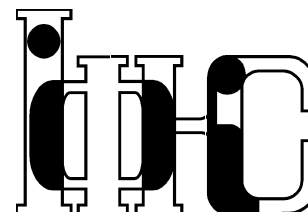


Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

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/>)

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

Стеців Роман Ярославович

Одночастинкові спектральні густини і рівноважні стани
одновимірного іонного провідника

Роботу отримано 23 грудня 2013 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

ICMP-13-10U

Р.Я. Стеців

ОДНОЧАСТИНКОВІ СПЕКТРАЛЬНІ ГУСТИНИ
І РІВНОВАЖНІ СТАНИ
ОДНОВИМІРНОГО ІОННОГО ПРОВІДНИКА

ЛЬВІВ

УДК: 538.931, 538.911

PACS: 75.10.Pq, 66.30.Dn, 03.75.Lm

Одночастинкові спектральні густини і рівноважні стани одновимірного іонного провідника

Р.Я. Стеців

Анотація. Досліджено рівноважні стани одновимірного іонного провідника. Розгляд базується на ґратковій моделі Паулі, в якій враховано іонне перенесення, взаємодію між сусідніми іонами а також модулююче поле. Використовуючи метод точної діагоналізації для скінченних одновимірних іонних провідників з періодичними граничними умовами, розраховано одночастинкові спектральні густини і встановлено області існування різних фаз системи в залежності від величини міжчастинкової взаємодії та модулюючого поля. Показано, що при $T \neq 0$ переходи між фазами є розмитими і мають кросоверний характер.

One-particle spectral densities and equilibrium states of one-dimensional ion conductor

R.Ya. Stetsiv

Abstract. We investigate the equilibrium states of one-dimensional ion conductor. The consideration is based on the Pauli lattice model that takes into account ion transfer, interaction between nearest-neighbouring ions and modulating field. Using exact diagonalization method for the finite one-dimensional ion conductor in periodic boundary conditions we have calculated one-particle spectral densities and obtain phase diagrams of the system for different values of interaction between ions and modulating field.

Подається в Journal of Physical Studies

Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2013
Institute for Condensed Matter Physics 2013

1. Вступ

Системи з іонною (протонною) провідністю в останні роки є предметом багатьох експериментальних і теоретичних досліджень. Незважаючи на те, що кристалічні іонні провідники відомі вже більше ніж два століття, інтенсивне вивчення цих об'єктів почалося недавно у зв'язку з відкриттям суперіонних (суперпротонних) провідників, що містять високотемпературну фазу з високою провідністю. У низькотемпературній фазі іони займають фіксовані позиції в елементарній комірці. В суперіонній фазі ці позиції заповнені частково з тою чи іншою імовірністю. Теоретичний опис систем з іонною провідністю в основному базується на ґраткових моделях. Частина з них трактує іони як фермі-частинки і зосереджує увагу на таких аспектах як роль далекоюсяжних взаємодій [1–3] чи вплив взаємодії з фононами [4, 5]. У деяких недавніх роботах приділено увагу короткосяжним взаємодіям між частинками [6–8]. Більш послідовно іони та протони описувати за допомогою "змішаної" статистики Паулі [9], 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 опис може бути ефективніший. Наприклад, було показано, що ґраткова модель Паулі дає змогу описати появу стану типу суперфлюїду (SF) (фаза з бозе-конденсатом) навіть при відсутності прямої взаємодії між частинками [10–12]. Часто для розв'язання таких задач гамільтоніан, записаний на операторах Паулі, за допомогою процедури ферміонізації [13] (див. також [14–16]) зводять до гамільтоніану, записаного на операторах Фермі (для одновимірних систем). ґраткова модель частинок Паулі є подібна до моделі Бозе-Хаббарда в наближенні "жорстких" бозонів (при обмеженні на числа заповнення $n_i = 0, 1$). Остання широко застосовується для опису іонної провідності, дослідження енергетичного спектру адсорбованих іонів на кристалічній поверхні, а також інтеркаляції в кристалах [17]. Модель Бозе-Хаббарда також описує перехід від моттівського діелектрика (MI) до стану типу суперфлюїду (SF) [18–24]. Деякі автори також отримують проміжну фазу "суперсолід" яка може виникнути на фазовій діаграмі при переході від зарядовпорядкованої фази (CDW) до фази SF.

