

Р.Я. СТЕЦІВ, І.В. СТАСЮК, О. ВОРОБІЙОВ

Інститут фізики конденсованих систем НАН України  
(Вул. Свенціцького, 1, Львів 79011; e-mail: stetsiv@ictp.lviv.ua)**ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР І ДІАГРАМИ  
СТАНУ ОДНОВИМІРНОГО ІОННОГО ПРОВІДНИКА**

УДК 538.931, 538.911

*Методом точної діагоналізації розраховано енергетичний спектр скінченних одновимірних іонних провідників з періодичними граничними умовами. Іонний провідник описується ґратковою моделлю, в якій частинки підлягають “змішаній” статистичі Паулі. У моделі враховується іонне перенесення, взаємодія між сусідніми іонами, а також модулююче поле. Розраховано одночастинкові спектральні густини і отримано діаграми стану для різних температур, різних величин взаємодії і модулюючого поля. Досліджено умови переходу від зарядовпорядкованої фази (CDW) до фази з бозе-конденсатом типу суперфлюїду (SF), яка може бути аналогом суперіонної фази та до фази типу моттівського діелектрика (MI).*

*Ключові слова:* іонний провідник, спектральна густина, модель жорстких бозонів, фазові діаграми.

**1. Вступ**

Іонні провідники являють собою широкий клас фізичних і біологічних об'єктів. Великий інтерес до них зумовлений можливостями їх практичного застосування. Одним із найбільш цікавих підкласів таких об'єктів є суперіонні провідники, що містять високотемпературну фазу з високою провідністю. У низькотемпературній фазі іони заповнюють фіксовані позиції. Після переходу в суперіонну фазу вони розподіляються хаотично між кількома позиціями в елементарній комірниці з тою чи іншою імовірністю. Типовим прикладом суперіонного кристала є  $\alpha$ -AgJ, де суперіонна підсистема формується іонами срібла [1]. У суперпротонних воднево-зв'язаних провідниках носіями заряду є протони. Вони перерозподіляються в сітці віртуальних водневих зв'язків [2].

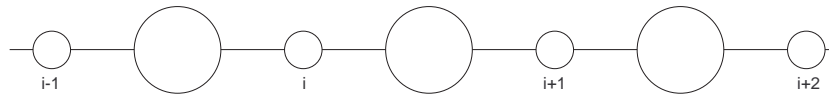
Теоретичний опис систем з іонною провідністю в основному ґрунтується на ґраткових моделях. Частина з них трактує іони як фермі-частинки і зосереджує увагу на таких аспектах, як роль далекосяжних взаємодій [3–5] чи вплив взаємодії з фононами [6, 7]. У деяких недавніх роботах приділено увагу короткосяжним взаємодіям між частинками [8–10]. Необхідно однак зазначити, що іони та протони більш коректно описувати за допомогою “змішаної” статистики Паулі [11], у якій

частинки, з одного боку, мають бозонну природу, а з іншого – підлягають правилам заборони Фермі. В порівнянні з ферміонним підходом такий опис породжує додаткові ускладнення, викликані особливими правилами комутації операторів Паулі. З іншого боку, такий підхід може бути ефективнішим. Наприклад, було показано, що ґраткова модель Паулі дає змогу описати появу стану типу суперфлюїду (фаза з бозе-конденсатом) навіть за відсутності прямої взаємодії між частинками [12–14]. Часто для розв'язання таких задач гамільтоніан, записаний на операторах Паулі, за допомогою процедури ферміонізації [15] (див. також [16–18]) зводять до гамільтоніана, записаного на операторах Фермі (лише для одновимірних систем).

Ґраткова модель частинок Паулі є подібною до моделі Бозе–Хаббарда в наближенні “жорстких” бозонів (при обмеженні на числа заповнення  $n_i = 0, 1$ ). Остання є у полі уваги дослідників у зв'язку з широкими можливостями застосування цієї моделі, починаючи з теорії квантових ефектів у рідкому гелії [19, 20]. Модель використовувалась при описі надпровідності локально зв'язаних електронних пар [14], фізичних властивостей джозефсонівських контактів [21], іонної провідності в кристалах [11, 12]. Модель Бозе–Хаббарда також описує перехід від моттівського діелектрика до стану типу суперфлюїду [22–28]. Впродовж останніх років такий підхід набув нової популярності у зв'язку з дослідженням поведінки ультраталодних

© Р.Я. СТЕЦІВ, І.В. СТАСЮК, О. ВОРОБІЙОВ, 2014

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2014. Т. 59, № 5



**Рис. 1.** Модель одновимірного іонного провідника. Великі кола позначають важкі іонні групи. Малі кола – легкі рухомі іони

атомів в оптичних ґратках. При довільних заповненнях локальних позицій частинок тут звичайно використовують модель Бозе–Хаббарда (див. огляд [29]). Її граничним випадком при великому одновузловому відштовхуванні ( $U \rightarrow \infty$ ), коли потенціальні ями є достатньо глибокими, є саме модель жорстких бозонів.

