

ДИНАМІКА ПЕРЕНОСУ ЗАРЯДУ У КВАЗІОДНОВИМІРНИХ СТРУКТУРАХ З ВОДНЕВИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ

І. В. Стасюк¹, Р. Я. Стеців¹, Р. Я. Юречко²

¹Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, Україна

²Національний університет "Львівська політехніка",
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна

(Отримано 4 жовтня 2005 р.; в остаточному вигляді — 20 лютого 2006 р.)

Запропоновано модель для опису переносу заряду у квазіодновимірних структурах з водневими зв'язками. Модель урахує протон–електронну взаємодію, яка описує зміну заряду йонів, що формують водневий зв'язок при зміщенні протона на зв'язку, і скорельований протон–електронний перенос. У наближенні молекулярного поля (МП) розраховано зонний електронний спектр моделі; знайдено середнє число електронів на вузлі залежно від значення хемічного потенціалу μ . Розраховано частоту тунелювання протона на зв'язку, перенормовану за рахунок взаємодії протона з середнім полем електронної підсистеми. Установлено, що система з водневими зв'язками може перебувати в трьох режимах із різною шириною електронної зони й суттєво різним значенням ефективної частоти тунелювання протона Ω^{eff} . Отримано частотну залежність дійсної частини провідності. При фіксованому значенні хемічного потенціалу $\mu = \text{const}$ установлено можливість, залежно від значення μ , переходів між однорідними фазами з різними електронними концентраціями n . При заданому середньому значенні n відбувається розшарування системи на фази з різною шириною електронної зони, різними n і Ω^{eff} , а також різними електронними провідностями.

Ключові слова: псевдоспін–електронна модель, протон–електронний перенос, водневий зв'язок, провідність.

PACS number(s): 72.60.+g; 36.40.-c

І. ВСТУП

Дослідженню явища транспорту в системах з водневими зв'язками останнім часом приділяється особливо велика увага. Це й розвиток експериментальних досліджень, і пошук та вивчення фізичних механізмів такого транспорту, аналіз особливостей термодинаміки та енергетичного спектра цих систем. Якщо раніше явище транспорту пов'язували з переміщенням протонів уздовж водневих зв'язків чи перескоками між зв'язками, то останнім часом як експериментально [1–8], так і на основі квантово-хемічних розрахунків [9] установлено значну кореляцію між переміщенням протонів і зміною електронних станів системи. Це дає змогу зробити висновок про наявність кооперативного протон–електронного транспорту (ПЕТ) [1, 7]. У попередній нашій праці [10] запропоновано псевдоспін–електронну модель для опису переносу заряду на окремому комплексі з водневим зв'язком. Модель урахує як скорельований протон–електронний перенос, так і протон–електронну взаємодію, яка описує зсув електронних рівнів йонів, що формують водневий зв'язок, зокрема йонів кисню, при зміщенні протона на зв'язку. Отримано енергетичний спектр моделі. Показано, що основний енергетичний стан моделі змінюється залежно від співвідношення між па-

раметрами тунелювання протона на зв'язку Ω , електронного переносу t , константи протон–електронної взаємодії g і визначається також розташуванням хемічного потенціалу μ в умовах, коли існує термостат електронів, сформований оточенням, із яким комплекс є в рівновазі. Установлено, що для певних μ існують критичні значення Ω , при яких змінюється середнє число електронів на комплексі, що впливає на його зарядовий стан. Для дослідження динаміки моделі розраховували комплексну динамічну провідність. Дійсна частина провідності $\sigma(\omega)$ має вигляд сукупності певного числа δ -пиків, інтенсивності яких залежать від температури й середнього числа електронів на зв'язку, а позиції визначаються значеннями параметрів g , Ω , t . Для спрощеної псевдоспін–електронної моделі ($t = 0$) на частотній залежності $\text{Re}\sigma(\omega)$ отримано два піки (максимуми). Один із них пов'язаний із протонним тунелюванням на зв'язку, значення іншого значною мірою визначається константою g протон–електронного зв'язку. Це ще одна можлива інтерпретація отриманих експериментально двох пиків провідності. Раніше їх трактували як частоти тунелювання протона на зв'язку й перескоки протона між зв'язками, що часто пов'язане з реорієнтаціями йонних груп. У цій статті запропонована модель поширюється на квазіодновимірні структури, що містять ланцюжки з водневими зв'язками.

II. ГАМІЛЬТОНІАН КВАЗІОДНОВИМІРНОЇ СТРУКТУРИ З ВОДНЕВИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ. НАБЛИЖЕННЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛЯ

Згідно із запропонованою раніше моделлю [10], гамільтоніан квазіодновимірної структури, що містить ланцюжки з водневими зв'язками, матиме вигляд:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{eff}} = & \sum_l \sum_{i,\sigma} ((\varepsilon - \mu)n_{i\sigma}(l) + g(n_{i\sigma}(l) - n_{i+1,\sigma}(l))S_i^z(l)) \\
 & + \sum_{l,l'} \sum_{i,j,\sigma} t_{i(l),j(l')} (a_{i\sigma}^+(l)a_{j,\sigma}(l') + a_{j,\sigma}^+(l')a_{i\sigma}(l)) \\
 & + \sum_l \sum_{i,\sigma} \Omega S_i^+(l) \left(-\frac{1}{2} \sin 2\varphi_0 (n_{i\sigma}(l) + n_{i+1,\sigma}(l)) \right. \\
 & \left. + \cos^2 \varphi_0 a_{i+1,\sigma}^+(l)a_{i\sigma}(l) + \sin^2 \varphi_0 a_{i\sigma}^+(l)a_{i+1,\sigma}(l) \right) + k.c.) \\
 & - \sum_{l,l'} \sum_{i,j} J_{i(l),j(l')} S_i^z(l) S_j^z(l').
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Тут виділено сумування вздовж ланцюжків, індекси i, j ; і сумування по ланцюжках, індекс l . Оператор псевдоспіна \hat{S}_i описує стани протона у двомінімунному потенціалі на водневому зв'язку. Домінуючим вважається перенос уздовж водневих зв'язків $t = t_{i(l),i+1(l)}$.