У цій роботі ми досліджуємо рівноважні стани одновимірного провідника Паулі на основі ґраткової моделі, яка враховує іонне перенесення, модулююче поле і короткосяжну взаємодію між іонами.

Особлива увага приділяється останній, оскільки згідно з експериментом [25] і квантово-хімічними розрахунками [26, 27] короткосяжна взаємодія є важливою в реальних системах і великою мірою визначає поведінку системи. Більше того, для випадку провідника Паулі короткосяжна взаємодія є відповідальною за перехід до CDW-стану [28]. Нами досліджені умови переходу від зарядовпорядкованої фази (CDW) до фази типу суперфлюїду (SF), яка може розглядатися як аналог суперіонної фази, і до фази типу моттівського діелектрика (MI). Аналізуючи отримані іонні одночастинкові спектральні густини та їх зміни при зміні концентрації іонів (а також при зміні температури), ми отримуємо діаграми станів одновимірного іонного провідника.

2. Модель іонного провідника

Іонний провідник розглядаємо як ланцюжок важких нерухомих іонних груп і легких іонів, що переміщуються вздовж такого ланцюжка, заселяючи певні позиції. У спрощеному вигляді таким способом враховується гроттхусівський механізм іонного транспорту у реальних системах. Підсистема легких іонів описується наступним гамільтоніаном:

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

Модель враховує переміщення іонів між сусідніми позиціями (параметр перенесення t) і взаємодію між іонами, що заселяють сусідні позиції (параметр взаємодії V), а також модулююче поле (параметр A). Поле A робить систему двопідгратковою і в певній мірі імітує далекосяжну взаємодію між частинками, яка сприяє модуляції у просторовому розподілі легких іонів у т.зв. 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 [29], а також для опису іонних провідників [30]. Складніший двопідгратковий випадок цієї моделі був застосований для опису протонних провідників [31]. 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 великим одновузловим відштовхуванням ($U \rightarrow \infty$) [32]. Остання часто застосовується для дослідження проблем бозе-конденсації.

3. Метод точної діагоналізації

Енергетичний спектр і спектральні густини одновимірного іонного провідника Паулі ми розраховуємо методом 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 гамільтоніану на базі цих станів є матрицею порядку $2^N \times 2^N$ і має такий вигляд:

$$H_{mn} = \sum_{i=1}^N \left[t \left(H_{mn}^{(1)} + H_{mn}^{(2)} \right) + \tilde{V} H_{mn}^{(3)} - (\mu - A(-1)^i) H_{mn}^{(4)} \right], \quad (3)$$

де

$$H_{mn}^{(1)} = \langle n_1 \dots | c_i^+ c_{i+1} | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - n'_i - 1) \delta(n_{i+1} - n'_{i+1} + 1) \times \prod_{l \neq i; i+1} \delta(n_l - n'_l),$$

$$H_{mn}^{(2)} = \langle n_1 \dots | c_{i+1}^+ c_i | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - n'_i + 1) \delta(n_{i+1} - n'_{i+1} - 1) \times \prod_{l \neq i; i+1} \delta(n_l - n'_l),$$

$$H_{mn}^{(3)} = \langle n_1 \dots | n_i n_{i+1} | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - 1) \delta(n'_i - 1) \delta(n_{i+1} - 1) \times \delta(n'_{i+1} - 1) \prod_{l \neq i; i+1} \delta(n_l - n'_l),$$

$$H_{mn}^{(4)} = \langle n_1 \dots | n_i | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - 1) \delta(n'_i - 1) \prod_{l \neq i} \delta(n_l - n'_l).$$

Ця матриця діагоналізується числовим способом. Це відповідає перетворенню:

$$U^{-1}HU = \tilde{H} = \sum_p \lambda_p \tilde{X}^{pp}, \quad (4)$$

де λ_p - власні значення гамільтоніана, \tilde{X}^{pp} - оператори Хаббарда. Таке ж перетворення застосовуємо до операторів народження і знищення частинок у позиції i на ланцюжку

$$U^{-1}c_iU = \sum_{pq} A_{pq}^i \tilde{X}^{pq}, \quad U^{-1}c_i^+U = \sum_{rs} A_{rs}^{i*} \tilde{X}^{rs} \quad (5)$$