У цій роботі ми будемо діаграми стану іонного провідника, в якому частинки підлягають статистиці Паулі. Наша ґраткова модель містить іонне перенесення, взаємодію між сусідніми іонами, а також модулююче поле. Методом точної діагоналізації ми розраховуємо одночастинкові спектральні густини скінченних одновимірних систем з періодичними граничними умовами, і отримуємо діаграми станів на основі аналізу характеру цих спектрів. Досліджуються умови переходу від фази моттівського діелектрика (MI) до фази типу суперфлюїду (SF) (яка могла б розглядатися як аналог суперіонної фази) з наступним переходом у зарядовпорядкований стан (CDW).

## 2. Модель іонного провідника

Іонний провідник розглядаємо як ланцюжок важких нерухомих іонних груп (великі кола на рис. 1) і легких іонів, що переміщуються вздовж такого ланцюжка, заселяючи позиції, позначені малими колами на рис. 1. У спрощеному вигляді таким способом враховується гроттхуссівський механізм іонного транспорту у реальних системах. Підсистема легких іонів описується таким гамільтоніаном:

$$\hat{H} = t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) + V \sum_i n_i n_{i+1} - \mu \sum_i n_i + A \sum_i (-1)^i n_i. \quad (1)$$

Модель враховує переміщення іонів між сусідніми позиціями (параметр перенесення  $t$ ), взаємодію між іонами, що заселяють сусідні позиції (параметр взаємодії  $V$ ), а також модулююче поле (па-

раметр  $A$ ). Поле  $A$  робить систему двопідґратковою і в певній мірі імітує далекоюсяжну взаємодію між частинками, яка сприяє модуляції у просторовому розподілі легких іонів у так званій впорядкованій фазі (існування такої фази при низьких температурах є характерною рисою суперіонних провідників). Якщо гамільтоніан (1) розглядати в рамках статистики Фермі, то така модель відома як безспінова ферміонна модель. Ця модель широко використовується в теорії сильно корельованих електронних систем [30], а також для опису іонних провідників [31]. Складніший двопідґратковий варіант цієї моделі був застосований для опису протонних провідників [32]. У даній роботі застосовано підхід, який ґрунтується на “змішаній” статистиці Паулі. У такому випадку модель (1) еквівалентна розширеній моделі “жорстких” бозонів чи бозонній моделі Хаббарда з відштовхувальною взаємодією між найближчими сусідами і сильним одновузловим відштовхуванням ( $U \rightarrow \infty$ ) [33]. Остання часто застосовується для дослідження проблем бозе-конденсації.

## 3. Метод точної діагоналізації

Для розрахунку енергетичного спектра і спектральних густин одновимірного іонного провідника Паулі, що описується моделлю (1), застосовуємо метод точної діагоналізації. Розглянемо скінченний ланцюжок з періодичними граничними умовами. Для ланцюжка з  $N$  позиціями у основній області вводимо багаточастинкові стани:

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle. \quad (2)$$

Матриця гамільтоніана на базі цих станів є матрицею порядку  $2^N \times 2^N$  і діагоналізується числовим способом. Це відповідає перетворенню:

$$U^{-1} H U = \tilde{H} = \sum_p \lambda_p \tilde{X}^{pp}, \quad (3)$$

де  $\lambda_p$  – власні значення гамільтоніана,  $\tilde{X}^{pp}$  – оператори Хаббарда. Таке ж перетворення застосовуємо

до операторів народження і знищення частинок у позиції  $i$  на ланцюжку:

$$U^{-1}c_iU = \sum_{pq} A_{pq}^i \tilde{X}^{pq}, \quad U^{-1}c_i^+U = \sum_{rs} A_{rs}^{i*} \tilde{X}^{rs}, \quad (4)$$

з яких ми конструюємо двочасові температурні функції Гріна  $G_{i,i} = \langle\langle c_i | c_i^+ \rangle\rangle$ , що містять інформацію про одночастинковий енергетичний спектр системи. Для операторів Паулі народження і знищення ми вводимо функції Гріна двох типів: комутаторну функцію Гріна

$$\langle\langle c_i(t) | c_i^+(t') \rangle\rangle^{(c)} = -i\Theta(t-t')\langle\{c_i(t), c_i^+(t')\}\rangle, \quad (5)$$

та антикомутаторну функцію Гріна

$$\langle\langle c_i(t) | c_i^+(t') \rangle\rangle^{(a)} = -i\Theta(t-t')\langle\{c_i(t), c_i^+(t')\}\rangle. \quad (6)$$

Уявні частини цих функцій Гріна визначають одночастинкові спектральні густини:

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= -\frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^N \text{Im} \langle\langle c_j | c_j^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} = \\ &= -\frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^N \text{Im} \left[ \frac{1}{Z} \sum_{pq} A_{pq}^j A_{pq}^{j*} \frac{e^{-\beta\lambda_p} - \eta e^{-\beta\lambda_q}}{\omega - (\lambda_q - \lambda_p) + i\varepsilon} \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

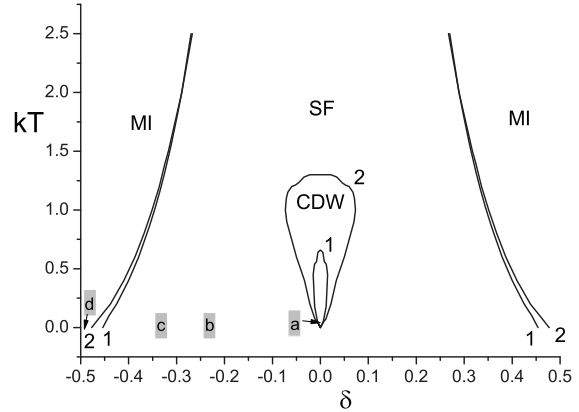
Тут  $Z = \sum_p e^{-\beta\lambda_p}$ .

