilon \leq 0.000205 \quad (6.15)$$

Analiziraju se dalje dva granična slučaja i to: $\varepsilon = 0.000205$ i $\varepsilon = 0$. Razmotrimo najpre prvi granični slučaj:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\varepsilon} &= 0.000205; & \tilde{\varphi} &= \pi + 0.000205; & \sin \tilde{\varphi} &\approx -0.000205; \\ \cos \tilde{\varphi} &\approx -1; & \tilde{\xi} &= -1; & \tilde{A} &= -1.21517 \end{aligned} \right\} \quad (6.16)$$

U ovom slučaju se dobijaju kompleksne energije. Ortogonalne talasne funkcije imaju oblik:

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_1(x) &= 1.88687 \times 10^4 (\text{sh } \lambda_1 x - \tilde{A} e^{i\tilde{\Phi}} \text{sh } \lambda_2 x) \\ \tilde{\Phi}_2(x) &= 0.0271 \times 10^4 (\text{sh } \lambda_1 x - i\tilde{A} e^{i\tilde{\Phi}} \text{sh } \lambda_2 x)\end{aligned}\quad (6.17)$$

dok su realni i imaginarni delovi energija:

$$\tilde{E}_1 = \int_{-L}^L dx \tilde{\Phi}_1^*(x) \hat{H} \tilde{\Phi}_1(x) ; \quad \tilde{E}_2 = \int_{-L}^L dx \tilde{\Phi}_2^*(x) \hat{H} \tilde{\Phi}_2(x)$$

dati sa:

$$\begin{aligned}Re \tilde{E}_1 &= -3401 \text{ cm}^{-1} ; & Re \tilde{E}_2 &= -3.682 \text{ cm}^{-1} \\ Im \tilde{E}_1 &= 152 \text{ cm}^{-1} ; & Im \tilde{E}_2 &= 152 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}\quad (6.19)$$

Energija tunelovanja:

$$2\tilde{\Omega} = Re \tilde{E}_1 - Re \tilde{E}_2 = 281 \text{ cm}^{-1}\quad (6.20)$$

iznosi 231 cm^{-1} i uklapa se u granice eksperimenta. Oba nivoa E_1 i E_2 imaju isto vreme života:

$$\tau = \frac{\hbar}{Im \tilde{E}} = 3.5 \times 10^{-14} \text{ s}\quad (6.21)$$

Sledi analiza drugog graničnog slučaja, tj. kada je $\tilde{\epsilon} = 0$.

Tada se dobija:

$$\begin{aligned}\tilde{\epsilon} &= 0 ; & \sin \tilde{\Phi} &= 0 ; & \tilde{\epsilon} &= 0 \\ \tilde{\Phi} &= \pi ; & \cos \tilde{\Phi} &= -1 ; & \tilde{A} &= -1.21492\end{aligned}\quad (6.22)$$

U ovom slučaju obe energije su realne. Ortonormirane funkcije $\tilde{\Phi}_1$ i $\tilde{\Phi}_2$ date su sa:

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_1(x) &= 1.89318 \times 10^4 (\text{sh } \lambda_1 x + 1.21492 \text{sh } \lambda_2 x) \\ \tilde{\Phi}_2(x) &= 0.03833 \times 10^4 \text{sh } \lambda_1 x\end{aligned}\quad (6.23)$$

Odgovarajuće energije su

$$\begin{aligned}\tilde{E}_1 &= \int_{-L}^L dx \tilde{\Phi}_1^*(x) \hat{H} \tilde{\Phi}_1(x) = -3831 \text{ cm}^{-1} \\ \tilde{E}_2 &= \int_{-L}^L dx \tilde{\Phi}_2^*(x) \hat{H} \tilde{\Phi}_2(x) = -3550 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}\quad (6.24)$$

Energija tunelovanja iznosi:

$$2\tilde{\Omega} = \tilde{E}_2 - \tilde{E}_1 = 281 \text{ cm}^{-1} \quad (6.25)$$

a to znači, da je jednaka energiji iz prethodnog slučaja. Na kraju ovog poglavlja data je konačna forma potencijala $V(x)$ za koju su dobijeni navedeni rezultati. S obzirom na (3.1), (5.2), (5.10) i (6.4), jednostavno se izračunava da modelni potencijal koji se uklapa u eksperimente ima oblik:

$$V(x) = -10^{-22} \{9.67863\delta(x) + 5.03487[\delta(x+L) + \delta(x-L)]\} \\ L = 0.35 \text{ \AA} = 0.35 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (6.26)$$

7. PROTONSKE STRUJE I BRZINA PROTONA U BOND-U

Na osnovu rezultata iz prethodnog poglavlja, vidi se da je struja verovatnoće različita od nule samo tada, ako su stanja protona u bondu opisana kompleksnim funkcijama (6.17).