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

$$\ll c_i(t) | c_i^+(t') \gg^{(c)} = -i\Theta(t-t') \langle [c_i(t), c_i^+(t')] \rangle \quad (6)$$

та антикомутаторну функцію Гріна

$$\ll c_i(t) | c_i^+(t') \gg^{(a)} = -i\Theta(t-t') \langle \{c_i(t), c_i^+(t')\} \rangle. \quad (7)$$

Уявні частини цих функцій Гріна визначають одночастинкові спектральні густини:

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= -\frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^N \text{Im} \ll c_j | c_j^+ \gg_{\omega+i\varepsilon} \\ &= -\frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^N \text{Im} \left[\frac{1}{Z} \sum_{pq} A_{pq}^j A_{pq}^{j*} \frac{e^{-\beta\lambda_p} - \eta e^{-\beta\lambda_q}}{\omega - (\lambda_q - \lambda_p) + i\varepsilon} \right], \quad (8) \end{aligned}$$

Тут $Z = \sum_p e^{-\beta\lambda_p}$.

Спектральні густини в (8), розраховані для комутаторної $\eta = 1$ (6) і антикомутаторної $\eta = -1$ (7) функцій Гріна, відповідно, мають дискретну структуру, містять ряд δ -піків у зв'язку з скінченним розміром ланцюжка. Якщо збільшувати розмір ланцюжка (N),

дельта-піки будуть розташовуватися густіше, формуючи зонну структуру, яка отримується при $N = \infty$. При числових розрахунках ми обмежилися випадком $N = 10$. Введено також малий параметр Δ для розширення δ -піків згідно розподілу Лоренца

$$\delta(\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\omega^2 + \Delta^2}. \quad (9)$$

4. Іонні спектральні густини і діаграми станів

Ми розрахували спектральні густини (8) в широкій області значень короткосяжної взаємодії між іонами для різних температур і значень хімічного потенціалу. Експериментальні дослідження деяких специфічних кристалів [25, 33], а також квантово-хімічні розрахунки [26] дають можливість оцінити величину кореляційної константи $V = 3000 \dots 10000 \text{ см}^{-1}$; а також величину параметра переносу $t = 40 \dots 2500 \text{ см}^{-1}$. Це показує, що в реальних системах є сильна кореляція між іонами, що має вагомий вплив на структуру і енергетичний спектр системи. В нашій роботі ми брали: $V/t = 0, 1, \dots 6$. Всі енергетичні параметри, включаючи kT представлені 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 відповідні діаграми станів (рис. 1).

Діаграми представлені для $\delta < 0$ ($\delta = n - 1/2$). Діаграми є симетричні відносно зміни знаку δ . При їх побудові ми використали той факт, що характерною рисою комутаторної спектральної густини у фазі суперфлюїду (SF) є наявність від'ємної гілки (при $\omega < 0$), яка появляється неперервно як продовження додатньої гілки в точці $\omega = 0$ (див. наприклад [34]). На відміну від цього в зарядовпорядкованій фазі (CDW) ця гілка відділена від додатної гілки щілиною. Таким чином ми маємо розщеплення спектру на дві підзони і відповідно модульований стан з подвоєнням періоду ґратки. Фаза CDW при $T = 0$ є характерна для станів з половинним заповненням. Рівень хімічного потенціалу μ при цьому знаходиться в середині щілини. При пониженні рівня хімічного потенціалу і виході його зі щілини матимемо перехід до SF фази, коли при $\omega = 0$ додатня гілка неперервно переходить у від'ємну. При подальшому пониженні рівня хімічного потенціалу від'ємна гілка пропадає і маємо фазовий перехід від фази суперфлюїду до фази типу моттівського діелектрика (MI), коли рівень хімічного потенціалу знаходиться нижче дна нижньої підзони.

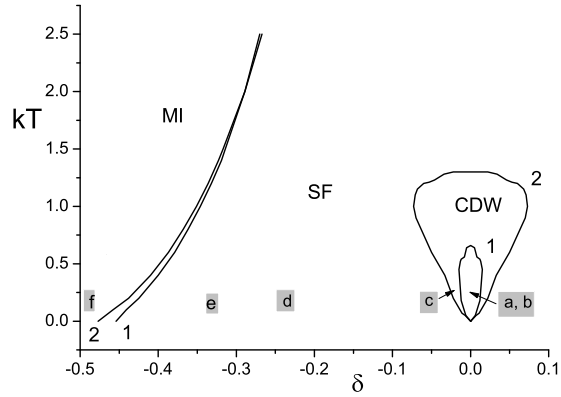


Рис. 1. Діаграма станів одновимірного іонного провідника при відсутності і при наявності модулюючого поля A , відповідно: 1 – $A = 0$; 2 – $A = 1$. В обидвох випадках $V = 4$, $t = 1$, $\delta = n - 1/2$.