Спектральні густини в (7), розраховані для комутаторної  $\eta = 1$  (5) і антикомутаторної  $\eta = -1$  (6) функцій Гріна, відповідно, мають дискретну структуру та містять ряд  $\delta$ -піків у зв'язку з скінченим розміром ланцюжка. Якщо збільшувати розмір ланцюжка ( $N$ ), дельта-піки будуть розташовуватися густіше, формуючи при  $N \rightarrow \infty$  зонну структуру. Під час розрахунків ми обмежилися випадком  $N = 10$ . Введено також малий параметр  $\Delta$  для розширення  $\delta$ -піків згідно з розподілом Лоренца:

$$\delta(\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\omega^2 + \Delta^2}. \quad (8)$$

#### 4. Іонні спектральні густини і діаграми станів

Експериментальні дослідження деяких специфічних кристалів [34, 35], а також квантово-хімічні розрахунки [36], дають можливість оцінити величину кореляційної константи  $V = 3000, \dots$ ,

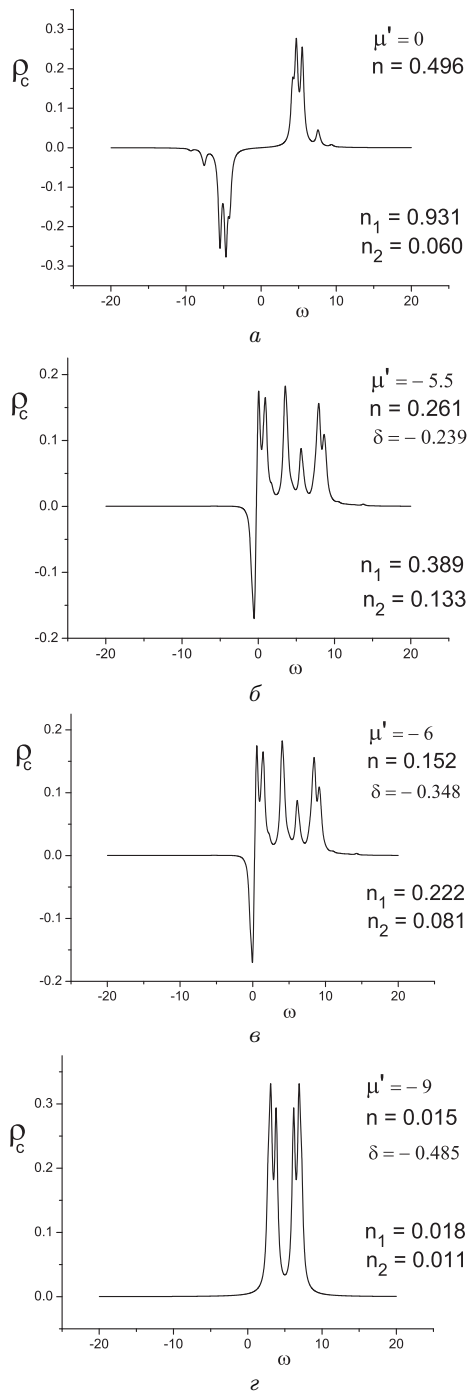


**Рис. 2.** Діаграма станів одновимірного іонного провідника при різних значеннях величини модулюючого поля  $A$ , відповідно: 1 –  $A = 0$ ; 2 –  $A = 1$ . В обидвох випадках  $V = 4$ ,  $t = 1$ ,  $\delta = n - 1/2$

$10000 \text{ см}^{-1}$ ; а значення параметра перенесення може змінюватись, залежно від об'єкта, в широких межах  $t = 40, \dots, 2500 \text{ см}^{-1}$ . Це показує, що в реальних системах є сильна кореляція між іонами, яка має вагомий вплив на структуру та енергетичний спектр системи.

Ми розрахували одночастинкові спектральні густини (7) в широкому діапазоні значень короткосяжної взаємодії між іонами для різних температур і значень хімічного потенціалу. Зокрема, в нашій роботі  $V/t = 0, 1, \dots, 6$ . Всі енергетичні параметри, включаючи  $kT$ , наведені у відношенні до параметра  $t$ , який трактується як енергетична одиниця. Аналізуючи зміну форми і характеру розрахованих частотно-залежних спектральних густин при зміні параметрів моделі ми побудували відповідну діаграму станів (рис. 2). Значення середньої заселеності стану  $n$  при даному  $\mu$  розраховувалося згідно з спектральною теоремою  $n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_a(\omega) d\omega}{e^{\beta\omega} + 1}$ , де  $\rho_a$  – антикомутаторна спектральна густина (густина станів).