$$\sin 2\varphi_0 = -\frac{t}{\Delta_t}; \quad \Delta_t = \sqrt{\Delta_0^2 + t^2}, \tag{2.2}$$

де Δ_0 — зсув електронного рівня йонів, що формують водневий зв'язок при зміщенні протона із середини зв'язку в одне з рівноважних положень; $n_{i\sigma}$ — оператор електронної заселеності i -го вузла ланцюжка, σ — спин електрона, μ — хемічний потенціал електронів.

Другий доданок у гамільтоніані (2.1) з параметром g описує протон-електронну взаємодію. Подібний до-

данок $gS^z \sum n_{i\sigma}$ використовують при описі локально ангармонічних явищ у високотемпературних надпровідниках (ВТНП). Він характеризує взаємодію електронів провідності з підсистемою т. зв. апексних йонів кисню, що можуть мати два положення рівноваги [11]. У ВТНП ця взаємодія є одновузловою, оскільки апексний кисень зміщується перпендикулярно до надпровідних площин, у нашому випадку вона зачіпає сусідні вузли ланцюжкової структури, провідність якої досліджується.

Третій доданок у гамільтоніані (2.1) (параметр t) описує електронний перенос. Четвертий описує скорельований протон-електронний перенос, п'ятий — протон-протонну взаємодію.

У наближенні молекулярного поля (МП) гамільтоніан (2.1) запишемо так:

$$\begin{aligned}
 H_{MF} = & \sum_l \sum_{i,\sigma} (\varepsilon - 2\Omega\alpha \sin 2\varphi_0 - \mu)n_{i\sigma}(l) \\
 & + g\eta \sum_l \sum_{i,\sigma} (n_{i\sigma}(l) - n_{i+1,\sigma}(l)) \\
 & + \sum_{l,l'} \sum_{i,j,\sigma} t_{i(l),j(l')} (a_{i\sigma}^+(l)a_{j,\sigma}(l') + a_{j,\sigma}^+(l')a_{i\sigma}(l)) \\
 & + \Omega\alpha \sum_l \sum_{i,\sigma} (a_{i+1,\sigma}^+(l)a_{i\sigma}(l) + a_{i\sigma}^+(l)a_{i+1,\sigma}(l)) \\
 & + \Omega^{\text{eff}} \sum_l \sum_i S_i^x(l) - 4N\Omega\alpha A + 2nN\Omega\alpha \sin 2\varphi_0 \\
 & - 2\eta J \sum_l \sum_i S_i^z(l) + \eta^2 N J.
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Тут уведені позначення:

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \langle a_{i+1,\sigma}^+ a_{i\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} \rangle, \\ \eta &= \langle S_i^z(l) \rangle, \\ \alpha &= \langle S_i^x(l) \rangle, \\ J &= \sum_{l'} \sum_j J_{i(l),j(l')}, \\ \Omega^{\text{eff}} &= 4\Omega A - 2n\Omega \sin 2\varphi_0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

n — середня кількість електронів на вузлі, N — кількість вузлів у структурі.

Електронна частина гамільтоніяна (2.3) діагоналізується переходом до q -представлення; для діагоналізації спінової частини здійснюємо канонічне перетворення:

$$\begin{aligned} S_i^x(l) &= \tilde{S}_i^x(l) \cos \psi + \tilde{S}_i^z(l) \sin \psi, \\ S_i^z(l) &= -\tilde{S}_i^x(l) \sin \psi + \tilde{S}_i^z(l) \cos \psi, \\ \cos \psi &= 2\eta J/I, \quad \sin \psi = \Omega^{\text{eff}}/I. \end{aligned}$$

У результаті отримаємо

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_{q,\sigma} [\varepsilon(q) - \mu] a_{q,\sigma}^+ a_{q,\sigma} - I \sum_l \sum_i \tilde{S}_i^z(l) \\ &\quad - 4N\Omega\alpha A - 2nN\Omega\alpha t/\Delta_t + \eta^2 N J. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Тут

$$\varepsilon(q) = \varepsilon + 2\Omega\alpha t/\Delta_t + 2\Omega\alpha \cos(q_z a) + 2t_q, \quad (2.6)$$

де a — стала ґратки

$$\begin{aligned} t_q &= \sum_{i(l)-j(l')} t_{i(l),j(l')} \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{i(l)} - \mathbf{R}_{j(l')})], \\ I &= \sqrt{(4\Omega A + 2n\Omega t/\Delta_t)^2 + (2\eta J)^2}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

III. ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОДЕЛІ

У наближенні молекулярного поля термодинамічний потенціал моделі має вигляд:

$$\Phi = -kT \ln Z - 4N\Omega\alpha A - 2nN\Omega\alpha t/\Delta_t + NJ\eta^2. \quad (3.8)$$