Na osnovu opšte definicije struje verovatnoće:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mz} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \quad (7.1)$$

i relacije (6.17), jednostavno može da se dodje do izraza za struje verovatnoće, koji glasi:

$$j_1(x) = \frac{\hbar \tilde{c}_1^2}{2m} (\lambda_1 \operatorname{ch} \lambda_1 x \operatorname{sh} \lambda_2 x - \lambda_2 \operatorname{ch} \lambda_2 x \operatorname{sh} \lambda_1 x) \tilde{A} \sin \tilde{\varphi}$$

$$j_2(x) = \frac{\hbar \tilde{c}_2^2}{2m} (\lambda_1 \operatorname{ch} \lambda_1 x \operatorname{sh} \lambda_2 x - \lambda_2 \operatorname{ch} \lambda_2 x \operatorname{sh} \lambda_1 x) \tilde{A} \tilde{\xi} \cos \tilde{\varphi} \quad (7.2)$$

$$\tilde{c}_1^2 = 3.56027 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}; \quad \tilde{c}_2^2 = 0.00073 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

Ovim strujama verovatnoće odgovaraju sledeće protonske struje date kao:

$$J(x) = e j(x); \quad e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$J(-x) = J(x) \quad (7.3)$$

Zavisnost protonskih struja od mesta u bondu data je u tablici 1.

TABLICA 1.

$x \times 10^9$ [cm]	J_1 [μA]	J_2 [μA]
0.0	0.00000	0.00000
0.5	0.00017	0.00017
1.0	0.00187	0.00187
1.5	0.01071	0.01071
2.0	0.05124	0.05125
2.5	0.23210	0.23214
3.0	1.03426	1.03446
3.5	4.58729	4.58820

Kao što se iz tablice vidi, obe protonske struje su približno istog intenziteta i veoma su male (usrednjeno reda 1 μA). Važno je da se uoči da su struje maksimalne na granicama bond-ova, što ukazuje na mogućnost da dodje do prolaska protona kroz δ-po-

tencijale na krajevima bond-a. Od interesa je da se u granicama ovog modela procene brzine kretanja protona u bond-u.

Brzina je data kao integral struje verovatnoće po koordinati:

$$v(x) = \int_0^x dy j(y) \tag{7.4}$$

$$v(-x) = v(x)$$

Ukoliko se na osnovu (7.2) i (7.4) proračunaju brzine protona u stanjima $\tilde{\Phi}_1$ i $\tilde{\Phi}_2$, dobijaju se tada rezultati koji su dati u tablici 2.

TABLICA 2.

$x \times 10^9$ [cm]	v_1 [cm/s]	v_2 [cm/s]
0.0	0.00000	0.00000
0.5	0.12688	0.12691
1.0	3.11665	3.11727
1.5	18.72548	18.72919
2.0	100.11762	100.13746
2.5	474.57184	474.66590
3.0	2150.97792	2151.40422
3.5	9596.28606	9598.18795

Kao što se iz tablice vidi, brzina raste kada se proton približava granici bond-a. Brzine su relativno male u odnosu na uobičajene u domenu mikroobjekata (usrednjeno na oko 30 m/s). S obzirom na uobičajene predstave o lokaciji protona u bond-u interesantno je da se odrede maksimalne gustine verovatnoće za stanja (6.17). Jednostavan račun pokazuje da gustine:

$$\tilde{\rho}_1(x) = \tilde{\Phi}_1^*(x) \tilde{\Phi}_1(x) \quad ; \quad \tilde{\rho}_2(x) = \tilde{\Phi}_2^*(x) \tilde{\Phi}_2(x) \tag{7.5}$$

imaju sledeće osobine: Za $x=0$ je $\tilde{\rho}_1(0) = \tilde{\rho}_2(0) = 0$ i to odgovara minimumu gustine verovatnoće. Gustina verovatnoće koja odgovara nižoj energiji, a to je $\tilde{\rho}_1(x)$ nema maksimum, ali ima najveću vrednost na krajevima bond-a (važi za sve slične slučajeve). Gustina verovatnoće koja odgovara višoj energiji $\tilde{\rho}_2$, a to je $\tilde{\rho}_2(x)$ ima maksimum za $x = \pm 0.2525 \text{ \AA}$, a to znači na približno 0.7 dužine bond-a. Vrednost maksimalne gustine iznosi $\rho_{2 \max} = 3.07851 \times 10^8$.

