

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-03-32U

І. В. Стасюк, І. Р. Дулепа

Дослідження густини станів для одновимірної ґраткової моделі
іонного переносу

УДК: 538.931

PACS: 66.30.Dn, 66.10.Ed.

Дослідження густини станів для одновимірної ґраткової моделі іонного переносу

І. В. Стасюк, І. Р. Дулепа

Анотація. Розглядається мікроскопічна одновимірна модель для опису динамічних властивостей іонної підсистеми в суперіонному провіднику. Процеси іонних перескоків описуються в термінах операторів Паулі. Обчислено часові кореляційні функції $\langle b_j(t)b_j^+(0) \rangle$, отримано і проаналізовано частотні залежності автокореляційних функцій $J_{b+b}(\omega)$ при високих температурах. Обчислено густину станів іонної підсистеми та досліджено залежність середнього числа частинок від енергії на вузлі.

Investigation of density of states for one-dimensional lattice model of ion transfer

I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa

Abstract. Microscopic one-dimensional model for the description of the dynamic properties of the ion subsystem in superionic conductor is considered. The processes of ionic hopping are described in terms of Pauli operators. Time correlation functions $\langle b_j(t)b_j^+(0) \rangle$ are calculated, the frequency dependences of autocorrelation functions $J_{b+b}(\omega)$ are obtained and analyzed at high temperatures. The density of states for ion subsystem is calculated and dependence of average number of particles on the site energy is investigated.

Вступ

Дослідження перескоків іонів в кристалічних тілах проводиться досить широко. Розроблені різні математичні моделі для такого дослідження. Одними із головних питань є густина станів та іонна провідність таких систем. Іонна провідність описується перескоковим процесом, де іон стрибає з вузла на вузол. Повинна враховуватися енергія активації, яку трактують як потенціальний бар'єр, який іон мусить подолати при зміні положення [1]. Енергія активації перескоку визначається конфігурацією оточуючих іонів.

Однією із моделей для вивчення іонних перескоків є модель ґраткового газу [1-5], яка враховує взаємодію між іонами і найближчими сусідами. Для обчислення кореляційних функцій в моделі ґраткового газу використовується теорія збурень для параметра перескоків J . В більшості робіт використовується перший порядок цієї теорії збурень, тобто при статистичному усередненні в модельному гамільтоніані нехтується членом, який враховує перескоки [2-4]. В [5] була розвинута теорія ґраткового газу, в якій береться другий порядок теорії збурень для J , однак, ця робота не включає взаємодії іонів з іонами ґратки на сусідніх вузлах. В моделі ґраткового газу були отримані точні розв'язки часових кореляційних функцій на операторах струму при знаходження іонної провідності [1] з використанням відомих точних результатів для моделі Ізінга. Це можливо у випадку, коли концентрація іонів близька до половинного заповнення.

Ми розглядаємо модель іонних перескоків на сусідні вузли в одновимірному випадку. Модель схожа до моделі ґраткового газу, але поки що не враховуємо взаємодії між іонами. Це пов'язано із тим, що використовуємо зовсім відмінний підхід розрахунку кореляційних функцій. Часові кореляційні функції знаходяться точно числовим методом. Знання кореляційних функцій на операторах, що описують іони на вузлах, дає можливість знайти інші характеристики іонної системи, зокрема, густину станів. В розділі 2 розглядаємо модель, застосовується "ферміонізація" моделі (зв'язок операторів Паулі з фермі операторами). Вперше "ферміонізація" була використана у [6], для зв'язку спінових операторів з не взаємодіючими ферміонами. Перетворення Йордана-Вігнера для спінових систем у одно- та двох-вимірному випадку розглянуто в [7]. Це дозволяє точно знаходити спінові кореляційні функції [8-12]. В розділі 3 обчислюються часові кореляційні функції на операторах Паулі. Вони дозволяють при фіксованій температурі і енергії на вузлі знаходити частотну залежність густини станів, звідки можна простежити і залежність

густини станів від температури, термодинаміку іонної системи.

1. Модель

Розглянемо ланцюжок N іонів одного сорту. Модельний гамільтоніан для такого ізотропного ланцюжка

$$H = \sum_{i=1}^N (\varepsilon - \mu) b_i^+ b_i + J \sum_{i=1}^N (b_i^+ b_{i+1} + b_{i+1}^+ b_i), \quad (1.1)$$

де ε – енергія іона на вузлі, μ – хімічний потенціал, b_i^+, b_i – відповідно оператори народження і знищення іона на вузлі i . В нашій моделі припускаємо, що всі вузли еквівалентні і розглядаємо поодинокі стрибки на найближчий вузол, J є параметр перескоків.

Іони на вузлах описуються операторами Паулі. Вузол може бути вільним або заповненим одним іоном. Так, два оператори Паулі антикомутують на деякому вузлі ланцюжка, тобто мають властивості ферміонів: $b_i, b_i^+ = 1, (b_i)^2 = (b_i^+)^2 = 0$; на різних вузлах $[b_i^+, b_j^+] = [b_i, b_j] = [b_i^+, b_j] = 0, i \neq j$ – піддаються бозе-статистиці. Безпосередньо важко дослідити дану модель, спираючись на статистику операторів Паулі, що пов'язано із неможливістю діагоналізації гамільтоніана в цих операторах. Потрібно мати перетворення, які б давали перехід до нових, строго фермі операторів. Такими є перетворення Йордана-Вігнера, які пов'язують оператори Паулі з операторами фермі:

$$b_i = a_i (-1)^{\sum_{j \leq i-1} n_j}, b_i^+ = a_i^+ (-1)^{\sum_{j \leq i-1} n_j},$$

a_i^+, a_i^- – фермі оператори. Множник біля фермі операторів можна записати у вигляді

$$(-1)^{\sum_{j \leq i-1} n_j} = \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2a_j^+ a_j) = \prod_{j=1}^{i-1} (-2S_j^z), S_j^z = n_j - \frac{1}{2}.$$