Тут $Z = Z_e Z_{sp}$, де Z_e — статистична сума електронної підсистеми, Z_{sp} — псевдоспінової (протонної),

$$Z_{sp} = \left(2 \cosh \left(\frac{1}{2} \beta I \right) \right)^N, \quad (3.9)$$

$$Z_e = 2 \prod_q \left(1 + e^{-\beta[\varepsilon(q) - \mu]} \right). \quad (3.10)$$

У режимі $\mu = \text{const}$ рівноважний стан системи визначається з умови мінімуму термодинамічного потенціалу $(\partial\Phi/\partial\mathfrak{x})_{T,\mu} = 0$, де $\mathfrak{x} = \alpha, \eta, A$. У режимі $n = \text{const}$ — з умови мінімуму вільної енергії

$(\partial F/\partial\mathfrak{x})_{T,\mu} = 0$, де $F = \Phi + \mu N$. Середня кількість електронів на вузлі $n = \langle \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \rangle$ визначається так:

$n = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial\Phi}{\partial\mu} \right)_T$. У будь-якому з режимів записані вище умови дають систему рівнянь для визначення параметрів α, η, A і хемічного потенціалу. Для розв'язку $\eta = 0$ отриману систему рівнянь перепишемо так:

$$\alpha = -\frac{1}{2} \frac{I}{|I|} th \left(\frac{|I|}{2kT} \right), \quad (3.11)$$

$$A = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\cos(q_z a)}{1 + P(\mu, \alpha, q)},$$

$$n = \frac{2}{N} \sum_q \frac{1}{1 + P(\mu, \alpha, q)},$$

$$\eta = 0.$$

Для I отримано такий вираз:

$$I = \frac{4\Omega}{N} \sum_q \frac{\cos(q_z a) + t/\Delta_t}{1 + P(\mu, \alpha, q)}, \quad (3.12)$$

$$P(\mu, \alpha, q) = \exp[(\varepsilon(q) - \mu)/kT]. \quad (3.13)$$

З усіх можливих розв'язків системи рівнянь (3.11) слід вибрати такі, що дають мінімальне значення Φ чи F . На рис. 1 показано залежність середньої кількості електронів n і термодинамічного потенціалу Φ від хемічного потенціалу. Жирним наведено розв'язок, який забезпечує мінімальне значення термодинамічного потенціалу Φ . Числові значення параметрів моделі ми встановили у статті [10]. З одного боку, на основі квантово-хемічних розрахунків ми отримали числові значення характеристик водневого зв'язку, такі, як висота потенціального бар'єра для протона на зв'язку, залежність електронних заселеностей орбіталей атомів, що формують водневий зв'язок, від положення протона та інші. З другого боку, для цих величин на основі гамільтоніяна спрощеної псевдоспін-електронної моделі [10] отримано вирази, що містять параметри моделі. У цій праці використано такий набір параметрів: $\Delta_0 = 0.06$ eV, $g = 0.02$ eV, $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.1$ eV. Розрахунки також проводили при значеннях параметра $\Omega = 0.12$ eV і $\Omega = 0.01$ eV. У таких випадках значення параметрів наведено на рисунках. Як видно з рис. 1, для квазіодновимірних систем є фазові переходи зі зміною кількості електронів на вузлі. При температурах $T \leq 50$ K реалізуються два такі переходи.

Залежність країв електронної зони від хемічного потенціалу μ показано на рис. 2. Значення параметрів для (а) такі, що приводять до виродження зони в рівень при певних значеннях μ .

Залежність ефективної частоти тунелювання протона Ω^{eff} від хемічного потенціалу показано на рис. 3.