При визначенні областей існування тих чи інших станів (фаз) системи ми використали той факт, що характерною рисою комутаторної спектральної густини у фазі суперфлюїду (SF) є наявність від'ємної гілки (при  $\omega < 0$ ), яка є неперервним продовженням додатної гілки в точці  $\omega = 0$  (див., наприклад, [37]). На відміну від цього, в зарядовпорядкованій фазі (CDW) ця гілка відділена від додатної гілки щілиною. Тут спостерігається роз-



**Рис. 3.** Комутаторна одночастинкова спектральна густина в різних станах одновимірного іонного провідника при  $T = 0$ ,  $V = 4$ ,  $A = 1$ ,  $t = 1$ ,  $\Delta = 0,25$ . Положення хімічного потенціалу збігається з позицією  $\omega = 0$ . Рисунок (а, б, в, г) відповідають позиціям на діаграмі на рис. 2

щеплення спектра на дві підзони та виникнення модульованого стану з подвоєнням періоду ґратки.

У стані так званого моттівського діелектрика (МІ) комутаторна спектральна густина має гілку лише одного знака. Ця гілка знаходиться на певній відстані від точки  $\omega = 0$ , якій на шкалі енергій відповідає розташування хімічного потенціалу частинок. Фаза CDW при  $T = 0$  характерна для станів з половинним заповненням. При цьому рівень хімічного потенціалу розташований у щілині. При пониженні його рівня і виході зі щілини спостерігається перехід до SF фази, коли при  $\omega = 0$  додатна гілка неперервно переходить у від'ємну. За подальшого пониження рівня хімічного потенціалу від'ємна гілка зникає і відбувається перехід з фази суперфлюїду до фази типу моттівського діелектрика (МІ), коли хімічний потенціал знаходиться нижче нижньої підзони. В такому стані іони потребують певної енергії активації для індукування їхнього перенесення. Комутаторна спектральна густина при цьому має лише додатну гілку. Стан типу моттівського діелектрика спостерігатиметься і у випадку, коли хімічний потенціал знаходиться над верхньою підзоною, а комутаторна функція Гріна має лише від'ємну гілку.

Для одновимірної структури, яка розглядається, описані вище CDW, SF і МІ фази і фазові переходи між ними існують лише при нульовій температурі. Для  $T \neq 0$  ми можемо виділяти області існування станів типу CDW, SF, МІ (див. рис. 2), як таких, в яких наближено зберігається вигляд спектральних функцій, характерний для фаз при  $T = 0$ . У цьому випадку перехід між областями не є справжнім фазовим переходом і має кросоверний характер.

На рис. 3 наведено комутаторні спектральні густини при  $T = 0$ , які відповідають точкам на діаграмі (рис. 2) з аналогічними позначеннями (а, б, в, г). Положенню хімічного потенціалу відповідає частота  $\omega = 0$ . Для зручності введено величину  $\mu' = \mu - V$ .

Рис. 3, а відноситься до CDW фази, б і в – до SF фази, коли при  $\omega = 0$  від'ємна гілка комутаторної спектральної густини переходить в додатну за відсутності щілини між ними. Рис. 3, г відповідає фазі МІ; тут хімічний потенціал знаходиться нижче дна нижньої підзони; комутаторна спектральна густина при цьому має лише додатну гілку. Як видно з діаграми станів (рис. 2) при  $T = 0$  CDW-фаза є лише в станах з половинним заповненням

( $n = 1/2$ ) при цьому  $-4,1 \leq \mu' \leq 4,1$  для випадку  $V = 4$ ,  $A = 1$  (оскільки для наведеного випадку ( $V = 4$ ,  $A = 1$ ) перехід CDW–SF відбувається при  $\mu' = -4,1$  і  $\mu' = +4,1$ ).

При зростанні температури CDW-фаза розмивається і існує не лише при  $n = 1/2$ ; маємо ефект температурного переходу типу діелектрик–провідник (так званого переходу Мотта). Можливість існування такого ефекту в об'єктах, що досліджуються в даній роботі, було показано в роботі [9]. А для подібної системи, що описується статистикою Фермі, існування такого ефекту було отримано за допомогою числових розрахунків [38]. Можна проілюструвати згаданий ефект за допомогою температурних змін антикомутаторної одно-частинкової спектральної густини (густини станів) (див. рис. 4), розрахованої на основі формули (7). Щілина в спектрі ( $\rho_a = 0$ ), що спостерігається при низьких температурах при половинному заповненні, пов'язана з появою зарядовпорядкованого стану. Це зумовлено відштовхувальною короткодійною взаємодією між частинками, яка і формує такий тип основного стану системи. При  $T \neq 0$  щілина закривається. На діаграмі станів (рис. 2) зображено лінії, що відповідають такому кросоверному переходу і розмежують області, у яких комутаторна спектральна густина  $\rho_c$  за своїм виглядом є ближчою до функції  $\rho_c$  для CDW- чи для SF-фази. Подібне стосується і переходів між областями SF і MI.