Здійснимо перетворення у гамільтоніані (2.1)

$$b_i^+ b_{i+1} = a_i^+ (-1)^{\sum_{j \leq i-1} n_j} (-1)^{\sum_{k \leq i} n_k} a_{i+1} = a_i \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2a_j^+ a_j) \prod_{k=1}^i (1 - 2a_k^+ a_k) a_{i+1} = a_i^+ (1 - 2a_i^+ a_i) a_{i+1} = a_i^+ a_{i+1},$$

відповідно

$$b_{i+1}^+ b_i = a_{i+1}^+ a_i,$$

тоді,

$$H = \sum_{i=1}^N (\varepsilon - \mu) a_i^+ a_i + J \sum_{i=1}^N (a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i). \quad (1.2)$$

У даному випадку в (2.2) не виникає ніяких множників біля операторів фермі, оскільки враховуються перескоки іонів між найближчими сусідніми вузлами. Якщо у (2.1) брати до уваги перескоки частинок на дальші вузли, тобто, враховувати, наприклад, член $b_i^+ b_{i+2}$, то у вихідному гамільтоніані після ферміонізації виникне член $a_i^+ (-2S_{i+1}^z) a_{i+2}$, якщо враховувати $b_i^+ b_{i+3}$, то у гамільтоніані переписаного на фермі операторах отримаємо $a_i^+ (-2S_{i+1}^z) (-2S_{i+2}^z) a_{i+3}$ і т. д.

Розглядаємо нескінченний ланцюжок ($N \rightarrow \infty$). Використаємо у (2.2) перетворення Фур'є

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqR_i} \alpha_q, \quad a_i^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-iqR_i} \alpha_q^+,$$

тоді H має діагональний вигляд

$$H = \sum_q E(q) \alpha_q^+ \alpha_q, \quad E(q) = \varepsilon - \mu + 2J \cos qa, \quad (1.3)$$

де a – постійна ланцюжка (далі покладемо $a = 1$), $q = \frac{2\pi n}{Na}$, $n = 1, \dots, N$.

В цьому представленні не важко розглянути термодинаміку даної моделі. Великий термодинамічний потенціал

$$\begin{aligned} \Omega &= -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln Sp e^{-\beta H} = -\frac{1}{\beta} \ln \prod_q \sum_{n_q=0,1} e^{-\beta E(q) n_q} = \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_q \ln (1 + e^{-\beta E(q)}). \end{aligned}$$

Відповідно, середнє число частинок

$$\langle n \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_q \frac{1}{1 + e^{\beta E(q)}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{1 + e^{\beta E(q)}}, \quad (1.4)$$

а $\langle S^z \rangle = \langle n \rangle - \frac{1}{2}$, отримане в такому представленні, ми пізніше порівняємо з результатом для цієї моделі, отриманим іншим чином, а саме

– на основі підходу, в якому знаходяться точні розв'язки відповідних кореляційних функцій на операторах Паулі при обчисленні густини станів.

2. Кореляційні функції на операторах Паулі

Розглянемо кореляційні функції на операторах Паулі і метод їх обчислення. Використаємо числовий метод знаходження спінових кореляційних функцій, розвинутий у роботах [8-12]. При цьому досліджуємо ланцюжки з достатньо великою кількістю вузлів $N = 400, 600, 1000$, що дає результати характерні для нескінченного ланцюжка.

Зведемо гамільтоніан (2.2) до вигляду

$$H = \sum_{i,j} a_i^+ A_{ij} a_j, \quad (2.1)$$

де $A_{ij} = (\varepsilon - \mu) \delta_{ij} + J(\delta_{j,i+1} - \delta_{j,i-1})$. Цей вираз для гамільтоніану (2.1) перетворимо до діагонального вигляду, використовуючи лінійні перетворення

$$a_i^+ = \sum_k g_{ik} \eta_k^+, \quad a_i = \sum_k g_{ik} \eta_k, \quad H = \sum_{i,j,k,k'} g_{ik} g_{jk'} A_{ij} \eta_k^+ \eta_{k'}.$$

Це можливо, якщо $[\eta_s, H] = E_s \eta_s$, $\sum_{k'} g_{jk'} g_{k'l} = \delta_{jl}$, $\{\eta_k^+, \eta_s\} = \delta_{ks}$, $\{\eta_{k'}, \eta_s\} = 0$. Тоді отримуємо задачу на власні значення:

$$\sum_i g_{si} A_{il} = E_s g_{sl}, \quad (2.2)$$

A_{il} – тридіагональна матриця. Гамільтоніан у діагональному вигляді $H = \sum_k E_k \eta_k^+ \eta_k$. Власні значення одержуються з (2.2) за стандартною чисельною процедурою.

Розглянемо різночасову кореляційну функцію $\langle b_i(t) b_i^+(0) \rangle$. Наявність іона на вузлі (чи його відсутність) є еквівалентними до спіну вгору (чи спіну вниз): $b_i^+ = S_i^+$, $b_i = S_i^-$, де S_i^+ , S_i^- – оператори перевороту спіну: $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$. Тоді

$$\langle b_i(t) b_i^+(0) \rangle = 2[\langle S_i^x(t) S_i^x(0) \rangle + i \langle S_i^x(t) S_i^y(0) \rangle], \quad (2.3)$$

оскільки $\langle S_i^x(t) S_i^x(0) \rangle = \langle S_i^y(t) S_i^y(0) \rangle$, $\langle S_i^x(t) S_i^y(0) \rangle = -\langle S_i^y(t) S_i^x(0) \rangle$.