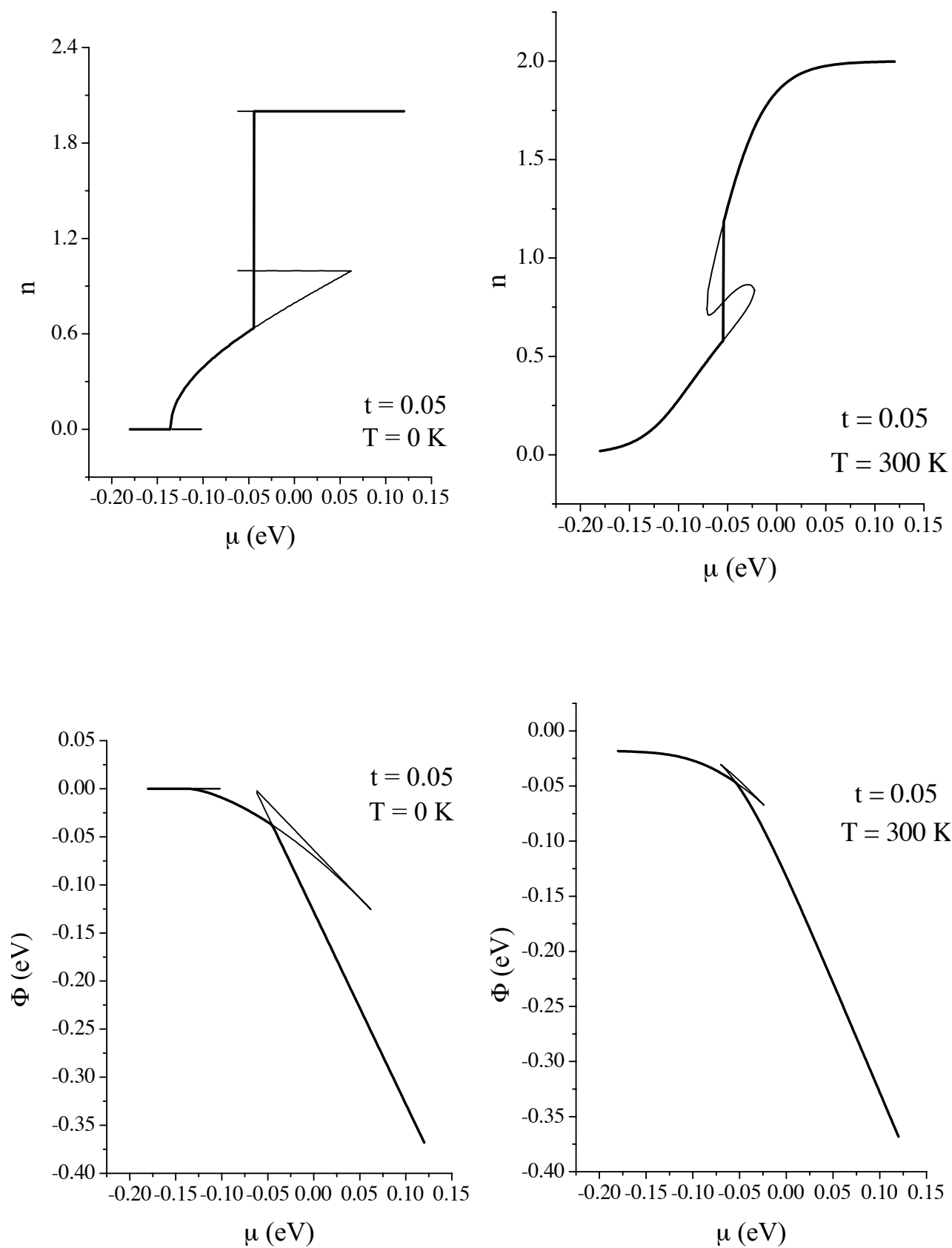


Рис. 1. Залежність середньої кількості електронів n і термодинамічного потенціалу Φ від хемічного потенціалу μ .

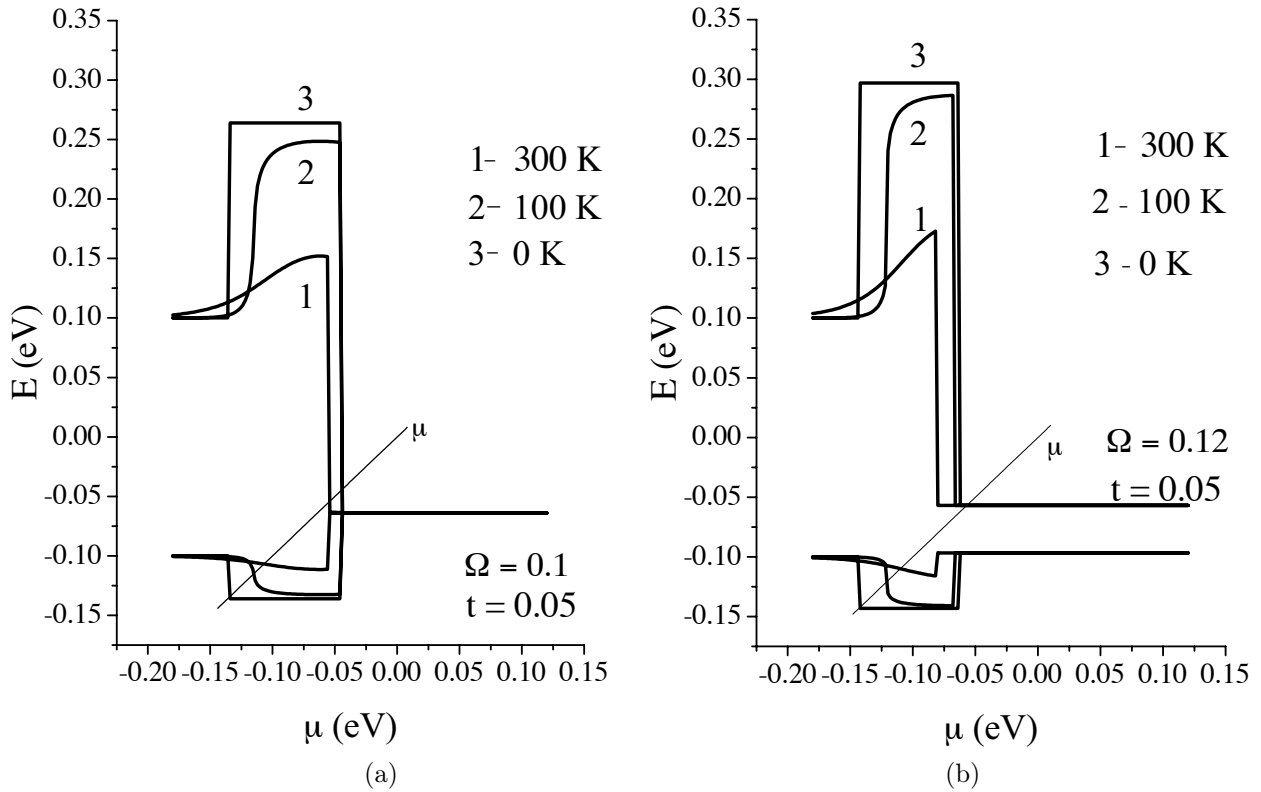


Рис. 2. Залежність країв електронної зони від хемічного потенціалу μ . Тонкою лінією показано значення μ .