Na osnovu izloženog može da se zaključi da u stanju niže energije proton može da se locira bilo gde, osim na sredini bond-a, što odgovara pretpostavci da je on lociran, ili u levoj, ili u desnoj polovini jame. Što se tiče stanja više energije, proton se locira u razmaku ± 0.7 od dužine jame, što takodje odgovara predstavi da se u pobudjenom stanju proton statistički približava sredini bond-a. Razmotrimo još i slučaj stanja (6.23). U ovim stanjima, s obzirom da su realna, struje i brzine su jednake nuli, što znači da proton pokazuje statično ponašanje. U ovom slučaju mogu samo da se ispituju gustine verovatnoće:

$$\tilde{\rho}_1(x) = \tilde{\Phi}_1^*(x)\tilde{\Phi}_1(x) ; \quad \tilde{\rho}_2(x) = \tilde{\Phi}_2^*(x)\tilde{\Phi}_2(x) \quad (7.6)$$

Jednostavno može da se pokaže da $\tilde{\rho}_1$ ima minimum koji je jednak nuli za $x=0$. Što se tiče gustine $\tilde{\rho}_2$, ona ima tri minimuma (u sva tri je slučaja jednaka nuli). Minimumi nastaju za vrednosti $x=0$ i $x=\pm 0.31650 \text{ \AA}$. Gustina $\tilde{\rho}_2$ ima maksimume za $x=\pm 0.24963 \text{ \AA}$ i ova gustina tada iznosi: $\tilde{\rho}_2 = 3.07273 \times 10^8$. Prema tome, može da se zaključi da proton u stanju sa višom energijom \tilde{E}_2 najčešće obitava na ± 0.71 od dužine bond-a.

Na kraju ovog poglavlja data je kratka analiza stanja protona kada poseduje pozitivne energije. Sekularna jednačina u ovom slučaju svodi se na:

$$\text{ctg } Z = \frac{\beta^2 M}{2(1+\beta^2)} \frac{1}{Z} - \frac{2}{M(1+\beta^2)} Z \quad (7.7)$$

Pri istom izboru parametara, kao i u slučaju negativnih energija, postoje dva energetski najniža rešenja:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= 2872 \text{ cm}^{-1} ; & \epsilon_2 &= 9417 \text{ cm}^{-1} \\ \epsilon_2 - \epsilon_1 &= 6545 \text{ cm}^{-1} \end{aligned} \quad (7.8)$$

Energijama ϵ_1 i ϵ_2 odgovaraju talasne funkcije:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(x) &= 1.71362 \times 10^4 \sin \lambda_1 \\ \Phi_2(x) &= 1.65170 \times 10^4 \sin \lambda_2 \\ \lambda_1 &= 13.106 \times 10^8 \text{ cm}^{-1} ; \lambda_2 = 23.731 \times 10^8 \text{ cm}^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (7.9)$$

Budući da slučaj pozitivnih energija nije tipičan za feroelektrične materijale, na ovom se mestu neće izvršiti ortogonalizacija i ortonormiranje stanja Φ_1 i Φ_2 , kao što je to učinjeno u prethodnom slučaju.

8. HAMILTONIJAN KRISTALA SA MODELNIM O-H-O BOND-ovima

Dosadašnje se analize odnose na izolovani O-H-O bond. Kroisteći metod Bogoljubova, kojim se od koordinatne reprezentacije prelazi na reprezentaciju druge kvantizacije, može da se napiše hamiltonijan kristala koji sadrži O-H-O bondove. U skladu sa već pomenutom teorijom Bogoljubova, hamiltonijan kristala može da se napiše u obliku:

$$\hat{H} = \sum_{\bar{n}ff'=1}^2 H_{ff'} a_{\bar{n}f}^+ a_{\bar{n}f'} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}m}^2 W_{\bar{n}m} (ff'f''f''') a_{\bar{n}f}^+ a_{\bar{n}f'} a_{\bar{n}m}^+ a_{\bar{n}m}''' \quad (8.1)$$