В такому стані іони потребують певної енергії активації для індукування їхнього перенесення. Комутаторна спектральна густина при цьому має лише додатню гілку. Стан типу Моттівського діелектрика буде і у випадку коли рівень хімічного потенціалу знаходиться над верхньою підзоною. В такому випадку комутаторна спектральна густина має лише від'ємну гілку. Значення середньої заселеності стану n при даному μ розраховувалося згідно з спектральною теоремою $n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_a(\omega)d\omega}{e^{\beta\omega} + 1}$ де ρ_a - антикомутаторна спектральна густина (густина станів). Для одновимірної структури, яка розглядається, описані вище CDW, SF і MI фази і фазові переходи між ними існують лише при $T = 0$. Для $T \neq 0$ ми можемо виділяти області існування станів типу CDW, SF, MI (див. рисунок 1), 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 рисунку 2 представлений розрахований нами іонний спектр (зокрема комутаторна спектральна густина) при $T = 0$ і $T = 0.2$. Для зручності введено величину $\mu' = \mu - V$.

На рисунках 2d і 2e представлена SF фаза. Для вищих значень μ' , ближчих до половинного заповнення, є фаза CDW, графіки 2b і 2c. На рисунку 2a представлена антикомутаторна спектральна густина

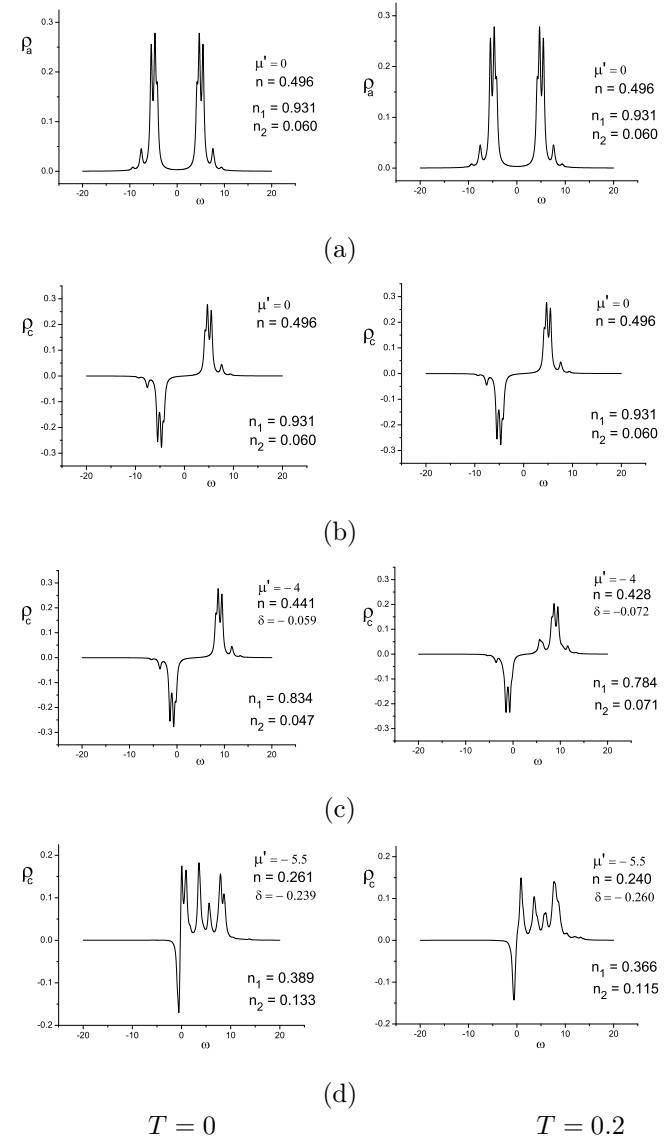


Рис. 2. Комутаторні і антикомутаторна (а) одночастинкові спектральні густини при різних температурах: ліва колонка - $T = 0$, права колонка - $T = 0.2$. Положення рівня хімічного потенціалу задане значенням частоти $\omega = 0$. Рисунки (a, b, ..., f) відповідають позиціям на діаграмі на рисунку 1, $V = 4$, $A = 1$, $t = 1$, $\Delta = 0.25$.