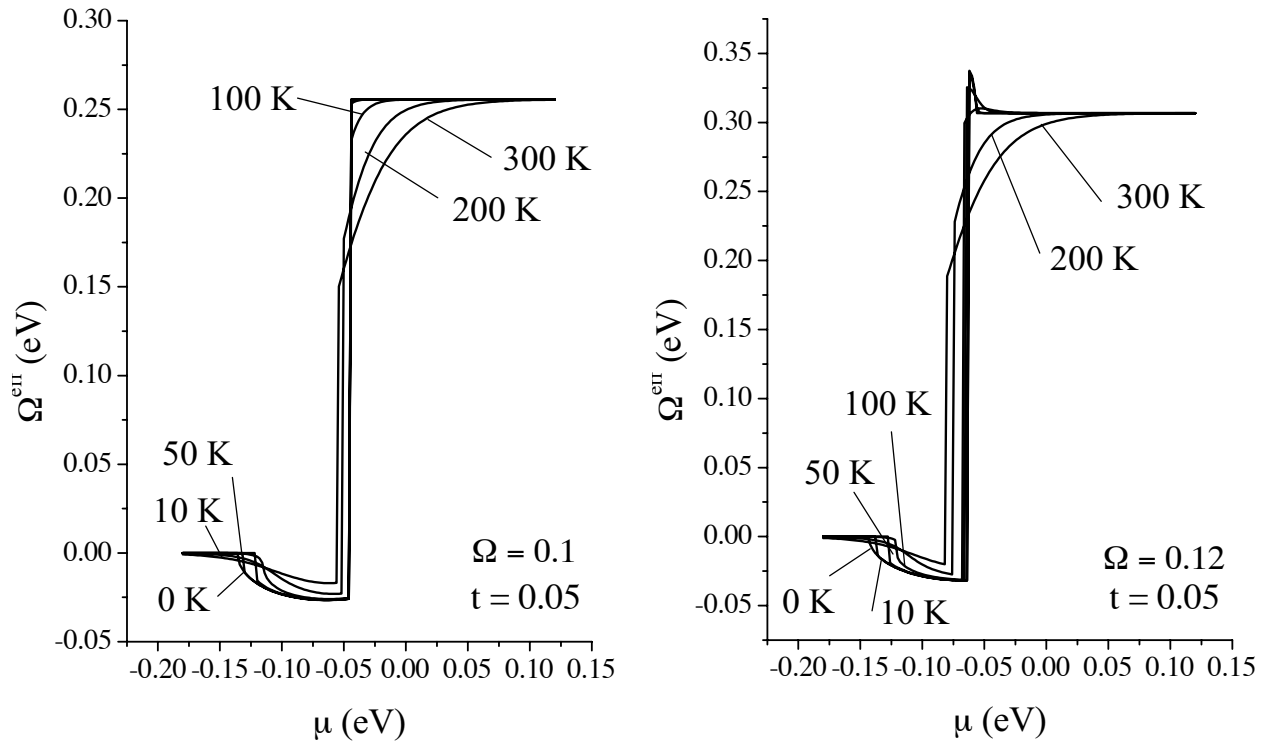


Рис. 3. Залежність ефективного частоти тунелювання протона Ω^{eff} від хемічного потенціалу μ .

Отримані результати (рис. 1, 2, 3) вказують на те, що квазіодновимірна система з водневими зв'язками може перебувати в трьох режимах. При цьому маємо різну ширину електронної зони й суттєво різні значення ефективної частоти тунелювання протона.

При $\mu = \text{const}$ в точці фазового переходу співіснують фази з електронними концентраціями n_1 і n_2 , між якими відбувається стрибок при фазовому переході. При $n = \text{const}$ для $n_1 < n < n_2$ наявне розшарування системи на згадані вище фази. Нестабільність щодо фазового розшарування підтверджується поведінкою хемічного потенціалу як функції n (наявність ділянок з $\frac{\partial \mu}{\partial n} < 0$). Для $\Omega = 0.12$ eV маємо $n_1 = 0.412$, $n_2 = 0.941$, для $\Omega = 0.1$ eV $n_1 = 0.572$, $n_2 = 1.184$.

Залежності країв електронної зони й ефективної частоти тунелювання протона Ω^{eff} від середньої кількості електронів на вузлі n показано відповідно на рисунках 4 і 5.

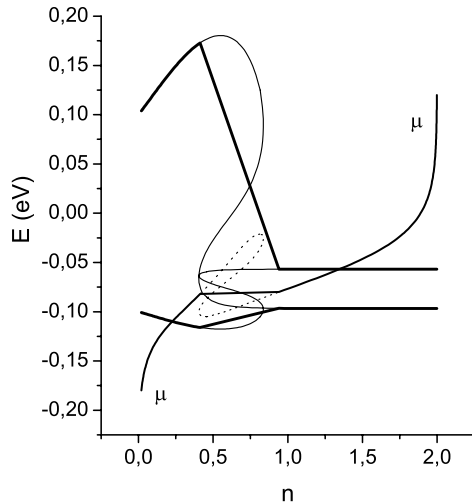


Рис. 4. Залежність країв електронної зони від середньої кількості електронів n ; наведено також значення хемічного потенціалу μ ; $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.12$ eV, $T = 300$ K.