Отже, обчислення двочасової кореляційної функції на операторах Паулі, зводиться до обчислення суми спінових кореляційних функцій відповідних компонент (2.3). Обчислення спінових кореляційних

функцій еквівалентне до знаходження кореляційних функцій на фермі операторах. Для цього перепишемо S_i^x , S_i^y через a_i^+ , a_i :

$$S_i^x = \frac{1}{2} (b_i^+ + b_i) = \frac{1}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (-2S_j^z)(a_i^+ + a_i),$$

$$S_i^y = \frac{1}{2i} (b_i^+ - b_i) = \frac{1}{2i} \prod_{j=1}^{i-1} (-2S_j^z)(a_i^+ - a_i),$$

$$S_i^z = \frac{1}{2} [b_i^+, b_i] = -\frac{1}{2} (b_i^+ + b_i)(b_i^+ - b_i) = -\frac{1}{2} (a_i^+ + a_i)(a_i^+ - a_i).$$

Підставляючи S_i^z у вираз для S_i^x і S_i^y , отримуємо вирази для спінових кореляційних функцій через фермі оператори:

$$\langle S_i^x(t) S_i^x(0) \rangle = \frac{1}{4} \left\langle \prod_{j=1}^{i-1} \varphi_j^+(t) \varphi_j^-(t) \varphi_i^+(t) \prod_{j=1}^{i-1} \varphi_j^+ \varphi_j^- \varphi_i^+ \right\rangle, \quad (2.4)$$

$$\langle S_i^x(t) S_i^y(0) \rangle = \frac{i}{4} \left\langle \prod_{j=1}^{i-1} \varphi_j^+(t) \varphi_j^-(t) \varphi_i^+(t) \prod_{j=1}^{i-1} \varphi_j^+ \varphi_j^- \varphi_i^- \right\rangle, \quad (2.5)$$

де введено позначення для лінійних комбінацій операторів фермі $\varphi_j^\pm = a_j^\pm \pm a_j$ [8], через оператори $\eta_k^\pm$, η_k , в яких гамільтоніан є діагональним: $\varphi_j^\pm = \sum_{k=1}^N (\eta_k^\pm \pm \eta_k)$. Застосовуючи теорему Віка, кореляційні функції (2.4), (2.5) розкладемо на суми добутків середніх від всеможливих комбінацій операторів φ_j^+ , φ_j^- . Середні від елементарних добутків мають вигляд:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i^+(t) \varphi_j^+ \rangle &= \sum_{k,k'=1}^N g_{ik} g_{jk'} \langle (\eta_k^+(t) + \eta_k(t)) (\eta_{k'}^+ + \eta_{k'}) \rangle = \\ &= \sum_{k,k'=1}^N g_{ik} g_{jk'} [e^{iE_k t} \langle \eta_k^+ \eta_k \rangle \delta_{kk'} + e^{-iE_k t} \langle \eta_k \eta_k^+ \rangle \delta_{kk'}] = \\ &= \sum_{k=1}^N g_{ik} g_{jk} [e^{iE_k t} \langle n_k \rangle + e^{-iE_k t} (1 - \langle n_k \rangle)] = \\ &= \sum_{k=1}^N g_{ik} g_{jk} \left[\frac{e^{iE_k t}}{1 + e^{\beta E_k}} + \frac{e^{-iE_k t}}{1 + e^{-\beta E_k}} \right], \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\langle \varphi_i^+(t) \varphi_j^+ \rangle = -\langle \varphi_i^-(t) \varphi_j^- \rangle,$$

відповідно

$$\langle \varphi_i^+(t) \varphi_j^- \rangle = -\langle \varphi_i^-(t) \varphi_j^+ \rangle = \sum_{k=1}^N g_{ik} g_{jk} \left[\frac{e^{iE_k t}}{1 + e^{\beta E_k}} - \frac{e^{-iE_k t}}{1 + e^{-\beta E_k}} \right]. \quad (2.7)$$

Розклад кореляційних функцій (2.4), (2.5) за теоремою Віка може бути записаний у вигляді пфафіана, квадрат якого дорівнює детермінанту антисиметричної матриці розміром $2(2i-1) \times 2(2i-1)$.

Капелом і Перком [13] отримані аналітичні вирази для $\langle S_j^x(t) S_j^x(0) \rangle$, $\langle S_j^x(t) S_j^y(0) \rangle$ при $\beta = 0$ для нескінченного ланцюжка:

$$\langle S_j^x(t) S_j^x(0) \rangle = \frac{1}{4} \cos(\varepsilon t) E^{-J^2 t^2}, \quad \langle S_j^x(t) S_j^y(0) \rangle = \frac{1}{4} \sin(\varepsilon t) E^{-J^2 t^2},$$

і згідно (2.3)

$$\langle b(t) b^+(0) \rangle = \frac{1}{2} (\cos(\varepsilon t) + i \sin(\varepsilon t)) E^{-J^2 t^2}. \quad (2.8)$$

Результати для часової кореляційної функції $\langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ отримуються згідно (2.3) чисельним знаходженням відповідних пфафіанів для $\langle S_j^x(t) S_j^x(0) \rangle$, $\langle S_j^x(t) S_j^y(0) \rangle$, побудованих на (2.6), (2.7). Тут не досліджується залежність кореляцій від номера вузла у ланцюжку. Подальше розглядаємо лише одновузлові кореляції з $j = 50$. При цьому вважаємо, що ми достатньо відійшли від краю, щоб не прослідковувалося ніяких крайових ефектів. Зміна кореляції $\langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ з часом на вузлі $j = 50$ для ланцюжка з $N = 600$ вузлів при $J = 1$ і енергії іона на вузлі $\varepsilon = 0.0001$, ± 0.5 зображена на рис. 1. Дійсні частини кореляційної функції при $\varepsilon = \pm 0.5$ співпадають, а уявні $Im \langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ – антисиметричні. При $\varepsilon = 0.0001$ $Im \langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ дорівнює нулю і кореляція $\langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ визначається дійсною частиною. На рис. 2 представлена часова залежність $\langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ при $\beta = 1$. $Im \langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ для $\varepsilon = 0$ має відмінне від нуля значення порівняно з результатом при $\beta = 0.001$. При чому, при пониженні температури, а також при збільшенні ε , глибина головного мінімуму $Im \langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle$ значно збільшується.