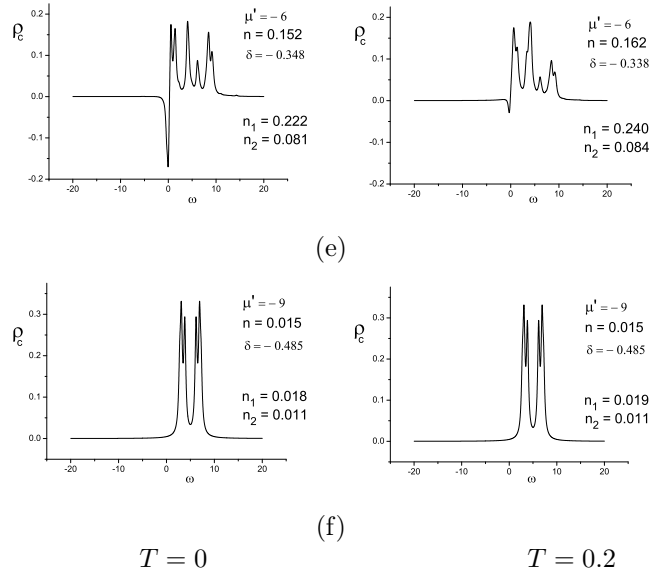


Рис. 3. Продовження рис. 2.

(густина станів) при $\mu' = 0$, тут є наявна щілина в спектрі (CDW фаза). Як видно з рисунку 2 характер спектральних функцій при $T = 0.2$ в усіх фазах такий як і при $T = 0$. Положення рівня хімічного потенціалу співпадає з позицією $\omega = 0$. У фазі CDW, графіки 2a і 2b, а також у фазі MI, графік 2f, спектральні функції при $T = 0$ і $T = 0.2$ мало відрізняються навіть кількісно. Лише вже біля границі переходу CDW- SF при $T = 0.2$ появляються додаткові піки (див. рис. 2c). У SF фазі температурні зміни спектральних густин дещо значніші. Так з ростом температури згладжуються піки спектральних густин (див. рис.2d, рис.2e). Зокрема при $\mu' = -6$, рис. 2e, при $T = 0$ значно сильніше виражена особливість спектральної густини, типова для SF фази ніж при $T = 0.2$, проте характер функцій є однаковий. Наведені вище густини станів відповідають точкам на діаграмі (рис. 1) з аналогічними позначеннями (a, b, \dots). Як видно з діаграми станів (рис. 1) 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

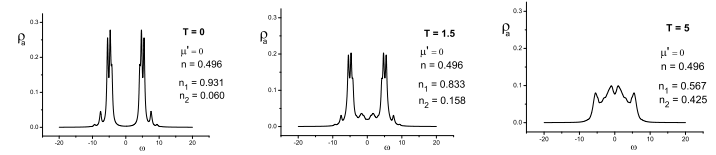


Рис. 4. Температурний перехід типу діелектрик-провідник в одновимірному іонному провіднику. Випадок половинного заповнення, $n = 1/2$, ($\mu' = 0$), $V = 4$, $A = 1$, $t = 1$. Положення рівня хімічного потенціалу співпадає з позицією $\omega = 0$.

при $n = 1/2$; маємо ефект температурного переходу типу діелектрик-провідник (так званий перехід Мотта).