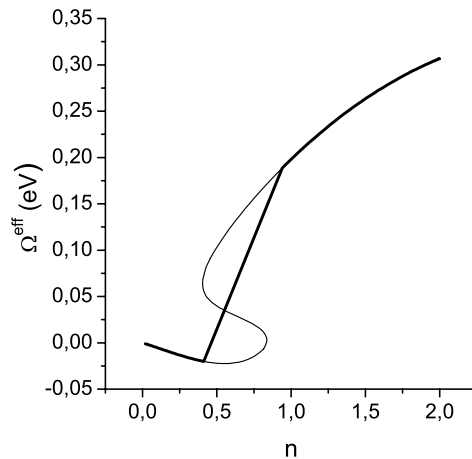


Рис. 5. Залежність ефективної частоти тунелювання протона Ω^{eff} від середньої кількості електронів n ; $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.12$ eV, $T = 300$ K.

При малих значеннях Ω ділянка $[n_1, n_2]$ звужується і при певному значенні Ω_0 зникає. Зокрема для $\Omega = 0.01$ eV (при $T = 300$ K) залежність $n = n(\mu)$ є плавною і можливості фазових переходів немає. Результати розрахунків характеристик системи для такого випадку показані на рисунках 6 і 7.

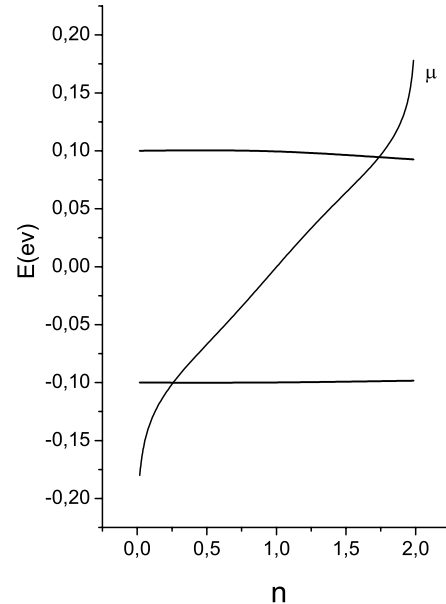


Рис. 6. Залежність країв електронної зони від середньої кількості електронів n ; наведено також значення хемічного потенціалу μ ; $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.01$ eV, $T = 300$ K.

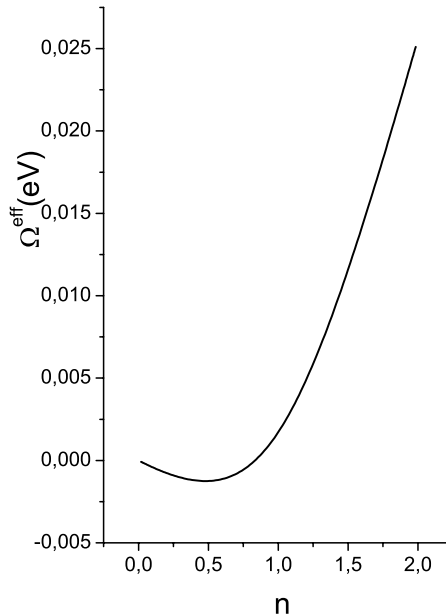


Рис. 7. Залежність ефективної частоти тунелювання протона Ω^{eff} від середньої кількості електронів n ; $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.01$ eV, $T = 300$ K.

Слід зауважити, що отримана картина фазових переходів і розшарувань на різні фази стосується сис-

тем із водневими зв'язками з частково заповненою електронною зоною. Можливо, до таких об'єктів належать галогенозв'язані металеві комплекси [1], елементом структури яких є сітка водневих зв'язків, що з'єднує ланцюжки галогенозв'язаних атомів металу. Проте залишається відкритим питання, чи електронна провідність можлива лише в ланцюжках, чи вона є і в сітці водневих зв'язків. Стосовно кристалів з водневими зв'язками типу KDP, то це добрі діелектрики, і на отриманих графіках вони попадають або в крайнє ліве ($n = 0$), або в крайнє праве ($n = 2$) положення, і переходів, отриманих для проміжних n , в цих системах спостерігати не будемо.

IV. ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ ЛАНЦЮЖКОВОЇ СТРУКТУРИ З ВОДНЕВИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ

Розраховували динамічну провідність ланцюжка з водневими зв'язками згідно з формулою Кубо [12]

$$\sigma(\omega, T) = \frac{1}{Na} \int_0^\infty dt \exp[i(\omega + i\varepsilon)t] \times \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{j}(t - i\hbar\lambda) \hat{j}(0) \rangle, \quad (4.14)$$

де \hat{j} — оператор густини струму,

$$\hat{j}(0) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{d}], \quad (4.15)$$

\hat{d} — оператор дипольного моменту системи,

$$\hat{d} = (-e) \sum_l \sum_i R_i(l) n_i(l) + z_H^{\text{eff}} \delta \sum_l \sum_i S_i^z(l),$$