Важливою характеристикою справжньої SF-фази є розбіжність фур'є-образу дійсної частини комутаторної функції Гріна при нульовій частоті ( $\omega = 0$ ) і нульовому хвильовому векторі ( $k = 0$ ),  $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0) \rightarrow \infty$ . У випадку моделі скінченного ланцюжка, що розглядається,

$$G_{k=0}(\omega = 0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{Z} \sum_{pq} A_{pq}^i A_{pq}^{j*} \frac{e^{-\beta\lambda_p} - e^{-\beta\lambda_q}}{\lambda_p - \lambda_q + i\varepsilon} \right]. \quad (9)$$

Числовий розрахунок показує, що при  $T \neq 0$  в SF-області функція  $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$  має скінченні значення (див. рис. 5). Це підтверджує, що тут SF-фаза є “несправжньою” (її можемо називати фазою типу суперфлюїду, “SF”). Лише в границі  $T \rightarrow 0$   $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ , як функція температури, у певних областях значень хімічного потенціалу

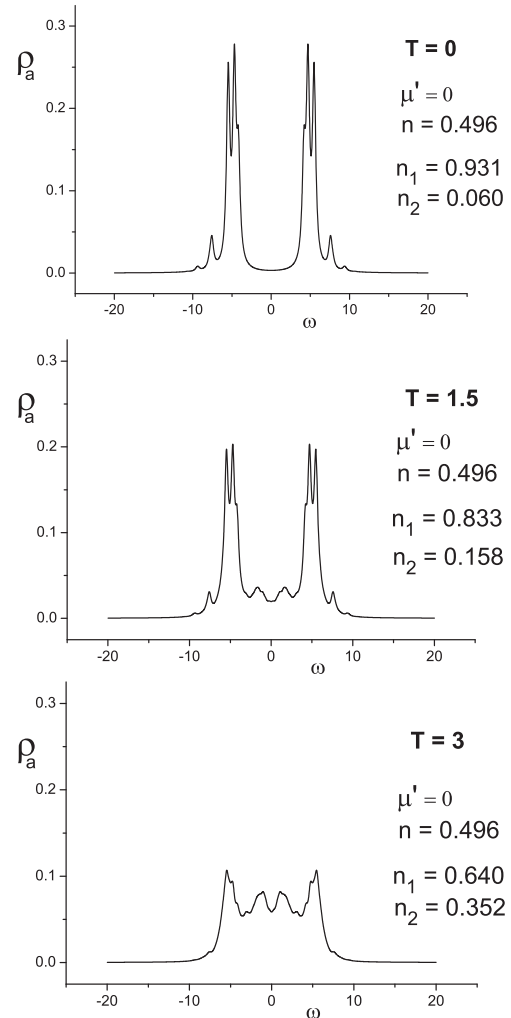
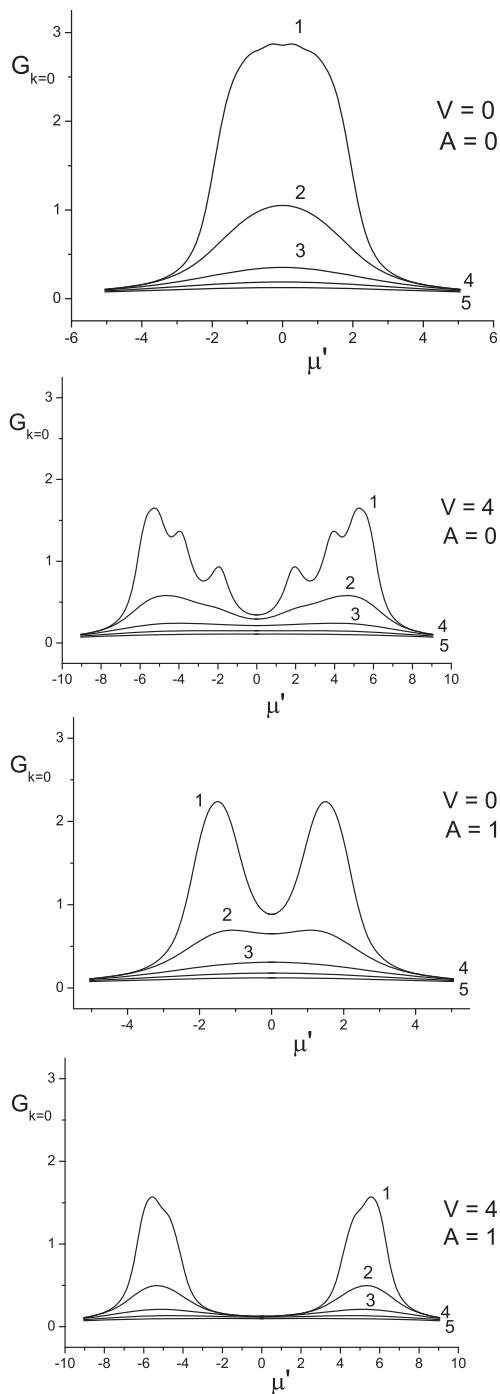


