

Rezumatul tezei

1. Problema științifică de cercetare.

Lucrarea dată este dedicată studiului tranziției metal-dielectric de tip Peierls în cristale organice cvasiunidimensionale (Q1D). Scopul principal urmărit în teză este de a modela tranzițiile structurale Peierls în cristalele organice Q1D de TTF-TCNQ, TTT(TCNQ)₂ și TTT₂I₃, în scopul determinării unor parametri fizici din comparația valorilor teoretice ale temperaturii critice Peierls cu cele experimentale și de a determina spectrul renormat al fononilor acustici.

2. Conținutul de bază al tezei.

În teză este studiată tranziția metal-dielectric în cristale organice cvasiunidimensionale de tip n – TTF-TCNQ, TTT(TCNQ)₂ și de tip p - TTT₂I₃, fiind aplicat un model fizic mai complet al cristalului, tridimensional. Au fost deduse ecuațiile de dispersie pentru spectrul renormat al fononilor și expresiile analitice pentru operatorul de polarizare în modelul fizic 2D și 3D al cristalelor organice Q1D menționate anterior. Pentru deducerea ecuației de dispersie a fononilor a fost aplicată metoda funcțiilor Green dependente de temperatură și metoda diagramelor Feynman. Din seria exactă a teoriei perturbațiilor pentru funcția Green fononică au fost sumate diagramele care conțin 0, 1, 2... ∞ lațuri închise de două funcții Green electronice, care aduc contribuția cea mai importantă. În cadrul modelului fizic al cristalului au fost luate în considerație două mecanisme importante de interacțiune electron-fononică. Primul mecanism este de tipul potențialului de deformare, iar cel de-al doilea este de tipul polaronului. De asemenea, a fost analizat comportamentul tranziției structurale Peierls, când concentrația purtătorilor de sarcină variază.

3. Rezultatele științifice principale înaintate spre susținere:

1. A fost explicată tranziția structurală Peierls în cristalele de TTF-TCNQ, TTT(TCNQ)₂ și TTT₂I₃, fiind aplicat un model fizic al cristalului mai complet, care ține cont de două mecanisme de interacțiune electron-fononică, de tipul polaronului și de tipul potențialului de deformare.
2. Au fost deduse expresiile analitice pentru ecuația de dispersie și pentru operatorul de polarizare în aproximația fazelor aleatorii prin metodele diagramelor Feynman și a funcțiilor Green în aproximațiile 1D, 2D și 3D.
3. Au fost efectuate modelări numerice ale spectrului renormat al fononilor în aproximațiile 1D, 2D și 3D a cristalului.

A fost determinată temperatura critică Peierls pentru cristalele menționate anterior