3. Густина станів

Знайдемо густину станів як уявну частину функції Гріна $\langle \langle b_i | b_j^+ \rangle \rangle$:

$$\rho_{ij}(\omega) = -2Im \langle \langle b_i | b_j^+ \rangle \rangle. \quad (3.1)$$

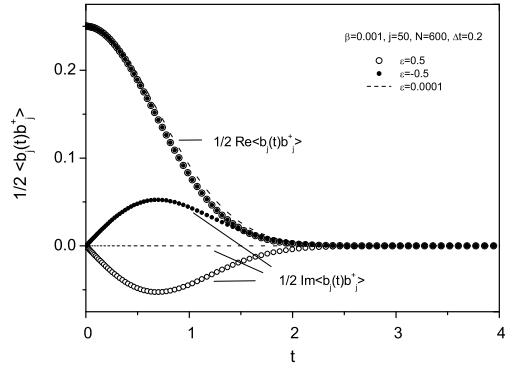


Рис. 1. Часова залежність кореляційної функції $\langle b_j(t)b_j^+ \rangle$ при $\beta = 0.001$ для значень ε , вказаних на графіку

Фур'є-образ функції Гріна дається виразом

$$\langle \langle b_i | b_j^+ \rangle \rangle_\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(t-t')} \langle \langle b_i(t) | b_j^+(t') \rangle \rangle dt - t'. \quad (3.2)$$

$$\text{За означенням } \langle \langle b_i(t) | b_j^+(t') \rangle \rangle = -\Theta(t-t') \langle [b_i(t), b_j^+(t')] \rangle. \quad (3.3)$$

Підставляючи (3.3) у (3.2), розкривши комутатор на операторах Паулі та здійснивши Фур'є-перетворення часових кореляційних функцій, отримаємо

$$\langle b_i(t), b_j^+(t') \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega'(t-t')} J_{bb^+}(\omega') d\omega',$$

$$\langle b_j^+(t'), b_i(t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega'(t-t')} J_{b^+b}(\omega') d\omega',$$

$$J_{bb^+}(\omega') = e^{\beta\hbar\omega'} J_{b^+b}(\omega'),$$

функція Гріна в спектральному представленні після нескладних перетворень має вигляд:

$$\langle \langle b_i | b_j^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{b^+b}(\omega') \frac{e^{\beta\hbar\omega'} - 1}{\omega - \omega' + i\varepsilon} d\omega'. \quad (3.4)$$

Розглянемо одновузлову автокореляційну функцію $J_{b+b}(\omega)$.

$$J_{b+b}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega'(t-t')} \langle b_j(t') b_j^+(t) \rangle dt - t' =$$

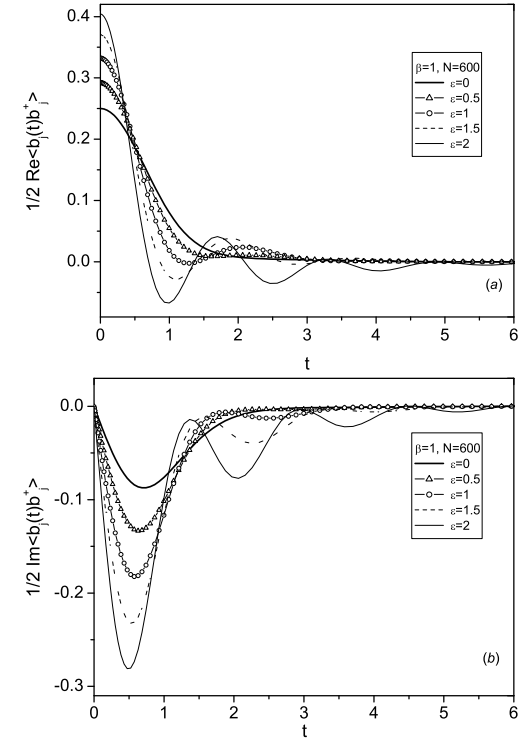


Рис. 2. Часова залежність кореляційної функції $\langle b_j(t)b_j^+ \rangle$ при $\beta = 1$ (а) – $\text{Re} \langle b_j(t)b_j^+(0) \rangle$, (б) – $\text{Im} \langle b_j(t)b_j^+(0) \rangle$ для значень ε , вказаних на графіку

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega'(t-t')} \langle b_j(t'-t) b_j^+(0) \rangle dt - t' = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega't} \langle b_j(t) b_j^+(0) \rangle dt.$$

У спінових операторах

$$J_{b+b}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \langle S_j^-(t) S_j^+(0) \rangle dt. \quad (3.5)$$

Враховуючи, що

$$\langle S_j^-(t) S_j^+(0) \rangle = \langle S_j^-(0) S_j^+(-t) \rangle = \langle S_j^-(0) S_j^+(t) \rangle^* =$$

$$\langle S_j^+(-t) S_j^-(0) \rangle = \langle S_j^-(t) S_j^+(0) \rangle^*,$$

маємо

$$J_{b+b}(\omega) = \int_0^\infty [e^{-i\omega t} \langle b_j(t) b_j^\dagger(0) \rangle + e^{i\omega t} \langle b_j(-t) b_j^\dagger(0) \rangle] dt = 2\text{Re} \int_0^\infty e^{-i\omega t} \langle b_j(t) b_j^\dagger(0) \rangle dt. \quad (3.6)$$