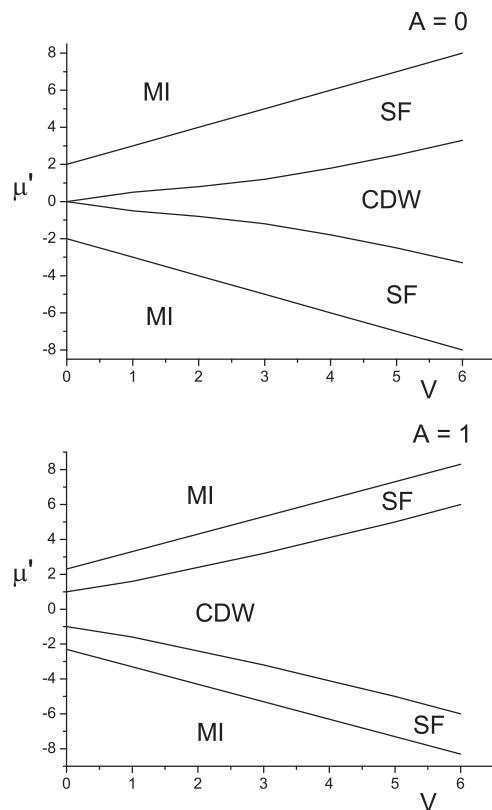
Рис. 4. Закриття щілини в спектрі одновимірного іонного провідника з ростом температури. Випадок половинного заповнення,  $n = 1/2$ , ( $\mu' = 0$ ),  $V = 4$ ,  $A = 1$ ,  $t = 1$ . Положення хімічного потенціалу збігається з позицією  $\omega = 0$

розбігається, що свідчить про нестійкість стосовно появи бозе-конденсату. На відміну від цього, у випадку вищих розмірностей ( $d = 2$  чи  $d = 3$ ) SF-фаза існує і при  $T \neq 0$ .

Нами проведено розрахунок  $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$  для різних значень взаємодії  $V$  між іонами і різних значень модулюючого поля  $A$ . Для всіх випадків отримано значне зростання (максимум) функції  $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$  в області “SF”-фази, однак у випадку  $T \neq 0$  особливість (розбіжність) не спостерігається, а при підвищенні температури максимум розмивається (див. рис. 5).



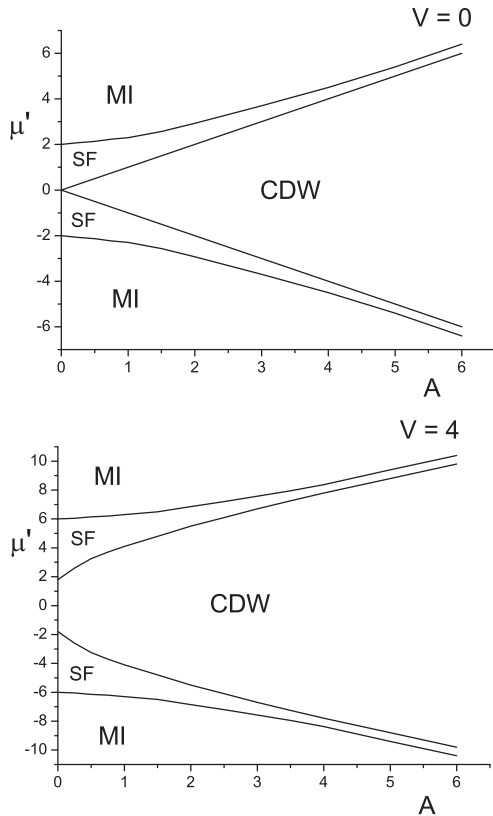
**Рис. 5.** Фур'є-образ дійсної частини комутаторної функції Гріна при нульовій частоті ( $\omega = 0$ ) і нульовому хвильовому векторі ( $k = 0$ ),  $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ , для різних значень величини взаємодії між частинками і різних значень величини модулюючого поля: 1 -  $T = 0,2$ ; 2 -  $T = 0,5$ ; 3 -  $T = 1$ ; 4 -  $T = 1,5$ ; 5 -  $T = 2$ ;  $\Delta = 1 \cdot 10^{-6}$



**Рис. 6.** Діаграми стану одновимірного іонного провідника в координатах  $(\mu', V)$  за відсутності і при наявності модулюючого поля  $A$  ( $T = 0$ )

Включення модулюючого поля  $A$  робить сусідні положення іонів нерівноправними і ґратка розділяється на дві підґратки з різною іонною заселеністю. Модулююче поле розширює область CDW-фази, тоді як область SF-фази при цьому зменшується. В роботі [39] досліджувався випадок  $T > 0$ . У даній роботі розрахунки проведені також і для  $T = 0$ . Нами отримано діаграми, що визначають стан системи при  $T = 0$  залежно від величини короткосяжної взаємодії між іонами  $V$ , як при відсутності, так і за наявності модулюючого поля  $A$  (рис. 6). Показано, що лінія розмежування SF і MI-фаз є прямою (значення хімічного потенціалу, за якого відбувається перехід, пропорційне до  $V$ ).