$$ff'f''f''' = 1$$

Operatori $a_{\bar{n}f}^+$ i $a_{\bar{n}f}$ su Fermi operatori koji kreiraju proton u stanju $+$ i u bond-u, čije je mesto definisano vektorom kristalne rešetke \vec{n} . Kako svaki bond sadrži samo jedan proton, mora da bude ispunjen uslov:

$$\sum_{f=1}^2 a_{\bar{n}f}^+ a_{\bar{n}f} = 1 \quad (8.2)$$

Indeks kvantnog stanja f , uzima dve vrednosti i to 1 i 2. U poglavlju 6. pokazano je da postoje samo dva stanja energije E_1 i E_2 , pri čemu je u oba slučaja $E_2 > E_1$. Indeks 1 označava, zbog toga, osnovno stanje, a indeks 2, pobudjeno stanje. Matrični elementi $H_{ff'}$ dati su sa:

$$H_{ff'} = \int_V dV_{\vec{n}} \Psi_f^*(\vec{\xi}_{\vec{n}}) \hat{H} \Psi_{f'}(\vec{\xi}_{\vec{n}}) \quad (8.3)$$

Integracija se vrši po zapremini elementarne ćelije, a kako su bond-ovi linearne strukture, integral (8.3) svodi se na integraciju od $-L$ do L . Unutrašnja koordinata $\vec{\xi}_{\vec{n}}$ je ili x , ili y , ili z . Hamiltonijan ima oblik:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = 10^{-22} \left\{ 9.67863\delta(x) + 5.03487[\delta(x-L) + \delta(x+L)] \right\} \quad (8.4)$$

Funkcije $\Psi_f(\vec{\xi}_{\vec{n}})$ su:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\xi_{\bar{n}}) &= \tilde{\Phi}_1(x), \quad \tilde{\Phi}_2(x) \\ \tilde{\Psi}(\xi_{\bar{n}}) &= \tilde{\Phi}_1(x), \quad \tilde{\Phi}_2(x) \end{aligned} \quad (8.5)$$

što zavisi koji se od slučajeva, određenih u poglavlju 6., analizira. Matrični elementi interakcije između bond-ova dati su sa:

$$W_{\bar{n}\bar{m}}(ff'f''f''') = \int_V dV_{\bar{n}} dV_{\bar{m}} \tilde{\Psi}_{f'}^*(\xi_{\bar{n}}) \tilde{\Psi}_{f''}(\xi_{\bar{m}}) W_{\bar{n}\bar{m}}(\xi_{\bar{n}}, \xi_{\bar{m}}) \Psi_{f'}(\xi_{\bar{n}}) \Psi_{f''}(\xi_{\bar{m}}) \quad (8.6)$$

Što se tiče funkcije $V_{\bar{n}\bar{m}}(\xi_{\bar{n}}, \xi_{\bar{m}})$, ona zavisi od unutrašnjih koordinativnih bond-ova $\xi_{\bar{n}}$ i rastojanja između bond-ova $|\bar{n}-\bar{m}|$. Analitički izraz ove funkcije nije u potpunosti poznat, ali merenja pokazuju da ona eksponencijalno opada sa rastojanjem $|\bar{n}-\bar{m}|$. Vrednost matričnih elemenata iznosi oko $10^{-1} - 10^{-2}$ eV. S obzirom da analitički izraz nije poznat, neće se vršiti proračun matričnih elemenata $W_{\bar{n}\bar{m}}(\xi_{\bar{n}}, \xi_{\bar{m}})$. Kako su funkcije $\tilde{\Phi}_1$ i $\tilde{\Phi}_2$, odnosno $\tilde{\Phi}_1$ i $\tilde{\Phi}_2$, ortogonalne, matrični elementi $H_{ff'}$ su dijagonalni i može da se napiše:

$$H_{ff'} = H_f \delta_{ff'} \quad (8.7)$$

U skladu sa teorijom Bogoljubova, podesno je da se od Fermi operatora a predje na Pauli operator P i to u skladu sa definicijom:

$$P_{\bar{n}}^+ = a_{\bar{n}1}^+ a_{\bar{n}2}; \quad P_{\bar{n}} = a_{\bar{n}2}^+ a_{\bar{n}1}; \quad P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} = a_{\bar{n}1}^+ a_{\bar{n}1} \quad (8.8)$$

Pretpostavimo da kristal ima centar inverzije, pa su zbog toga matrični elementi $W_{\bar{n}\bar{m}}(ff'f''f''')$ jednaki nuli kada u njima tri indeksa \bar{n} nose oznaku osnovnog stanja \uparrow , ili ako samo jedan indeks nosi oznaku osnovnog stanja \uparrow .

