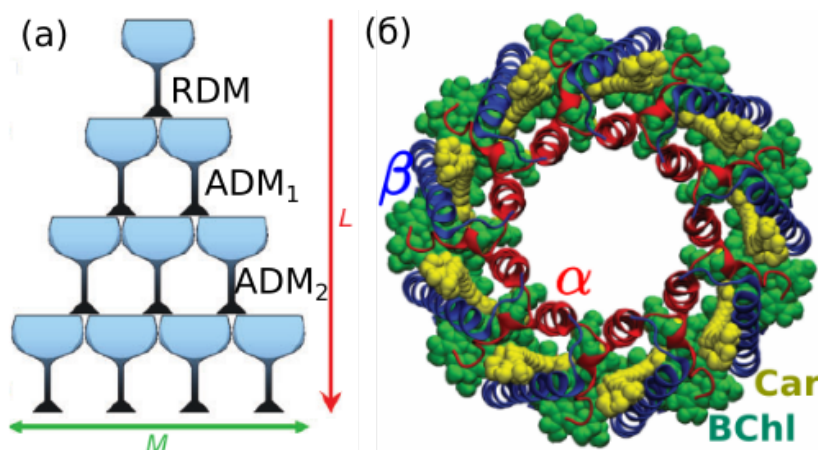


## Тема: Нумерички егзактни третман равнотежних својстава једнодимензионалног Холштајновог модела

Предлагач: др Вељко Јанковић (Е-mail: [veljko.jankovic@ipb.ac.rs](mailto:veljko.jankovic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/veljko>)

Проблем квантномеханичког описа равнотежних својстава и динамике електронских ексцитација (електрона, шупљина, екситона) које интерагују са нуклеарним вибрацијама (фононима) формирајући тзв. полароне је свеprisутан у физици кондензоване материје. Електрон–фонон интеракција фундаментално одређује транспортна својства, нпр. проводност материјала или ефикасност трансфера ексцитационе енергије у фотосинтетичким пигмент–протеин комплексима.

Истраживање би се фокусирао на једнодимензионални Холштајнов модел који представља најједноставнији нетривијални модел са електрон–фонон интеракцијом. Током више од шест деценија, Холштајнов модел је проучаван различитим пертурбационим и варијационим техникама, док је примена тзв. **нумерички егзактни приступа** почели тек недавно. У овом истраживању бисмо примењивали **формализам матрице густине и хијерархијске једначине кретања (ХЕОМ)**, видети слику 1(а). Заинтересовани кандидат би се укључио у активну линију истраживања која тежи да искористи транслаторну симетрију проблема у циљу смањења нумеричке захтевности ХЕОМ (како у погледу меморије, тако и у погледу процесорског времена). Кандидат би учествовао у аналитичком формулисању и нумеричком решавању нове форме ХЕОМ за **одређивање равнотежног стања система међусобно спрегнутих електронских ексцитација и фонона**. Развијени формализам би се искористио за детаљно **описивање структуре равнотежног поларонског стања** за различите вредности моделних параметара. Као занимљив пример примене развијене технике, могли бисмо размотрити **квантификовање степена делокализације** екситона у високо-симетричним фотосинтетичким пигмент–протеин комплексима, видети слику 1(б).



Слика 1. (а) Схематски приказ структуре ХЕОМ. Чаша на врху представља редуковану матрицу густине (RDM), док две, три и четири чаше испод ње представљају помоћне матрице густине (ADM) на дубинама 1,2 и 3, редом. (б) Поглед одозго на LH2 (Light Harvesting complex 2) комплекс бактерије *Rhodospseudomonas acidiphilia*. Молекули бактерио-хлорофила (Bchl, зелено) и каротеноида (Car, жуто) су смештени у полимерну матрицу састављену од алфа и бета апопротеина и образују симетричну прстенасту структуру.

Заинтересовани кандидати треба да су положили испите **Квантна статистичка физика, Теорија кондензованог стања и Квантна теорија поља 1**. Предложена тема је нарочито погодна за кандидате који имају **склоност ка аналитичком раду** и познају **основе програмирања** (C, C++, python).

Током израде мастер рада, студент би се кроз практичан рад упознао са основним поставкама формализма матрице густине, теорије отворених квантних система и нумерички егзактни приступа.