При зростанні як константи взаємодії  $V$ , так і параметра  $A$ , збільшується щілина в спектрі CDW фази. Розширення щілини в спектрі при зростанні  $V$  було отримано і в попередніх дослідженнях,



**Рис. 7.** Діаграми стану одновимірного іонного провідника в координатах  $(\mu', A)$  за відсутності і при наявності взаємодії між іонами  $V$  ( $T = 0$ )

однак це було зроблено у випадку статистики Фермі, тобто для моделі безспінових ферміонів [10, 38]. Ми побудували також діаграми стану залежно від величини модулюючого поля  $A$  (рис. 7). На відміну від попередніх діаграм, тут для випадку  $V = 0$  прямою є лінія, що розділяє CDW і SF-фазу, а лінії розмежування SF і MI фаз притаманна певна кривизна.

Ширина області існування CDW фази зростає як зі збільшенням величини короткосяжної взаємодії  $V$ , так і величини модулюючого поля  $A$ . При  $V = 0$  ширина цієї області є прямо пропорційною величині модулюючого поля  $A$  (лінії, що розділяють CDW і SF фази мають вигляд:  $\mu' = A$  і  $\mu' = -A$ ). У цьому відношенні діаграма на рис. 7 для  $V = 0$  збігається з точною діаграмою, отриманою аналітично в низці робіт для одновимірного випадку, див. [40]. В цих роботах розглядався лише випадок  $V = 0$  і діаграма представлена

в інших координатах. Точний аналітичний розв'язок у такому випадку можливий завдяки перетворенню Йордана–Вігнера, яким можна перейти від гамільтоніана “жорстких бозонів” до гамільтоніана незваємодіючих безспінових ферміонів. Подібні дослідження були проведені в роботі [12].

## 5. Висновки

Розрахунок одночастинкових спектральних густин  $\rho_c(\omega)$  для скінченного одновимірного іонного провідника, проведений в рамках моделі жорстких іонів, показав, що залежно від значень хімічного потенціалу частинок, константи короткосяжної взаємодії та температури, форма функції  $\rho_c(\omega)$  може змінюватись. При  $T = 0$  ця форма відповідає зарядовпорядкованій фазі (CDW), або фазі моттівського діелектрика (MI), або так званій фазі суперфлюїду (SF), у якій існує бозе-конденсат. Справжня фаза CDW реалізується лише при нульовій температурі і при половинному заповненні іонних позицій ( $n = 1/2$ ). Для  $T \neq 0$  границі між фазами розмиваються і переходи між ними мають кросоверний характер, тобто не є реальними фазовими переходами. Побудовано діаграму на площині  $(T, n)$ , де зазначено області існування станів (фаз) типу CDW, MI та SF.

Показано, що короткосяжна відштовхувальна взаємодія  $V$  ( $V > 0$ ) між частинками приводить до розщеплення у їх енергетичному спектрі і появи щілини у області половинного заповнення. Подібний ефект має місце і під впливом модулюючого поля  $A$ , яке можна пов'язувати з внутрішнім полем, що виникає внаслідок далекосяжної взаємодії (у випадку квазіодновимірної системи, складеної з ланцюжків, поле  $A$  може з'являтися в результаті взаємодії між ними). Цей ефект яскраво проявляється при  $T = 0$ , тоді як із підвищенням температури щілина поступово заповнюється і, зрештою, зникає. Наростання взаємодії  $V$ , так само як і поля  $A$ , збільшує ширину щілини. При  $T = 0$  це приводить до розширення області значень хімічного потенціалу, в якій існує фаза CDW.

Фур'є-образ дійсної частини комутаторної функції Гріна бозонів  $\text{Re} G_{k=0}(\omega = 0)$ , який визначає статичну сприйнятливості іонної підсистеми щодо дії поля, пов'язаного з народженням і знищенням частинок, і описує нестійкість стосовно появи бозе-конденсату, досягає максимальних значень в обла-



сті стану суперфлюїду (SF). При  $T = 0$  ці значення залишаються скінченними, що є наслідком обмеження, накладеного на розмір ланцюжка. З другого боку, при зростанні температури максимум функції  $\text{Re} G_{k=0}(\omega = 0)$  розмивається і тенденція до згаданої нестійкості зникає. Це є додатковим свідченням того, що в одновимірному випадку при  $T \neq 0$  в області "SF" бозе-конденсат не утворюється, хоча спектральна густина  $\rho_c(\omega)$  за своєю формою є близькою до функції  $\rho_c(\omega)$  для справжньої SF фази.