Ефект можна проілюструвати на прикладі антикомутаторної одностинкової спектральної густини (густини станів) при різних температурах (див. рисунок 4), розрахованої виходячи з формули (8). Щілина в спектрі ($\rho_a = 0$), що спостерігається при низьких температурах при половинному заповненні пов'язана з появою зарядовпорядкованого стану. Це зумовлено відштовхувальною короткодючою взаємодією між частинками, яка і формує такий тип основного стану системи. При $T \neq 0$ щілина закривається. Можливість ефекту закриття щілини при зростанні температури для об'єктів, що досліджуються в даній роботі, було показано в роботі [7] а також підтверджено числовими розрахунками [35] для випадку, коли частинки підлягають статистиці Фермі. В роботі [35] розрахунки проводились на основі аналітичного наближення, що базується на наближенні когерентного потенціалу (CPA) з одного боку, з іншого боку одностинковий спектр розраховувався чисельно використовуючи метод точної діагоналізації. Для випадку коли частинки підлягають статистиці Паулі (який розглядається в даній роботі) фазу, в яку переходить система при зростанні температури ми називаємо фазою типу суперфлюїду ("SF"). Це не є справжня SF фаза (як при $T = 0$), оскільки ще одною ознакою SF фази є розбіжність Фур'є образу дійсної частини комутаторної функції Гріна при нульовій частоті ($\omega = 0$) і нульовому хвильовому векторі ($k = 0$), $ReG_{k=0}(\omega = 0) \rightarrow \infty$, тобто розбіжність статичної сприйнятливості іонної підсистеми щодо дії поля, пов'язаного з народженням і знищенням частинок, що описує нестійкість стосовно появи бозе-конденсату; а як показали наші розрахунки при $T > 0$ в області "SF фази" $ReG_{k=0}(\omega = 0)$ має скінченне значення. У випадку скінченного ланцюжка, що розглядається,

$$G_{k=0}(\omega = 0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[\frac{1}{Z} \sum_{pq} A_{pq}^i A_{pq}^{j*} \frac{e^{-\beta\lambda_p} - e^{-\beta\lambda_q}}{\lambda_p - \lambda_q + i\varepsilon} \right], \quad (10)$$

Нами проведено розрахунок $ReG_{k=0}(\omega = 0)$ для різних значень взаємодії V між іонами і різних значень модулюючого поля A . Для всіх випадків отримано значне зростання (максимум) функції $ReG_{k=0}(\omega = 0)$ в області "SF фази при $T > 0$ але особливості (розбіжності) нема і при підвищенні температури максимум розмивається (див. рисунок 5). Тільки в границі $T \rightarrow 0$ $ReG_{k=0}(\omega = 0)$, як функція температури, у певних областях значень хімічного потенціалу 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 $T > 0$.

Включення модулюючого поля A робить сусідні положення іонів нерівноправними і ґратка розділяється на дві підґратки з різною іонною заселеністю. Заселеність іонних позицій в залежності від хімічного потенціалу і від величини модулюючого поля показана на рисунку 6.

Зовсім малі поля A викликають велику різницю в заселеності сусідніх іонних позицій (див. рисунок 6). Також слід відзначити, що включення модулюючого поля розширює область CDW фази, тоді як область SF фази при цьому зменшується. В роботі [28] досліджувався випадок $T > 0$. В даній роботі розрахунки проведені і для $T = 0$. Нами отримані діаграми стану при $T = 0$ в залежності від величини модулюючого поля A і величини короткодіючої взаємодії між іонами V . Деякі з них наведені на рисунку 7.

Для випадку залежності від величини короткодіючої взаємодії між іонами V отримано, що лінія розмежування SF і MI фаз є прямою лінією (значення хімічного потенціалу, при якому відбувається перехід, пропорційне до V). Подібна залежність від величини V отримана при розрахунках квантовим Монте-Карло двовимірної моделі жорстких бозонів, застосованої до високотемпературних надпровідників [23]. При зростанні як величини V так і величини A збільшується щільність в спектрі в CDW фазі. Розширення щільності в спектрі при зростанні взаємодії V отримувалося і в раніших дослідженнях, але для Фермі систем [8, 35]. В загальному ширина області CDW фази зростає як зі збільшенням величини короткодіючої взаємодії V так і величини модулюючого поля A .