Остаточний вираз для фур'є-образу кореляційної функції для чисельних розрахунків є наступним

$$J_{b+b}(\omega) = 4\text{Re} \int_0^\infty e^{-i\omega t} [\langle S_j^x(t) S_j^x(0) \rangle + i \langle S_j^x(t) S_j^y(0) \rangle] dt. \quad (3.7)$$

Запишемо вираз для автокореляційної функції $J_{b+b}(\omega)$, виходячи з аналітичного результату (2.8). Підставимо (2.8) у (3.6):

$$J_{b+b}(\omega) = \text{Re} \int_0^\infty e^{-i\omega t} e^{-J^2 t^2} (\cos \varepsilon t + i \sin \varepsilon t) dt = \int_0^\infty e^{-J^2 t^2} \cos(\omega - \varepsilon)t dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2|J|} e^{\frac{(\omega - \varepsilon)^2}{4J^2}} \quad (3.8)$$

Частотна залежність $J_{b+b}(\omega)$ при $\beta = 0.001$, $\varepsilon = 0.0001$, ± 0.5 приведена на рис. 3.

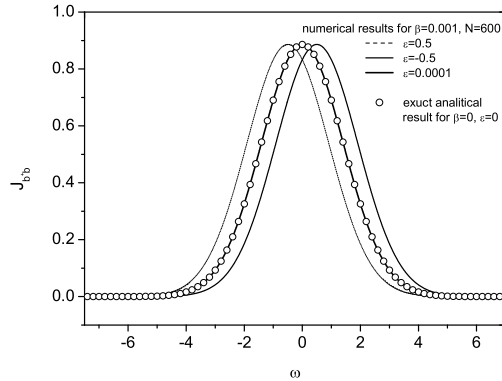


Рис. 3. Частотна залежність $J_{b+b}(\omega)$ при параметрах, вказаних на графіку.

Цей результат отриманий з виразу (3.7), де входить інтегрування часової залежності кореляційної функції $\langle b_j(t) b_j^\dagger(0) \rangle$ представленої

на рис. 1. Аналітичний результат (3.8) для $J_{b+b}(\omega)$ при $\varepsilon = 0$ на рис. 3 наведений за допомогою кілець. Він точно збігається з чисельним результатом. Максимум $J_{b+b}(\omega)$ для $\varepsilon = 0$ знаходиться на частоті $\omega = 0$. Зміна енергії на вузлі зсуває максимум частотної залежності автокореляційної функції і відповідно, для $\varepsilon = \pm 0.5$ симетрично (у випадку $\beta = 0$) в обидві сторони (для $\varepsilon = -0.5$ – в область додатніх частот).

Знання автокореляційних функцій дозволяє знаходити густину станів. Так, з (3.1) і (3.4) випливає

$$\rho_{jj}^c(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{b+b}(\omega') (e^{\beta \hbar \omega'} - 1) \pi \delta(\omega - \omega') d\omega = (e^{\beta \hbar \omega} - 1) J_{b+b}(\omega). \quad (3.9)$$

Цей вираз для густини станів отримано, виходячи з означення для функції Гріна (3.3) на комутаторі операторів Паулі. Отже, обчислення частотної залежності густини станів ρ_{jj}^c зводиться до розрахунку автокореляційної функції (3.7) з відповідним множником $(e^{\beta \hbar \omega} - 1)$.

Густина станів $\rho_{jj}^c(\omega)$ при $\beta = 0.001$ наведена на рис. 4

Якщо брати антикомутаторну функцію Гріна

$$\langle \langle b_i(t) | b_j^\dagger(t') \rangle \rangle = -\Theta(t - t') \langle \{b_i(t), b_j^\dagger(t')\} \rangle,$$

відповідно отримуємо (рис. 4))

$$\rho_{jj}^a(\omega) = (e^{\beta \hbar \omega} + 1) J_{b+b}(\omega). \quad (3.10)$$

Як видно з рисунку, при $\beta = 0.001$ значення ρ_{jj}^c є дуже малими у порівнянні з ρ_{jj}^a ; максимальне значення ρ_{jj}^a однакове для різних значень ε .

Наведемо результати чисельних розрахунків для $J_{b+b}(\omega)$, $\rho_{jj}^c(\omega)$ при нижчих значеннях температури (хоча область низьких температур у даному випадку при числових розрахунках досягнути важко). Отримана частотна залежність $J_{b+b}(\omega)$, $\rho_{jj}^c(\omega)$ при $\beta = 1, 5$ наведена на рис. 5.

Як видно з рис. 5 симетрія зміщення максимуму автокореляційної функції при однаковій зміні ε відносно 0 пропадає. Однак, як і на рис. 3, піки зсуваються в область додатніх частот для від'ємних значеннях ε . Крім того, максимумами $J_{b+b}(\omega)$ відрізняються за своєю величиною для ланцюжків з різними значеннями β , ε .

Частотна залежність густини станів $\rho_{jj}^c(\omega)$ має максимумами і мінімумами для додатніх і від'ємних значень (рис. 4, 5). Це пов'язано із

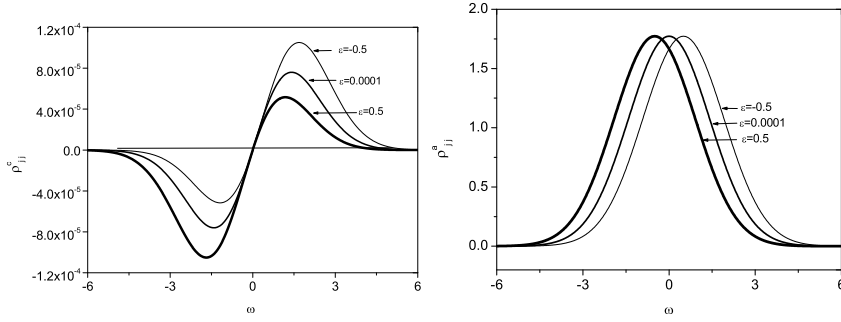


Рис. 4. Частотна залежність густини станів ρ_{jj}^c, ρ_{jj}^a при $\beta = 0.001$