що включає електронну й псевдоспінову (йонну) складові. Тут δ — відстань між рівноважними положеннями протона на зв'язку, $\delta \approx 0.40$ Å. Згідно з квантово-хімічними розрахунками, ефективний заряд водню z_H^{eff} дорівнює $z_H^{\text{eff}} \approx 0.25e$

$$j(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (4.16)$$

У наближенні молекулярного поля оператор густини струму розділяється на суму електронного і протонного (псевдоспінового) доданків

$$\hat{j} = \hat{j}_e + \hat{j}_{sp}. \quad (4.17)$$

Для цих складових на основі рівняння (4.15) отримано такі вирази:

$$\hat{j}_e(0) = -\frac{2e}{\hbar} \sum_q \frac{\partial \varepsilon(q)}{\partial q_z} a_q^+ a_q \quad (4.18)$$

$$= \frac{4e}{\hbar} \sum_q (\Omega\alpha + t) \sin(aq_z) a_q^+ a_q,$$

$$\hat{j}_{sp}(0) = \frac{i}{2} \frac{\delta}{\hbar} I z_H^{\text{eff}} \sum_l \sum_i (S_i^-(l) - S_i^+(l)). \quad (4.19)$$

Розрахунок кореляційних функцій у виразі (4.14) з використанням теореми Віка дає такі вирази для реальної частини провідності:

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_{sp}, \quad (4.20)$$

де електронний доданок має такий вигляд:

$$\sigma_e(\omega) = \frac{16\pi e^2}{Na\hbar^2} (\Omega\alpha + t)^2 \beta \sum_q \frac{e^{\beta(\varepsilon(q) - \mu)} \sin^2(q_z a)}{(1 + e^{\beta(\varepsilon(q) - \mu)})^2} \delta(\omega). \quad (4.21)$$

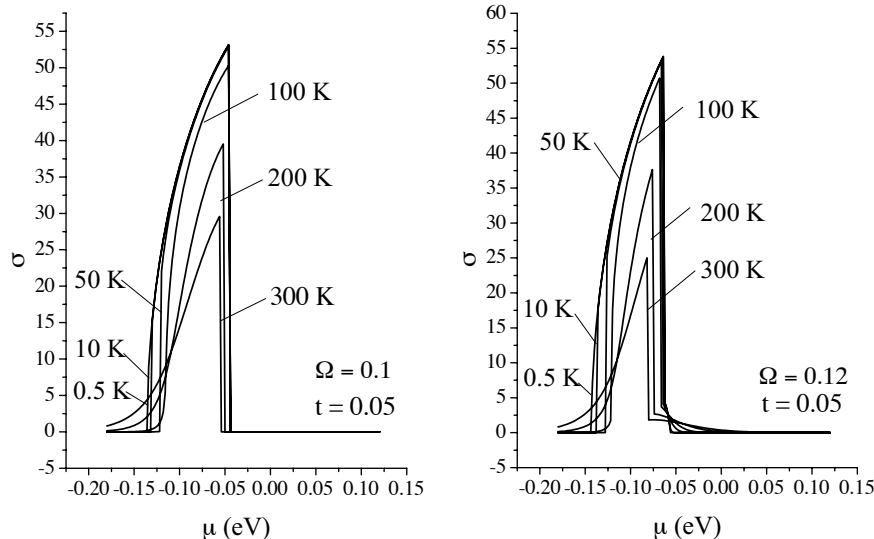


Рис. 8. Залежність електронної складової провідності від хемічного потенціалу.

Отже, у наближенні молекулярного поля отримуємо лише зонну, статичну електронну провідність. Для опису частотної залежності динамічної провідності необхідно вийти за межі наближення середнього поля, урахувати явні механізми розсіяння.

Для протонної провідності маємо:

$$\sigma_{sp}(\omega) = \frac{\pi}{a} \left(\frac{\delta}{2\hbar} z_H^{\text{eff}} \right)^2 |I| \frac{1 - e^{-\beta|I|}}{1 + e^{-\beta|I|}} \quad (4.22)$$

$$\times (\delta(\omega - |I|/\hbar) + \delta(\omega + |I|/\hbar)).$$

Отримано один пік (максимум) у частотній залежності $\sigma_{sp}(\omega)$ на перенормованій частоті тунелювання протона Ω^{eff} .

На рис. 8, 9 і 10 зображено залежність електронної складової провідності σ_e від хемічного потенціалу й від електронної заселеності відповідно (σ_e подано у відносних одиницях).

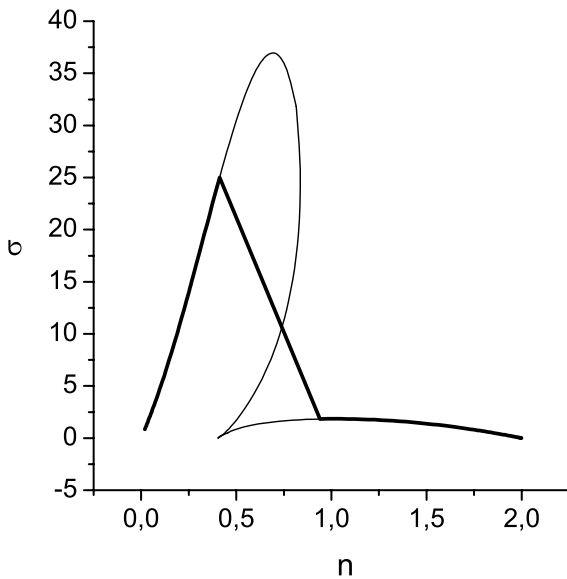


Рис. 9. Залежність електронної складової провідності від середньої кількості електронів n ; $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.12$ eV, $T = 300$ K.