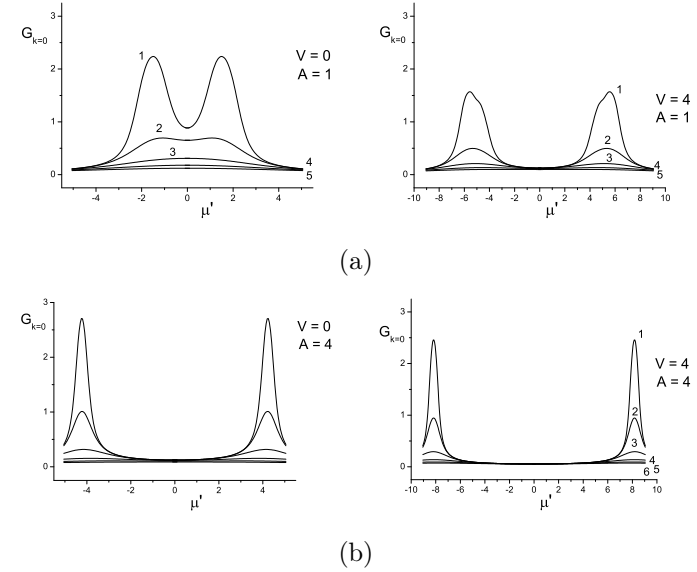


Рис. 5. Фур'є образ дійсної частини комутаторної функції Гріна при нульовій частоті ($\omega = 0$) і нульовому хвильовому векторі ($k = 0$), $ReG_{k=0}(\omega = 0)$, для різних значень величини взаємодії між частинками і різних значень величини модулюючого поля: (a) 1 – $T = 0.2$; 2 – $T = 0.5$; 3 – $T = 1$; 4 – $T = 1.5$; 5 – $T = 2$; (b) 1 – $T = 0.1$; 2 – $T = 0.2$; 3 – $T = 0.5$; 4 – $T = 1$; 5 – $T = 1.5$; 6 – $T = 2$; $\Delta = 1 \times 10^{-6}$.

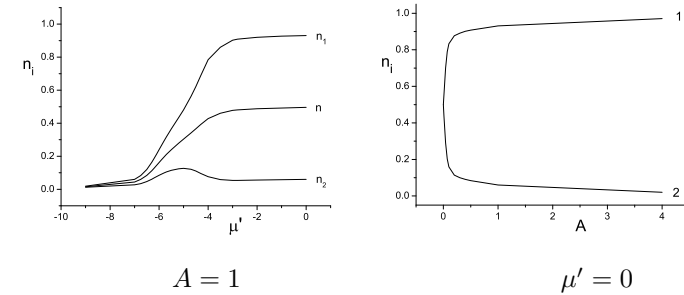


Рис. 6. Заселеність іонних позицій в залежності від хімічного потенціалу і від величини модулюючого поля, $T = 0.2$; $V = 4$, $t = 1$.

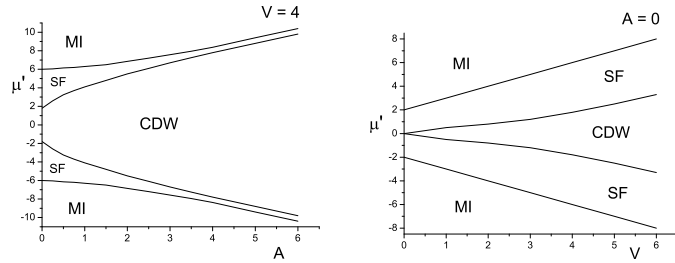


Рис. 7. Діаграми стану при $T = 0$ в залежності від величини модулюючого поля A і величини короткодіючої взаємодії між іонами V .

5. Висновки

Структура енергетичного спектру одновимірного іонного провідника визначається величиною взаємодії між іонами, їх концентрацією і температурою. Методом точної діагоналізації показано, що при $T = 0$ короткосяжна відштовхувальна взаємодія між іонами приводить до розщеплення енергетичного спектру одновимірного іонного провідника і появи щілини в спектрі при половинному заповненні іонних позицій. При $T \neq 0$ щілина зникає, поступово заповнюючись із підвищенням температури. Встановлено, що в одновимірному іонному провіднику Паулі при $T = 0$ CDW фаза є лише при половинному заповненні станів ($n = 1/2$). Ширина області CDW фази (в μ координатах) зростає як зі збільшенням величини короткосяжної взаємодії V так і величини модулюючого поля A , яке можна пов'язувати з внутрішнім полем, що виникає внаслідок далекосяжної взаємодії; при цьому щілина в спектрі в цій фазі збільшується із збільшенням величин V і A . Аналізуючи одночастинкові спектральні густини $\rho_c(\omega)$ для одновимірних іонних провідників, встановлено границі фаз CDW, SF, МІ при $T = 0$ для різних значень короткосяжної взаємодії і модулюючого поля. Для $T \neq 0$ границі між фазами розмиваються і переходи між ними мають кросоверний характер, перестаючи бути реальними фазовими переходами.