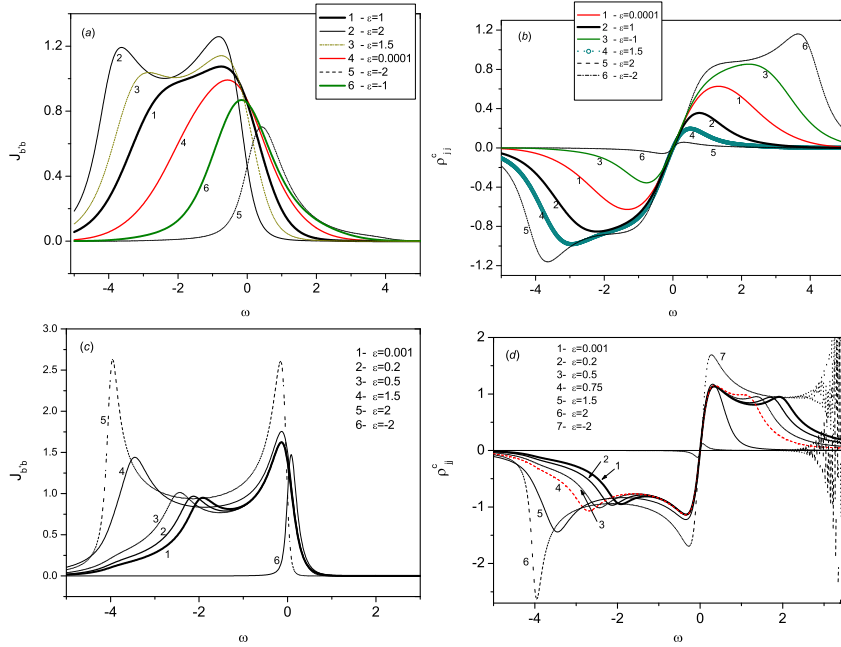


Рис. 5. Частотна залежність $J_{b+b}(\omega), \rho_{jj}^c(\omega)$ при $\beta = 1$ (a, b), $\beta = 5$ (c, d)

тим, що в означенні вихідної функції Гріна (3.3) фігурує комутатор на операторах Паулі, що вносить множник $e^{\beta\hbar\omega} - 1$ у вираз для густини станів. $\rho_{jj}^c(\omega)$ при $\varepsilon = 0$ має однакові за модулем значення в області від'ємних і додатних ω , тобто є антисиметричною відносно $\omega = 0$.

При пониженні температури появляются осциляції в $J_{b+b}(\omega)$ (рис. 6). Це ускладнює знаходження густини станів, якщо просуватись в область низьких температур. Густина станів для ланцюжка

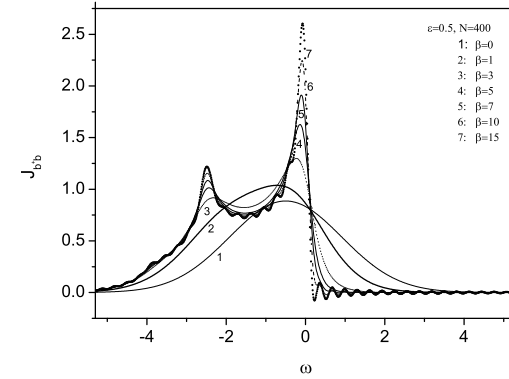


Рис. 6. Частотна залежність J_{b+b} при $\varepsilon = 0.5$ для β , вказаних на рисунку

$N = 1000$ вузлів з $\varepsilon = 0.5$ при $\beta = 1, 3, 5$ зображено на рис. 7 (a). При $\beta = 1$ не має осциляцій $\rho_{jj}^c(\omega)$. Як видно з рисунку, при пониженні температури осциляції посилюються. Дещо покращує ситуацію для $\rho_{jj}(\omega)$ збільшення верхньої межі інтегрування по часу (рис. 7 (b, c)). Однак, при низьких температурах осциляції $J_{b+b}, \rho_{jj}(\omega)$ є дуже сильні.

Звернемо увагу на розрахунок середнього числа частинок. Для цього використаємо співвідношення

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{\beta\hbar\omega} - 1) J_{b+b}(\omega) d\omega,$$

відповідно

$$\langle n \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho^c(\omega) d\omega + 1 \right). \quad (3.11)$$

Залежність середнього числа частинок від ε та хімічного потенціалу μ зображено на рис. 8. Середнє число частинок обчислюємо при фіксованій температурі, у даному випадку при $\beta = 1, \varepsilon = 0.5$.