Як видно з рисунків 4, 5 і 9, для $n = \text{const}$ в проміжку $n_1 < n < n_2$ ($\Omega = 0.12$ eV) відбувається розшарування системи на фази з різною шириною електронної зони різними n і Ω^{eff} , а також різними електронними провідностями.

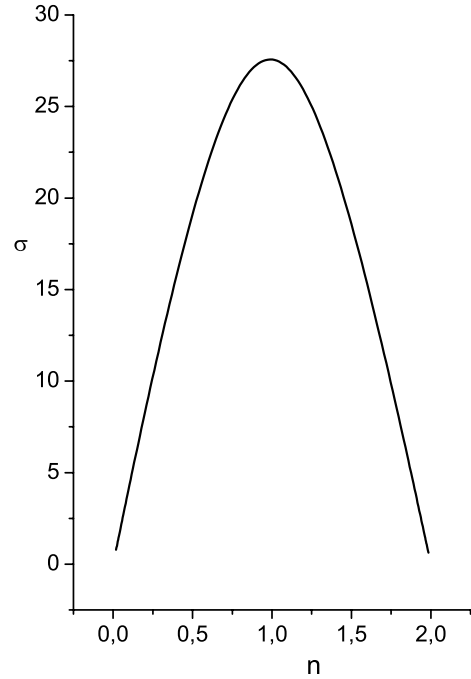


Рис. 10. Залежність електронної складової провідності від середньої кількості електронів n ; $t = 0.05$ eV, $\Omega = 0.01$ eV, $T = 300$ K.

V. ВИСНОВКИ

Запропоновано псевдоспін-електронну модель для опису скорельованого протон-електронного переносу заряду у квазіодновимірних системах із водневими зв'язками.

Установлено, що система з водневими зв'язками може перебувати в трьох режимах з різною шириною електронної зони й суттєво різними значеннями ефективної частоти тунелювання протона Ω^{eff} .

Отримано частотну залежність дійсної частини провідності. У наближенні молекулярного поля її електронна складова є лише зонною, статичною, тоді як протонна складова має пік на частоті протонного тунелювання Ω^{eff} .

При фіксованому значенні хемічного потенціалу $\mu = \text{const}$ установлено можливість, залежно від значення μ , переходів першого роду між однорідними фазами з різними електронними концентраціями n . При заданому середньому значенні n відбувається розшарування системи на фази з різною шириною електронної зони, різними n і Ω^{eff} , а також різними електронними провідностями.

Робота виконана за часткової підтримки фонду ДФФД Міністерства науки і освіти України, проєкт № 02.07/266.

- [1] K. Okaniwa, H. Okamoto, T. Mitani, K. Toriumi, M. Yamashita, J. Phys. Soc. Jpn **60**, 997 (1991).
- [2] T. Mitani, H. Kitagawa, H. Okamoto, K. Nakasuji, J. Toyoda, M. Yamashita, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 73 (1992).
- [3] N. Matsushita, K. Toriumi, N. Kojima, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 201 (1992).
- [4] Y. Morimoto, Y. Tokura, T. Oohashi, T. Kojima, A. Itsubo, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 223 (1992).
- [5] K. Okaniwa, H. Okamoto, T. Mitani, T. Inabe, J. Toyoda, Y. Morita, K. Nakasuji, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 241 (1992).
- [6] S. Takeda, H. Chihara, T. Inabe, T. Mitani, Y. Maruyama, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 235 (1992).
- [7] K. Nakasuji, K. Sugiura, J. Toyoda, Y. Morita, H. Okamoto, K. Okaniwa, T. Mitani, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 213 (1992).
- [8] T. Inabe, K. Okaniwa, H. Okamoto, T. Mitani, Y. Maruyama, S. Takeda, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **216**, 229 (1992).
- [9] I. V. Stasyuk, Yu. V. Sizonenko, R. Ya. Stetsiv, J. Phys. Stud. **2**, 463 (1998).
- [10] I. V. Stasyuk, R. Ya. Stetsiv, Yu. V. Sizonenko, Condens. Matter Phys. (Lviv) **5**, 685 (2002).
- [11] K. A. Muller, Z. Phys. B **80**, 193 (1990).
- [12] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn **12**, 570 (1957).

DYNAMICS OF CHARGE TRANSFER IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL HYDROGEN-BONDED STRUCTURES

I. V. Stasyuk¹, R. Ya. Stetsiv¹, R. Ya. Yurechko²

¹*Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
1, Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine*

²*National University "Lvivska Politekhnik",
12, Bandera St., Lviv, UA-79013, Ukraine*

The model for the description of the charge transfer in quasi-one-dimensional hydrogen-bonded structures is proposed. The model includes the proton–electron interaction that indicates the charge changes of the ions forming the hydrogen bond, which are caused by proton shifts on the bond, and the cooperative proton–electron transfer. The band electron spectrum is calculated in the mean field approximation (MFA). The mean number of electrons on site depending on the value of the chemical potential μ is obtained. The proton tunnelling frequency, renormalized by the interaction of the proton with the mean field of the electron subsystem is calculated. It is established that the hydrogen-bonded system can be found in three regimes with different width of electron band and essentially different values of the effective proton tunnelling frequency Ω^{eff} . The frequency dependence of the real part of conductivity is obtained. The possibility of the phase transitions like the transformation between uniform phases with different electron concentration n is established depending on the value of the chemical potential μ . The separation of the system into the phases with different width of the electron band, different n and Ω^{eff} as well as different electron conductivity at the given average electron concentration is obtained.