Отримано, що Фур'є образ дійсної частини комутаторної функції Гріна $ReG_{k=0}(\omega = 0)$ має максимум в області фази суперфлюїду (SF), що підтверджує тенденцію до появи такого стану в системі. Однак при зростанні температури максимум розмивається. Це є свід-

ченням того, що в одновимірному випадку при $T \neq 0$ немає справжньої SF фази з бозе-конденсатом, яка може існувати лише при $T = 0$.

6. Подяка

Автор вдячний проф. І.В.Стасюку за обговорення результатів роботи та критичні зауваження до рукопису.

Література

1. W. Salejda, N.A. Dzhavadov, Phys. Stat. Sol. (b) **158**, 119 (1990).
2. W.Salejda, N.A. Dzhavadov, Phys. Stat. Sol. (b) **158**, 475 (1990).
3. I.V. Stasyuk, N. Pavlenko, B.Hilczer, Phase Transitions **62**, 135 (1997).
4. N.I.Pavlenko, Phys. Rev.B **61**, 4988 (2000).
5. V. V. Krasnogolovets, P. M. Tomchuk, Phys. Stat. Sol. (b) **130**, 807 (1985).
6. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, B. Hilczer, Solid Sate Ionics **145**, 211 (2001).
7. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, Integrated Ferroelectrics **215** (2004).
8. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, Phase Transitions **80**, 63 (2007).
9. G. D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 780 (1976).
10. I.V. Stasyuk, I. R. Dulepa, Condens. Matter Phys. **10**, 259 (2007).
11. I.V. Stasyuk, I. R. Dulepa, J.Phys. Studies **13**, 2701 (2009).
12. R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 170 (1990).
13. E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
14. O. Derzhko, T. Krokhmalskii, Phys. Stat. Sol. B **208**, 221 (1998).
15. O. Derzhko, T. Krokhmalskii, Phys. Stat. Sol. B **217**, 927 (2000).
16. O. Derzhko, J. Phys. Stud. **5**, No.149 (2001).
17. T.S. Mysakovych, V.O. Krasnov, I.V. Stasyuk, Condens. Matter Phys. **11**, 663 (2008).
18. I.V. Stasyuk, T.S. Mysakovych, Condens. Matter Phys. **12**, 539 (2009).
19. G.G. Batrouni, R.T.Scalettar, Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992).
20. R. Micnas and S. Robaszkiewicz, Phys. Rev. B **45**, 9900 (1992).
21. G.G. Batrouni, R.T.Scalettar, Phys. Rev. Letters **84**, 1599 (2000).
22. K. Bernardet, G.G. Batrouni, J.-L. Meunier, G. Schmid, M. Troyer, A. Dorneich, Phys. Rev. B **65**, 104519 (2002).
23. K. Bernardet, G.G. Batrouni, M. Troyer, Phys. Rev. B **66**, 054520 (2002).

24. G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich, Phys. Rev. Letters **88**, 167208 (2002).
 25. R. Hassan, E.S. Campbell, J. Chem. Phys. **97**, 4362 (1992).
 26. M. Eckert, G. Zundel, J. Phys. Chem. **92**, 7016 (1988).
 27. I.V. Stasyuk, R.Ya. Stetsiv, Yu.V. Sizonenko, Condens. Matter Phys. **5**, 685 (2002).
 28. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, R.Ya. Stetsiv, Ferroelectrics **426**, 6 (2012).
 29. R. Vlaming, G.S. Uhrig, D. Vollhardt, J. Phys. Cond. Matt. **4**, 7773 (1992).
 30. B. Lorenz, Phys. Stat. Sol. (b) **101**, 297 (1980).
 31. I.V. Stasyuk, O.L. Ivankiv, N.I. Pavlenko, J. Phys. Studies **1**, 418 (1997).
 32. P. Niyaz, R.T. Scalettar, C.Y. Fong, G.G. Batrouni, Phys. Rev. B **50**, 363 (1994).
 33. W. Munch, K.D. Kreuer, U. Traub and J. Maier, Solid State Ionics **77**, 10 (1995).
 34. C. Menotti, N. Trivedi, Phys. Rev. B **77**, 235120 (2008).
 35. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, Ferroelectrics **376**, 64 (2008).
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN: Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>