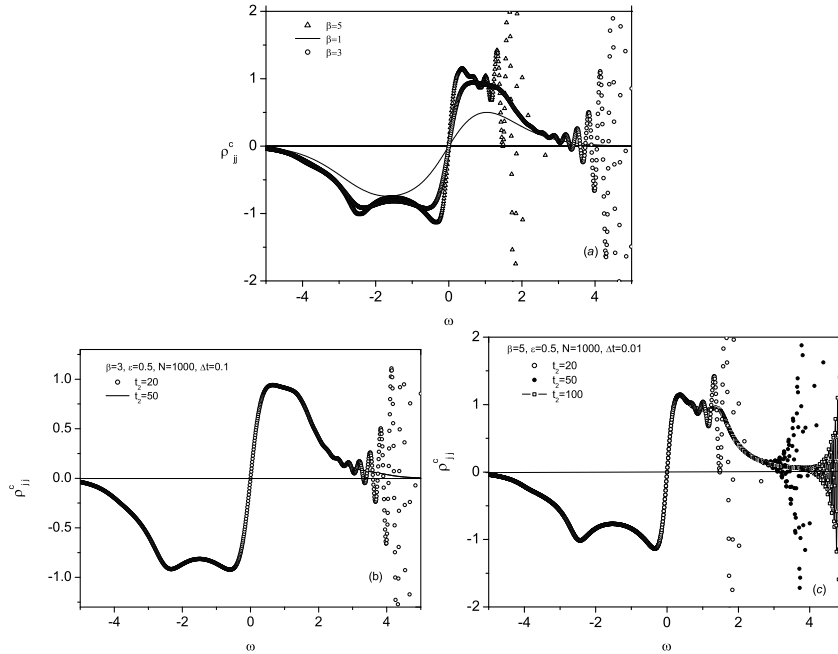


Рис. 7. Частотна залежність густини станів $\rho^c_{jj}(\omega)$ при $\varepsilon = 0.5$ ((a) – для $\beta = 1, 3, 5$, при однакових параметрах; (b), (c) – відповідно для $\beta = 3, 5$, при зміні верхньої межі інтегрування)

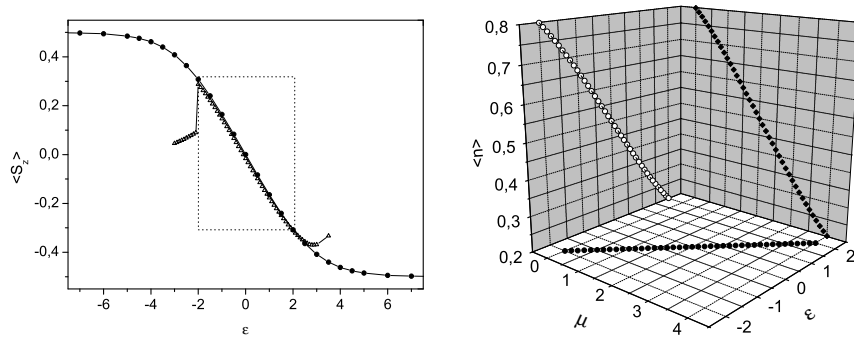


Рис. 8. Залежність $\langle S^z \rangle$ та середнього числа частинок від ε

Числові розрахунки для $\langle n \rangle$ (3.11) добре узгоджуються з (1.4) для значень $-2 \geq \varepsilon \geq 2$ (область значень вказана прямокутником на рис. 8 для зміни $\langle S^z \rangle$ з ε). В цій області $\langle n \rangle$ майже лінійно зростає із збільшенням енергії на вузлі і хімічного потенціалу. Таким чином, отримане середнє число частинок на вузлі із частотної залежності густини станів при фіксованій температурі підтверджує справедливість отриманих результатів.

У нашому випадку потрібне детальне дослідження частотної залежності густини станів, оскільки, сама кореляційна функція $\langle b_j(t)b_j^\dagger(0) \rangle$ на операторах Паулі, які взяті для опису поведінки іонів на вузлах, являє собою багаточастинкову кореляційну функцію операторів фермі. Оскільки досліджуються одновузлові кореляції і оператори Паулі на одному вузлі антикомутують, то нас може цікавити функція густини станів $\rho^a_{jj}(\omega)$:

$$\rho^a_{jj}(\omega) = \text{cth} \frac{\beta \hbar \omega}{2} \rho^c_{jj}(\omega). \quad (3.12)$$

Розглянемо також для порівняння густину станів для нескінченного ферміонного ланцюжка:

$$\begin{aligned} \rho^f(\omega) &= \frac{1}{N} \sum_q \delta \left(\omega - \frac{E_q}{\hbar} \right) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \delta \left(\omega - \frac{\varepsilon + 2J \cos q}{\hbar} \right) = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{4J^2 - (\omega - \varepsilon)^2}}, \quad |\omega - \varepsilon| < 2J. \end{aligned}$$

Отримана частотна і температурна залежність ρ^a_{jj} при певному ε для значень температури, вказаних на графіках, а також частотна залежність $\rho^f(\omega)$ представлені на рис. 9. З наведених результатів можна прослідкувати зміну поведінки густини станів із пониженням температури для ланцюжка з фіксованим ε . При нижчих температурах для фіксованого β поведінка густини станів відрізняється для ланцюжків з різними ε . $\rho^a(\omega)$ для $\pm \varepsilon$ є симетричною відносно $\omega = 0$, як видно з рис. 9 (b) для $\varepsilon = \pm 0.5$ при $\beta = 5$ (подібно як і $\rho^f(\omega)$ (f)) та $\rho^a(\omega)$ на нульовій частоті має максимальне значення для всіх ε, β . Проявляється подібна поведінка у частотних залежностях $\rho^a(\omega)$ при $\beta = 8, 15, \varepsilon = 2$ (рис. 9 е) та $\rho^f(\omega)$ при $\varepsilon = 2$. У цьому випадку зсув залежностей $\rho^a(\omega), \rho^f(\omega)$ в протилежні області частот пов'язаний із вибором $\langle n \rangle = \frac{1}{2} \pm \langle S^z \rangle$. Однак, із симетрії $\rho(\omega \pm \varepsilon)$, а також локалізації мінімуму на частоті $\omega = 2$ ці залежності подібні в області $0 \leq \omega \leq 4$, хоча самі мінімуми $\rho^a(\omega), \rho^f(\omega)$ за величиною відрізняються.