Potrebno je da se u hamiltonijanu (8.1) izvrši razvoj suma po f , te da se uzmu u obzir (8.7) i (8.8), a drugi član u hamiltonijanu da se razvije po shemi 1.

HEMA 1.

f	f'	f''	f'''	f	f'	f''	f'''
2	2	2	2	2	1	2	1
1	1	2	2	1	2	2	1
2	2	1	1	2	1	1	2
1	2	1	2	1	1	1	1

Na osnovu rečenog, hamiltonijan može da se napiše u obliku:

$$H = \Delta \sum_{\bar{n}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} X_{\bar{n}-\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} (Y_{\bar{n}-\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}}^+ + Y_{\bar{n}-\bar{m}}^* P_{\bar{n}} P_{\bar{m}}) + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} Z_{\bar{n}-\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{m}} \quad (8.9)$$

Oznake upotrebljene u (8.9) su sledeće:

$$\begin{aligned} \Delta &= H_{11} - H_{22} - \frac{1}{2} [\tilde{W}(1122) + \tilde{W}(2211) - \tilde{W}(2222)] \\ H_{11} - H_{22} &= \begin{cases} -2\tilde{\Omega} \\ \approx \\ -2\tilde{\Omega} \end{cases} ; \quad \tilde{W}(abcd) = \sum_{\bar{n}} W_{\bar{n}0}(abcd) \\ X_{\bar{n}-\bar{m}} &= \frac{1}{2} [W_{\bar{n}\bar{m}}(1221) + W_{\bar{n}\bar{m}}(2112)] \\ Y_{\bar{n}-\bar{m}} &= \frac{1}{2} W_{\bar{n}\bar{m}}(1212) ; \quad W_{\bar{n}\bar{m}}(2121) = W_{\bar{n}\bar{m}}^*(1212) \\ Z_{\bar{n}-\bar{m}} &= \frac{1}{2} [W_{\bar{n}\bar{m}}(1111) + W_{\bar{n}\bar{m}}(2222) - W_{\bar{n}\bar{m}}(1122) - W_{\bar{n}\bar{m}}(2211)] \end{aligned} \quad (8.10)$$

S obzirom na hamiltonijan (8.9) može da se izvrši termodinamička analiza feroelektričnog kristala sastavljenog iz modelnih 0-H-0 bond-ova čiji je hamiltonijan (8.4). Ove se analize ne izvode u radu, jer su njeni generalni rezultati u literaturi dobro poznati. Potrebno je samo da se naglasi da iz analize individualnog bond-a postoji mogućnost za dva tipa hamiltonijana.

Ako se koriste funkcije $\tilde{\Phi}$, tada je energija tunelovanja realna, a i matrični elementi, takodje. Ovakav bi se slučaj uklopio u standardne analize feroelektrika koje su značajne sa čisto fizičkog aspekta.

Ako se, međjutim, koriste funkcije $\tilde{\Phi}$, hamiltonijan bi sadržao kompleksne energije tunelovanja, a matrični elementi bili bi takodje kompleksni. U ovom slučaju, kako je poznato, javljaju se protonske struje, pa bi ovakav hamiltonijan bio podesan za analizu biofizičkih aspekata feroelektričnih fenomena.

Z A K L J U Č A K

Analize modelnog O-H-O bond-a su pokazale da postoji mogućnost statističkih stanja u bond-u, a također i mogućnost kratkoživućih stanja u kojima nastaju protonske struje. Prvi pomenuti slučaj dopušta da se razvije teorija standardnih feroelektričnih fenomena. Drugi bi slučaj bio od značaja za izolovanje biofizičkih fenomena, jer kao što je poznato, protonske struje predstavljaju jedan od bitnih mehanizama u razvoju žive materije.

L I T E R A T U R A

1. D. Kapor: Novi aspekti analize feroelektrika tipa KDP, Novi Sad, 1979.
2. М.В. Волькенштейн, Биология и физика УФН 109 (3), 499 (1973.)
3. И. ПРИГОЖИН: Введение в термодинамику необратимых процессов Москва ИЛ 1949.
4. М. Eigen, Naturwiss. 58, 465 (1971.)
5. F.H.C. Crick, J. Mol. Biol. 38, 367 (1968.)