1. T. Tomoyozе and M. Seino, J. Phys. Soc. Of Japan **67**, 1667 (1998).
2. A.V. Belushkin, V.I.F. David, R.M. Ibberson, and L.A. Shuvalov, Acta Cryst. B **47**, 161 (1991).
3. W. Salejda, and N.A. Dzhavadov, Phys. Stat. Sol. (b) **158**, 119 (1990).
4. W. Salejda and N.A. Dzhavadov, Phys. Stat. Sol. (b) **158**, 475 (1990).
5. I.V. Stasyuk, N. Pavlenko, and B.Hilczеr, Phase Transitions **62**, 135 (1997).
6. N.I. Pavlenko, Phys. Rev. B **61**, 4988 (2000).
7. V.V. Krasnogolovets and P.M. Tomchuk, Phys. Stat. Sol. (b) **130**, 807 (1985).
8. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, and B. Hilczеr, Solid State Ionics **145**, 211 (2001).
9. I.V. Stasyuk and O. Vorobyov, Integrated Ferroelectrics **215** (2004).
10. I.V. Stasyuk and O. Vorobyov, Phase Transitions **80**, 63 (2007).
11. G. D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 780 (1976).
12. I.V. Stasyuk and I.R. Dulepa, Condens. Matter Phys. **10**, 259 (2007).
13. I.V. Stasyuk and I.R. Dulepa, J.Phys. Studies **13**, 2701 (2009).
14. R. Micnas, J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 170 (1990).
15. E. Lieb, T. Schults, and D. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
16. O. Derzhko and T. Krokhmalkii, Phys. Stat. Sol. B **208**, 221 (1998).
17. O. Derzhko, and T. Krokhmalkii, Phys. Stat. Sol. B **217**, 927 (2000).
18. O. Derzhko, J. Phys. Stud. **5**, No.149 (2001).
19. H. Matsuda and T. Tsuneto, Suppl. Progr. Theor. Phys. **46**, 411 (1970).
20. K. Lin and M. Fisher, J. Low. Temp. Phys. **79**, 251 (1990).
21. G.A. Czathy, J.D. Reppy, and M.H.W. Chan, Phys. Rev. Lett. **91**, 135301 (2003).
22. I.V. Stasyuk and T.S. Mysakovych, Condens. Matter Phys. **12**, 539 (2009).
23. G.G. Batrouni and R.T.Scalettar, Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992).
24. R. Micnas and S. Robaszkiewicz, Phys. Rev. B **45**, 9900 (1992).
25. G.G. Batrouni and R.T.Scalettar, Phys. Rev. Letters **84**, 1599 (2000).
26. K. Bernardet, G.G. Batrouni, J.-L. Meunier, G. Schmid, M. Troyer, and A. Dorneich, Phys. Rev. B **65**, 104519 (2002).
27. K. Bernardet, G.G. Batrouni, and M. Troyer, Phys. Rev. B **66**, 054520 (2002).
28. G. Schmid, S. Todo, M.Troyer, and A. Dorneich, Phys. Rev. Letters **88**, 167208 (2002).
29. I. Bloch, J. Daliberd, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
30. R. Vlaming, G.S. Uhrig, and D. Vollhardt, J. Phys. Cond. Matt. **4**, 7773 (1992).
31. B. Lorenz, Phys. Stat. Sol. (b) **101**, 297 (1980).
32. I.V. Stasyuk, O.L. Ivankiv, and N.I. Pavlenko, J. Phys. Studies **1**, 418 (1997).
33. P. Niyaz, R.T. Scalettar, C.Y. Fong, and G.G. Batrouni, Phys. Rev. B **50**, 363 (1994).
34. W. Munch, K.D. Kreuer, U. Traub and J. Maier, Solid State Ionics **77**, 10 (1995).
35. R. Hassan and E.S. Campbell, J. Chem. Phys. **97**, 4362 (1992).
36. M. Eckert and G. Zundel, J. Phys.Chem. **92**, 7016 (1988).
37. C. Menotti and N. Trivedi, Phys. Rev. B **77**, 235120 (2008).
38. I.V. Stasyuk and O. Vorobyov, Ferroelectrics **376**, 64 (2008).
39. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, and R.Ya. Stetsiv, Ferroelectrics **426**, 6 (2012).
40. I. Hen, M. Iskin, and M. Rigol, Phys. Rev. B **81**, 064503 (2010).

Одержано 08.10.13

*Р.Я. Стеців, І.В. Стасюк, О. Воробйов*

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР  
И ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ  
ОДНОМЕРНОГО ИОННОГО ПРОВОДНИКА

Резюме

Методом точной диагонализации рассчитан энергетический спектр конечного одномерного ионного проводника с периодическими граничными условиями. Ионный проводник описывается решеточной моделью, в которой частицы подлежат "смешанной" статистике Паули. В модели учитывается ионный перенос, взаимодействие между соседними ионами, а также модулирующее поле. Рассчитаны одночастичные спектральные плотности и получены диаграммы состояния для разных температур, разных величин взаимодействия и модулирующего поля. Исследованы условия перехода от зарядоупорядоченной фазы (CDW) к фазе с бозе-



конденсатом типа суперфлюида (SF), которая может быть аналогом суперионной фазы и к фазе типа моттовского диэлектрика (MI).

*R. Ya. Stetsiv, I. V. Stasyuk, O. Vorobyov*

ENERGY SPECTRUM AND STATE DIAGRAMS  
OF ONE-DIMENSIONAL IONIC CONDUCTOR

S u m m a r y

The energy spectrum for a finite one-dimensional ionic conductor with periodic boundary conditions has been calculated

using the exact diagonalization technique. The ionic conductor is described in the framework of the lattice model, with particles obeying the “mixed” Pauli statistics. The model involves the ion transfer, interaction between neighbor ions, and modulating field. One-particle spectral densities are calculated, and phase diagrams are plotted for various temperatures, magnitudes of interaction between particles, and modulating field strengths. Conditions for the transition from the charge-density-wave phase to the superfluid one with the Bose–Einstein condensate (it can be an analog of the superionic phase) and to Mott-insulator type phase are investigated.