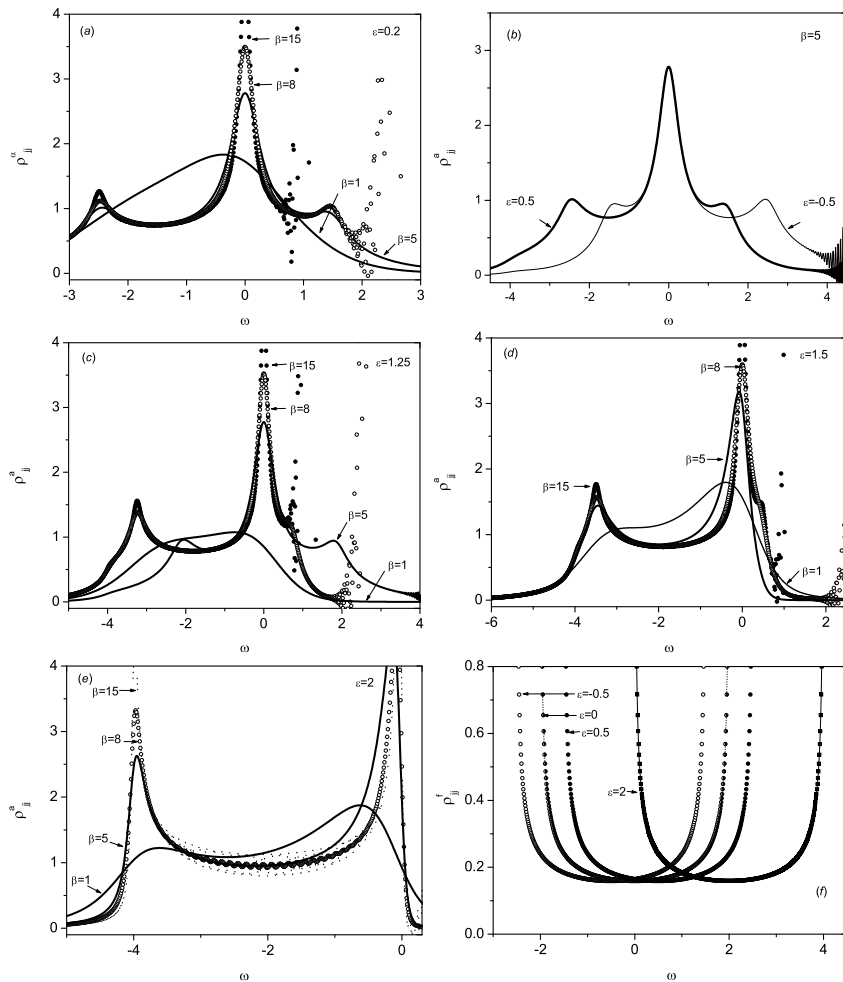


Рис. 9. Частотна та температурна залежність $J_{b+b}(\omega)$, $\rho^a_{jj}(\omega)$ при параметрах вказаних на графіках (а-е), частотна залежність $\rho^f(\omega)$ (f)

4. Висновки

В цій роботі розглянена проста модель іонних перескоків для нескінченного ланцюжка незалежних іонів. Дослідження динамічних характеристик такої системи: іонної провідності, зокрема, густини станів вимагає обчислення відповідних кореляційних функцій на операторах Паулі. Метод обчислення кореляційних функцій $\langle b_j(t)b_j^\dagger \rangle$ базується на процедурі ферміонізації, яка дозволяє знаходити точні числові розв'язки кореляційних функцій. Числові розрахунки $\langle b_j(t)b_j^\dagger \rangle$ при $\beta = 0$ збігаються з аналітичними результатами [13]. Досліджено частотну залежність автокореляційних функцій $J_{b+b}(\omega)$, а також отримано залежність густини станів від частоти при певному значенні енергії та фіксованій температурі. Прослідкована зміна $\rho(\omega)$ при пониженні температури (хоча область низьких температур не розглянута). Видно, що при $T = \infty$ максимальне значення $\rho^a_{jj}(\omega)$ дорівнює $\rho_{jj}(0)$ для розглянутої області значень ϵ ; при нижчих температурах для фіксованого β поведінка густини станів відрізняється для ланцюжків з різним ϵ . Спостерігається подібна поведінка густини станів для нескінченного іонного та ферміонного ланцюжка при пониженні температури в області відповідних частот.

5. Подяка

Автори висловлюють свою вдячність Т. Є. Крохмальському за постійну увагу та допомогу при проведенні числових розрахунків.

Література

1. Mahan G. D., Phys. Rev. B, 14, 2, 793 (1976).
2. Yonashiro K., Tomoyose T., Sakai E., 52, 11, 3837 - 3844 (1983).
3. Tomoyose T., J. Phys. Jap. Soc., 60, 4, 1263-1271 (1990).
4. Tomoyose T., J. Phys. Jap. Soc., 66, 8, 2383-2385 (1997).
5. Tanaka T., Majed A. Sawatarie, Barry J. H., Shatma N. L. and Munera C. H., Phys. Rev. B, 34, 3773 (1986).
6. Lieb E., Schultz T., Mattis D., Ann. Phys., 16, 407 (1961).
7. Derzhko O., Cond. Matt. Phys., 1, (2003).
8. Derzhko O., Krokhmal'skii T., J. Phys. Stud., 2, 2, 263-268 (1998).
9. Derzhko O., Krokhmal'skii T., Phys. Stat. Sol. (b), 217, 927 (2000).
10. Derzhko O., Krokhmal'skii T., J. Phys. A, 33, 3063-3086 (2000).
11. Stolze J., Vogel M., Cond. Matt. Phys., 2, (1999).

12. Derzhko O., Krokhmalskii T. and Stolze J., J. Phys. A, 35, 3573-3596 (2002).
13. Capel h. W., Perk J. H. H., Phys. 87 A, 211-242 (1977).

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк
Ірина Романівна Дулепа

Дослідження густини станів для одновимірної ґраткової
МОДЕЛІ ІОННОГО ПЕРЕНОСУ

Роботу отримано 2 січня 2004 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені