

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

Одночастинковий спектр та фазовий перехід в іонному провіднику ПАУЛІ

Роботу отримано 4 березня 2008 р.

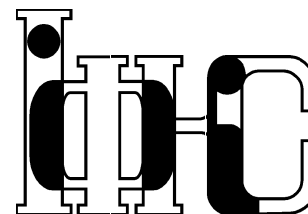
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-08-03U

І. В. Стасюк, І. Р. Дулепа

ОДНОЧАСТИНКОВИЙ СПЕКТР ТА ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД В
ІОННОМУ ПРОВІДНИКУ ПАУЛІ

ЛЬВІВ

УДК: 538.931, 538.911

PACS: 75.10.Pq, 66.30.Dn, 66.10.Ed

Одночастинковий спектр та фазовий перехід в іонному провіднику Паулі

І. В. Стасюк, І. Р. Дулепа

Анотація. Розглянуто просту мікроскопічну модель невзаємодіючих частинок для опису енергетичного спектру іонної підсистеми в іонному провіднику Паулі. Із врахуванням можливості переходу до фази, що містить "конденсат отримано фазову діаграму моделі у наближенні середнього поля. Враховано також температурну залежність параметра перескоку іонів, зумовлену його термічною активацією. Обчислено одночастинковий спектр у наближенні хаотичних фаз. На прикладі квазіодновимірної системи досліджено частотну залежність густини станів у різних фазах у широкому діапазоні температур.

One-particle spectrum and phase transition in ionic Pauli conductor

I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa

Abstract. Microscopic simple noninteracting model for the description of the energy spectrum of ion subsystem in Pauli ionic conductor is considered. Phase diagram of model is obtained with taking into account the possibility of transition into phase, that include "condensate in middle field approximation. The temperature dependence of ionic hopping parameter conditioned it thermal activation is took into account too. The one-particle spectrum is calculated in random phase approximation. The frequency dependence of the density of states in different phases are investigated in wide range of temperature in example of quasi-one-dimensional system.

Подається в Condens. Matter Phys.

Submitted to Condens. Matter Phys.

Вступ

Протягом минулих 30-ти років інтенсивно вивчаються мікроскопічні процеси транспорту частинок у кристалічних іонних провідниках. У багатьох роботах по дослідженню іонної провідності процеси іонного переносу описуються за допомогою моделей типу ґраткового газу у термінах операторів Паулі [1, 2]. Модель ґраткового газу широко застосовується у теоретичних дослідженнях багатьох фізичних процесів, у тому числі, крім іонного (протонного) транспорту, у сенсі процесів інтеркаляції у кристалах, фазових переходів та нестійкостей в іонній підсистемі [3-6]. Основна увага приділяється, з однієї сторони, опису процесів впорядкування та переходів між сегнетоеластичними і суперіонними фазами, а з другої - розрахунку коефіцієнтів електропровідності з врахуванням взаємодій з коливаннями ґратки. Менше дослідженими залишаються особливості енергетичного спектру іонної підсистеми, особливо в області іншого фазового переходу, пов'язаного з появою фази типу бозе-конденсату. Така фаза може з'являтися у системі частинок, що описуються статистикою Паулі, навіть при відсутності прямої міжчастинкової взаємодії [7]. В даній роботі ми розглядаємо просту мікроскопічну модель ґраткового газу частинок Паулі, як перший крок, без взаємодії між ними, для опису енергетичного спектру іонного провідника.

Роль статистики в енергетичному спектрі одновимірної моделі такого типу була проаналізована раніше [8]. На основі числового методу, що базується на процедурі ферміонізації [9], розраховано частотні залежності одночастинкових густин станів. Густина станів газу пауліонів суттєво відрізняється від густин станів невзаємодіючих бозе- (чи фермі-) частинок [8]. Пауліони мають швидше властивості псевдоспінів чи т. зв. "жорстких бозонів" [7]), ніж ферміонів.

Якщо розглядати рух важких іонів (іон, як важкий "жорсткий бозон"), необхідно враховувати термічну активацію, за допомогою, якої іон зможе подолати енергетичний бар'єр при перескоку. Такий ефект був врахований, зокрема, у ґратковій моделі Магана [1]. В роботі [8] термічна активація перескоків на найближчий сусідній вузол при обчисленні одночастинкової густини станів не враховувалася.

В даній роботі розглядається термодинаміка ґраткової моделі іонного провідника без взаємодій. У наближенні середнього поля отримано фазові діаграми, що описують переходи у фази, що містять "конденсат як при нехтуванні так і при врахуванні термічної активації іонних перескоків. Методом функцій Гріна з використанням псевдоспінового представлення знайдено енергетичний спектр тако-

го провідника у наближенні хаотичних фаз. Результати для спектру, отримані з використанням наближених схем, порівнюються з точними [8], знайденими в одновимірному випадку за допомогою процедури ферміонізації.

1. Модель

Опишемо іонний провідник Паулі, використовуючи модель ґраткового газу для не взаємодіючих пауліонів:

$$H = - \sum_{i,j=1}^N t_{ij} b_i^+ b_j + (\varepsilon_0 - \mu) \sum_{i=1}^N n_i, \quad (1.1)$$

b_i^+ , b_i - оператори народження і знищення частинки (іона) на вузлі i (оператори Паулі), ε_0 - локальна енергія частинок на вузлі, μ - хімічний потенціал частинок, t_{ij} - інтеграл переносу. Вузол може бути вільним чи заповнений одним іоном. Переставні співвідношення для операторів, що описують іони на вузлах, є проміжними між випадками фермі та бозе статистик

$$\{b_i, b_i^+\} = 1, [b_i, b_j^+] = [b_i, b_j] = [b_i^+, b_j^+] = 0, (b_i^+)^2 = b_i^2 = 0.$$

Опис заповнення вузла частинкою є еквівалентом до опису перевертоту псевдоспіну. Нехай пустий вузол відповідає спіну орієнтованому вгору, заповнений вузол - спіну вниз; тоді $b_i = S_i^+$, $b_i^+ = S_i^-$. У псевдоспіновому представленні гамільтоніан (1.1) відповідає ізотропній XY моделі:

$$H = - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - (\varepsilon_0 - \mu) \sum_{i=1}^N S_i^z + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu), \quad (1.2)$$

де

$$J_{ij} = t_{ij}, S_i^z = \frac{1}{2} - n_i, S_i^x = \frac{1}{2} (b_i + b_i^+), S_i^y = \frac{1}{2i} (b_i - b_i^+).$$

Розглянемо спочатку дану модель у наближенні середнього поля:

$$H_{MF} = -2J(0) \langle S^x \rangle \sum_{i=1}^N S_i^x - (\varepsilon_0 - \mu) \sum_{i=1}^N S_i^z + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J(0) \langle S^x \rangle^2), \quad (1.3)$$

$$\langle S_i^x \rangle = \langle S^x \rangle, \langle S^y \rangle = 0, \sum_{j=1}^N J_{ij} = J(0).$$

На мові операторів Паулі: $\langle b^+ \rangle = \langle b \rangle = \langle S^x \rangle$. Поворотом спінової системи координат на кут θ :

$$\begin{aligned} S_i^z &= \sigma_i^z \cos \theta + \sigma_i^x \sin \theta, \\ S_i^x &= \sigma_i^x \cos \theta - \sigma_i^z \sin \theta, \\ S_i^y &= \sigma_i^y, \end{aligned} \quad (1.4)$$

(σ_i^α є компоненти псевдоспіну у новій системі) зводимо гамільтоніан до діагонального вигляду:

$$H_{MF} = -E \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J(0) \langle S^x \rangle^2), \quad (1.5)$$

з рівнянням на кут θ :

$$(\varepsilon_0 - \mu) \sin \theta + 2J(0) \langle S^x \rangle \cos \theta = 0.$$

Середні значення:

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \langle \sigma^z \rangle \cos \theta, \langle S^x \rangle = -\langle \sigma^z \rangle \sin \theta, \\ \langle \sigma^z \rangle &= \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta E}{2}\right), \langle n \rangle = \frac{1}{2} - \langle S^z \rangle. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Власні значення гамільтоніана (1.5) характеризуються параметром E , який може бути записаний через середні значення $\langle S^x \rangle$ чи $\langle \sigma^z \rangle$

$$E = (\varepsilon_0 - \mu) \cos \theta - 2J(0) \langle S^x \rangle \sin \theta. \quad (1.7)$$

Розв'язки рівняння (1.6) дають дві фази:

- фаза 1: $\langle S^x \rangle \neq 0$, $E = E_1$,

$$\cos \theta = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{E_1}, \sin \theta = -\frac{2J(0) \langle S^x \rangle}{E_1}, \quad (1.8)$$

де

$$E_1 = \sqrt{4J(0)^2 \langle S^x \rangle^2 + (\varepsilon_0 - \mu)^2}. \quad (1.9)$$

Можемо записати розв'язки даного рівняння у цій фазі через середнє $\langle \sigma^z \rangle$

$$\cos \theta = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2J(0) \langle \sigma^z \rangle}, E_1 = 2J(0) \langle \sigma^z \rangle, \quad (1.10)$$

яке визначається з рівняння

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh(\beta J(0) \langle \sigma_z \rangle), \quad (1.11)$$

в той час як середнє $\langle S^z \rangle$ визначається формулою

$$\langle S^z \rangle \equiv \frac{1}{2} - \langle n \rangle = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2J(0)}. \quad (1.12)$$

Відповідно для $\langle S^x \rangle$ маємо рівняння

$$\langle S^x \rangle^2 - \frac{1}{4} \tanh^2 \left(\beta J(0) \sqrt{\langle S^x \rangle^2 + \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{4J^2(0)}} \right) + \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{4J^2(0)} = 0. \quad (1.13)$$

- фаза 2: $\langle S^x \rangle = 0$, $\sin \theta = 0$, $\cos \theta = 1$, $E = E_2$,
при цьому

$$\langle \sigma_z \rangle = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta E_2}{2}, \quad E_2 = \varepsilon_0 - \mu, \quad \langle S^z \rangle \equiv \frac{1}{2} - \langle n \rangle = \langle \sigma_z \rangle. \quad (1.14)$$

Статистична сума і вільна енергія на один вузол у наближенні середнього поля:

$$Z_{MF} = e^{-\beta \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J(0) \langle S^x \rangle^2)} (2 \cosh(\frac{\beta E}{2}))^N, \quad (1.15)$$

$$f_{MF} = \frac{1}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J(0) \langle S^x \rangle^2) - \frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(\frac{\beta E}{2})). \quad (1.16)$$

Отримані вище рівняння відповідають умові мінімуму вільної енергії $\frac{\partial f_{MF}}{\partial \langle S^x \rangle} = 0$. Рівняння (1.11) і (1.14) дають рівноважні значення для $\langle \sigma^z \rangle$ в обидвох фазах: $\langle S^x \rangle \neq 0$ (впорядкованій); $\langle S^x \rangle = 0$ (невпорядкованій). Рівняння (1.13) визначає залежність параметра $\langle S^x \rangle$ від температури і хімічного потенціалу у впорядкованій фазі.

На рисунку 1 (а) зображено зміну $\langle S^x \rangle$ з температурою при фіксованому значенні $\varepsilon_0 - \mu$. Отримана залежність є у наближенні середнього поля такою ж як і для моделі Ізінга з поперечним полем, роль якого у нас відіграє різниця $\varepsilon_0 - \mu$. Критична температура, при якій фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ зникає, дається співвідношенням $\beta_c = \frac{1}{\varepsilon_0 - \mu} \ln \left(\frac{1 + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J(0)}}{1 - \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J(0)}} \right)$. Маємо фазовий перехід з впорядкованої у невідпорядковану фазу при підвищенні температури. Впорядкована фаза існує, якщо $|\varepsilon_0 - \mu| \leq J(0)$; в границі $\beta \rightarrow \infty$:

$\langle S^x \rangle \rightarrow \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{J^2(0)}}$, $\langle S^z \rangle \rightarrow \pm \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J(0)}$. При цьому $\langle n \rangle \rightarrow 1$, якщо $\mu \rightarrow \varepsilon_0 + J(0)$ і $\langle n \rangle \rightarrow 0$, якщо $\mu \rightarrow \varepsilon_0 - J(0)$.

Розглянемо тепер випадок, коли перескоки частинок є термічно активованими. Для цього запишемо

$$J(0) = \tilde{J} e^{-\beta \Delta}, \quad (1.17)$$

де Δ - енергія активації.

Врахування температурної залежності параметра перескоку не міняє більшості отриманих співвідношень. Як і раніше, система може перебувати у двох фазах; температура переходу між фазами визначається тепер з рівняння

$$\beta = \frac{1}{\varepsilon_0 - \mu} \ln \frac{1 + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{\tilde{J}} e^{\beta \Delta}}{1 - \frac{\varepsilon_0 - \mu}{\tilde{J}} e^{\beta \Delta}}. \quad (1.18)$$

При $\Delta \neq 0$ дане рівняння має два розв'язки; крім високотемпературного переходу при температурі θ_{c1} (що зводиться при $\Delta = 0$ до розгляненого раніше) з'являється ще низькотемпературний в точці θ_{c2} . Впорядкована фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ існує лише в температурному інтервалі $\theta_{c2} < \theta < \theta_{c1}$. Ця ситуація зображена на рисунку 1 (а - с) при різних значеннях різниці $\varepsilon_0 - \mu$ та енергії активації Δ . Температурний інтервал $[\theta_{c2}, \theta_{c1}]$ є найбільшим при $\varepsilon_0 - \mu = 0$. Рівняння для критичних температур (1.18) зводиться при цьому до вигляду

$$\frac{1}{2} \beta \tilde{J} e^{-\beta \Delta} = 1. \quad (1.19)$$

Як можна переконатись, ненульові розв'язки тут існують при $\Delta < \frac{\tilde{J}}{2e} \equiv \Delta_{cr}$ (якщо Δ наближається до критичного значення, то β_{c1} і β_{c2} прямують до $\beta_c^* = \frac{1}{\Delta}$). Якщо $\Delta > \Delta_{cr}$, впорядкована фаза зникає.

Залежність $J(0)$ від температури змінює поведінку і середнього $\langle S^z \rangle$. На рис. 1 (d) подано графіки для $\langle S^z \rangle$ при проходженні через різні фази (в межах впорядкованої фази параметр $\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle n \rangle$ стає при фіксованому $\varepsilon_0 - \mu$ залежним від температури: $\langle S^z \rangle = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2\tilde{J}} e^{\beta \Delta}$).

На рисунку 2 зображено зміну як $\langle S^z \rangle$ так і $\langle S^x \rangle$ з $(\varepsilon_0 - \mu)/J(0)$ при фіксованій температурі. Отримано також температурну залежність $\langle S^x \rangle$ при заданому значенні $\langle n \rangle = \frac{1}{2} - \langle S^z \rangle$ (рисунк 3 (а, б)), розв'язуючи систему рівнянь для $\langle S^x \rangle$ і $\varepsilon_0 - \mu$ при фіксованих зна-

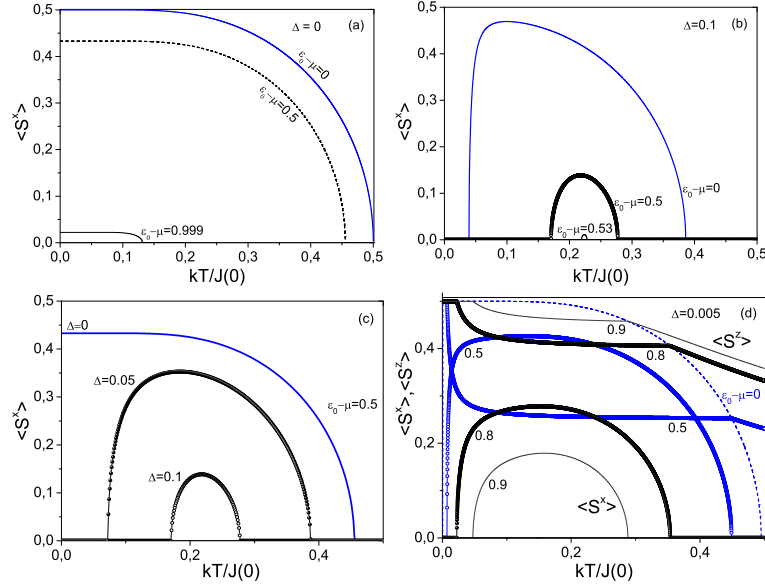


Рис. 1. Поведінка $\langle S^x \rangle$, $\langle S^z \rangle$ при фіксованих значеннях Δ та $\varepsilon_0 - \mu$.

ченнях $\langle S^z \rangle$, Δ :

$$\begin{aligned} \langle S^x \rangle^2 - \frac{1}{4} \tanh^2 \left(\frac{\beta \widetilde{E}_1}{2} \right) + \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{4\widetilde{J}^2} e^{2\beta\Delta} &= 0, \\ \langle S^z \rangle &= \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2\widetilde{E}_1} \tanh \frac{\beta \widetilde{E}_1}{2}, \\ \widetilde{E}_1 &= 2|\widetilde{J}|e^{-\beta\Delta} \sqrt{\langle S^x \rangle^2 + \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{4\widetilde{J}^2} e^{2\beta\Delta}}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Графіки ілюструють область існування фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ в умовах фіксованого числа частинок ($\langle n \rangle = \text{const}$). Область є максимальною, за своїм температурним інтервалом, при половинному заповненні ($\langle n \rangle = \frac{1}{2}$) і зникає при $\langle n \rangle \rightarrow 0$ ($\langle n \rangle \rightarrow 1$). Як згадувалось вище, вона також зникає при перевищенні критичного значення Δ_{cr} енергії активації іонного перескоку.

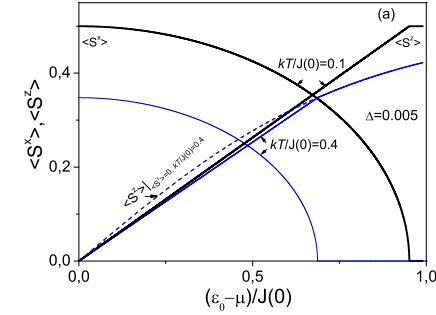


Рис. 2. Поведінка $\langle S^x \rangle$, $\langle S^z \rangle$ із зміною $(\varepsilon_0 - \mu)/J(0)$.

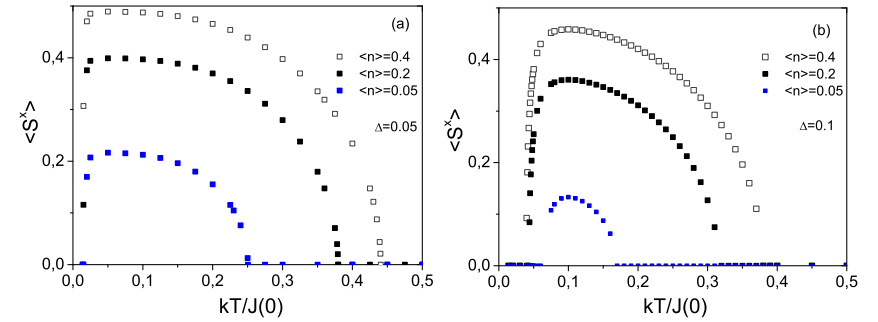


Рис. 3. Температурна залежність $\langle S^x \rangle$ для деяких значень $\langle n \rangle$ ((a) – $\Delta = 0.05$, (b) – $\Delta = 0.1$).

2. Знаходження енергетичного спектру

Одночастинковий енергетичний спектр досліджуваної моделі можна визначити, використовуючи метод функцій Гріна. Знайдемо двочасову температурну функцію Гріна $\langle\langle b_i | b_j^+ \rangle\rangle$:

$$\langle\langle b_i | b_j^+ \rangle\rangle = \langle\langle S_i^x | S_j^x \rangle\rangle - i\langle\langle S_i^x | S_j^y \rangle\rangle + i\langle\langle S_i^y | S_j^x \rangle\rangle + \langle\langle S_i^y | S_j^y \rangle\rangle, \quad (2.1)$$

де, наприклад, після перетворення повороту (1.4)

$$\begin{aligned} \langle\langle S_i^x | S_j^x \rangle\rangle &= \langle\langle \sigma_i^x | \sigma_j^x \rangle\rangle \cos^2 \theta - (\langle\langle \sigma_i^x | \sigma_j^z \rangle\rangle + \langle\langle \sigma_i^z | \sigma_j^x \rangle\rangle) \sin \theta \cos \theta \\ &\quad + \langle\langle \sigma_i^z | \sigma_j^z \rangle\rangle \sin^2 \theta, \end{aligned} \quad (2.2)$$

використовуючи наближення хаотичних фаз повний гамільтоніан (1.2) в операторах псевдоспіну у повернутій системі координат має

ВИГЛЯД

$$H = - \sum_i (\sigma_i^z \cos \theta + \sigma_i^x \sin \theta) (\varepsilon_0 - \mu) - \sum_{ij} J_{ij} (\sigma_i^x \sigma_j^x \cos^2 \theta + \sigma_i^z \sigma_j^z \sin^2 \theta - (\sigma_i^x \sigma_j^z + \sigma_i^z \sigma_j^x) \cos \theta \sin \theta + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu). \quad (2.3)$$

Запишемо рівняння руху для операторів псевдоспіну σ_i^α , роблячи розщеплення у дусі згаданого наближення

$$\begin{aligned} [\sigma_l^x, H] &= i\sigma_l^y (\varepsilon_0 - \mu) \cos \theta + 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_l^y \sin^2 \theta \\ &\quad - 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_j^y = iE \sigma_l^y - 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_j^y, \\ [\sigma_l^y, H] &= i(\varepsilon_0 - \mu) \sigma_l^z \sin \theta - iE \sigma_l^x + 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_j^x \cos^2 \theta \\ &\quad - 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} (\sigma_j^z + \sigma_l^z) \cos \theta \sin \theta, \\ [\sigma_l^z, H] &= 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

де враховано, що $\langle \sigma^x \rangle = 0$, $\langle \sigma^y \rangle = 0$.

Рівняння руху для функцій Гріна $\langle \langle \sigma_l^\alpha | \sigma_{l'}^\beta \rangle \rangle (\alpha, \beta = x, y, z)$:

$$\hbar \omega \langle \langle \sigma_l^\alpha | \sigma_{l'}^\beta \rangle \rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \langle [\sigma_l^\alpha, \sigma_{l'}^\beta] \rangle + \langle \langle \sigma_l^\alpha, H | \sigma_{l'}^\beta \rangle \rangle. \quad (2.5)$$

Оскільки $[\sigma_i^z, H] = 0$, то видно, що $\langle \langle \sigma_l^z | \sigma_{l'}^\alpha \rangle \rangle = 0$, $\langle \langle \sigma_l^\alpha | \sigma_{l'}^z \rangle \rangle = 0$. Тоді

$$\begin{aligned} \langle \langle S_i^x | S_j^x \rangle \rangle &= \langle \langle \sigma_i^x | \sigma_j^x \rangle \rangle \cos^2 \theta, \\ \langle \langle S_i^x | S_j^y \rangle \rangle &= \langle \langle \sigma_i^x | \sigma_j^y \rangle \rangle \cos \theta, \\ \langle \langle S_i^y | S_j^x \rangle \rangle &= \langle \langle \sigma_i^y | \sigma_j^x \rangle \rangle \cos \theta, \\ \langle \langle S_i^y | S_j^y \rangle \rangle &= \langle \langle \sigma_i^y | \sigma_j^y \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Для знаходження функції Гріна $\langle \langle b_i | b_j^+ \rangle \rangle$ отримуємо систему двох пар рівнянь:

для $\langle \langle \sigma_i^x | \sigma_j^x \rangle \rangle$, $\langle \langle \sigma_i^y | \sigma_j^x \rangle \rangle$

$$\begin{aligned} \hbar \omega \langle \langle \sigma_l^x | \sigma_{l'}^x \rangle \rangle &= iE \langle \langle \sigma_l^y | \sigma_{l'}^x \rangle \rangle - 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \langle \langle \sigma_j^y | \sigma_{l'}^x \rangle \rangle, \\ \hbar \omega \langle \langle \sigma_l^y | \sigma_{l'}^x \rangle \rangle &= -i\hbar \frac{\langle \sigma^z \rangle}{2\pi} \delta_{ll'} - iE \langle \langle \sigma_l^x | \sigma_{l'}^x \rangle \rangle + \\ &\quad 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \cos^2 \theta \langle \langle \sigma_j^y | \sigma_{l'}^x \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

і подібно для $\langle \langle \sigma_i^x | \sigma_j^y \rangle \rangle$, $\langle \langle \sigma_i^y | \sigma_j^y \rangle \rangle$. Рівняння для функцій Гріна $\langle \langle \sigma_i^x | \sigma_j^x \rangle \rangle$, $\langle \langle \sigma_i^y | \sigma_j^x \rangle \rangle$ після перетворення Фур'є до хвильових векторів набувають форму:

$$\begin{aligned} \hbar \omega \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx} &= i(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k})) \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx}, \\ \hbar \omega \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx} &= -i\hbar \frac{\langle \sigma^z \rangle}{2\pi} - i(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta) \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx}. \end{aligned}$$

Тут $\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx} = \langle \langle \sigma^x | \sigma^x \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega}$, $\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx} = \langle \langle \sigma^y | \sigma^x \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega}$. В результаті

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx} &= \frac{\hbar}{2\pi} \langle \sigma^z \rangle \frac{E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k})}{\hbar^2 \omega^2 - (E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}))(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta)}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx} &= -i \frac{\hbar}{2\pi} \langle \sigma^z \rangle \frac{\hbar \omega}{\hbar^2 \omega^2 - (E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}))(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta)}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Записуючи рівняння руху для $\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy}$, $\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy}$:

$$\begin{aligned} \hbar \omega \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy} &= -i(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta) \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy}, \\ \hbar \omega \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy} &= i \frac{\hbar}{2\pi} \langle \sigma^z \rangle + i(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k})) \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy}, \end{aligned}$$

отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy} &= i \frac{\hbar}{2\pi} \langle \sigma^z \rangle \frac{\hbar \omega}{\hbar^2 \omega^2 - (E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}))(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta)}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy} &= -\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy} &= \frac{\hbar}{2\pi} \langle \sigma^z \rangle \frac{E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta}{\hbar^2 \omega^2 - (E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}))(E - 2 \langle \sigma^z \rangle J(\mathbf{k}) \cos^2 \theta)}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Отже, функція Гріна $\langle \langle b | b^+ \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega}$

$$\langle \langle b | b^+ \rangle \rangle_{\mathbf{k},\omega} = \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx} \cos^2 \theta - i \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy} \cos \theta + i \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx} \cos \theta + \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy},$$

$$\langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{\hbar}{2\pi} \langle\sigma^z\rangle \frac{E(\cos^2\theta + 1) - 2\hbar\omega \cos\theta - 4\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}) \cos^2\theta}{\hbar^2\omega^2 - (E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}))(E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}) \cos^2\theta)}, \quad (2.10)$$

де параметр E у фазах з $\langle S^x \rangle \neq 0$, $\langle S^x \rangle = 0$, у випадку $\Delta = 0$, дається формулами (1.8), (1.14).

Для фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$, $E = E_1 = 2J(0)\langle\sigma_z\rangle$, отримуємо температурно залежний спектр

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 = 4\sigma_z^2(1 - \gamma_{\mathbf{k}})(1 - \gamma_{\mathbf{k}} \cos^2\theta), \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{J(\mathbf{k})}{J(0)}. \quad (2.11)$$

У фазі $\langle S^x \rangle = 0$:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{E_2}{J(0)} - 2\langle\sigma_z\rangle\gamma_{\mathbf{k}}, \quad (2.12)$$

де $E_2 = \varepsilon_0 - \mu$. Тут, і далі, енергія записується у відношенні до $J(0)$. Для перескоків на найближчі сусідні вузли $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{|R_j|=a} e^{i\mathbf{k}R_j}$.

3. Одночастинкова густина станів

Перепишемо для зручності формулу (2.10) для функції Гріна у вигляді

$$\langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{\hbar}{2\pi} \langle\sigma^z\rangle \left[\frac{\cos\theta + \frac{c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{\cos\theta - \frac{c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right], \quad (3.1)$$

де $c_{\mathbf{k}} = \frac{E}{J(0)}(\cos^2\theta + 1) - 4\langle\sigma_z\rangle\gamma_{\mathbf{k}} \cos^2\theta$, що дозволяє легко знайти одночастинкову густину станів $\rho_{\mathbf{k}}(\omega)$

$$\rho_{\mathbf{k}}(\omega) = -2\text{Im}\langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k},\hbar\omega+i\delta}, \quad \delta \rightarrow 0. \quad (3.2)$$

Отримуємо

$$\rho_{\mathbf{k}}(\omega) = \left[\langle S^z \rangle + \frac{\langle\sigma^z\rangle}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}} \right] \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}\right) + \left[\langle S^z \rangle - \frac{\langle\sigma^z\rangle}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}} \right] \delta\left(\omega + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}\right), \quad (3.3)$$

тоді густина станів з розрахунку на один вузол ґратки:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\omega). \quad (3.4)$$

Введемо функцію

$$\rho_0(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta\left(z - \frac{J(\mathbf{k})}{J(0)}\right), \quad (3.5)$$

тоді

$$\rho(\omega) = \int (\mathcal{F}_+(\omega, z) + \mathcal{F}_-(\omega, z)) \rho_0(z) dz, \quad (3.6)$$

де функція $\mathcal{F}_{\pm}(\omega, \gamma_{\mathbf{k}})$ має вигляд

$$\mathcal{F}_{\pm}(\omega, \gamma_{\mathbf{k}}) = \left[\langle S^z \rangle \pm \langle\sigma^z\rangle \frac{c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right] \delta(\omega \mp \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (3.7)$$

Обчислимо одновузлову густину станів у квазіодновимірному випадку. Тут з метою ілюстрації обмежимося найпростішою формою функції $\rho_0(z)$, апроксимуючи виразом, що відповідає врахуванню перескоків на сусідні вузли тільки вздовж одного напрямку

$$\rho_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\delta(x)}{\sqrt{1 - (z - x)^2}} dx = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}}, \quad |z| < 1. \quad (3.8)$$

Кінцевий вираз для одновузлової густини станів у цьому випадку буде

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\mathcal{F}_+(\omega, z) + \mathcal{F}_-(\omega, z)}{\sqrt{1 - z^2}} dz, \quad (3.9)$$

δ -функцію у $\mathcal{F}_{\pm}(\omega, z)$ візьмемо при числових розрахунках у вигляді границі розподілу Лоренца $\delta(\omega \mp \varepsilon_k) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\omega \mp \varepsilon_k)^2}$. На рисунку 4 (а, б) представлено одновузлову густину станів (3.9) для значень $\varepsilon_0 - \mu$, вказаних на графіках у двох фазах: $\langle S^x \rangle \neq 0$ (а) ($\beta > \beta_c$), $\langle S^x \rangle = 0$ (б) ($\beta < \beta_c$) ($\varepsilon_0 - \mu = 0.8$, $\beta_c = 2.75$; $\varepsilon_0 - \mu = 0.5$, $\beta_c = 2.2$; $\varepsilon_0 - \mu = 0.3$, $\beta_c = 2.06$; $\varepsilon_0 - \mu = 0.1$, $\beta_c = 2.01$).

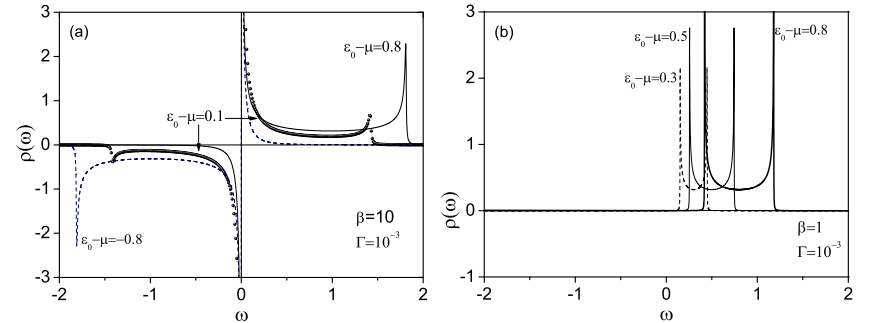


Рис. 4. Одновузлова густина станів для деяких значень $\varepsilon_0 - \mu$ у фазах: а - $\langle S^x \rangle \neq 0$; б - $\langle S^x \rangle = 0$.

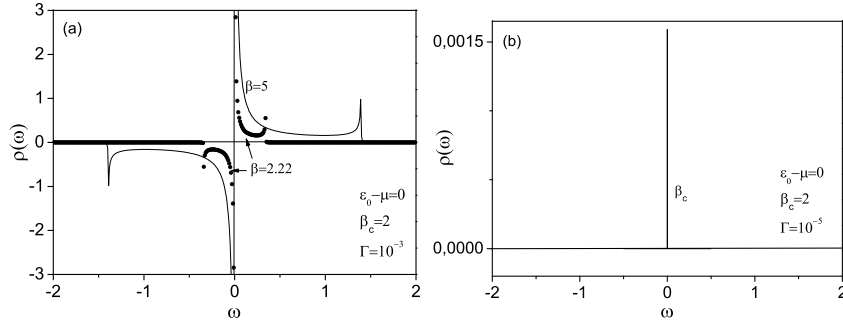


Рис. 5. Одновузлова густина станів у випадку $\varepsilon_0 - \mu = 0$: а - фаза $\langle S^x \rangle \neq 0, \beta > \beta_c$; б - $\beta = \beta_c$.

Одновузлова густина станів у випадку $\varepsilon_0 - \mu = 0$ (рисунок 5 (а, б)) відмінна від нуля у впорядкованій фазі ($\langle S^x \rangle \neq 0$) і має характер δ -функції на частоті $\omega = 0$ у точці переходу.

Одновузлову густину станів для фаз $\langle S^x \rangle \neq 0, \langle S^x \rangle = 0$, а також у точці фазового переходу представлено на рисунку 6 (а, б, с) для $\varepsilon_0 - \mu = 0.5$. Спостерігаємо перебудову її форми при переході з впорядкованої у неупорядковану фазу з підвищенням температури. У критичній точці і при $\beta < \beta_c$ (у неупорядкованій фазі) одновузлова густина станів визначена лише у додатньому діапазоні частот. У критичній точці $E = E_1 = E_2$ і спектр має вигляд $\varepsilon_k = \frac{E}{J(0)}(1 - \gamma_k)$. Тут отримується аналітичний вираз для $\rho(\omega)$

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{2J(0)\langle \sigma_z \rangle}{\sqrt{E^2 - (\omega - (\varepsilon_0 - \mu))^2}}. \quad (3.10)$$

Числові результати для $\rho(\omega)$ (3.9) (рис. 5 (б), 6(б)) у критичній точці збігаються з аналітичним (3.10).

Висновки

Граткова модель іонного провідника, де частинки описуються статистикою Паулі, володіє навіть при відсутності міжчастинкової взаємодії фазовим переходом до стану, в якому $\langle b \rangle = \langle b^+ \rangle = \langle S^x \rangle \neq 0$. Такий стан є аналогом фази з гратковим конденсатом т. зв. "жорстких бозонів" що досліджувалось у ряді робіт (див. [7]), починаючи з модельного опису поведінки рідкого He^4 . В даній роботі показано, що у випадку температурно залежного параметра іонного перескоку

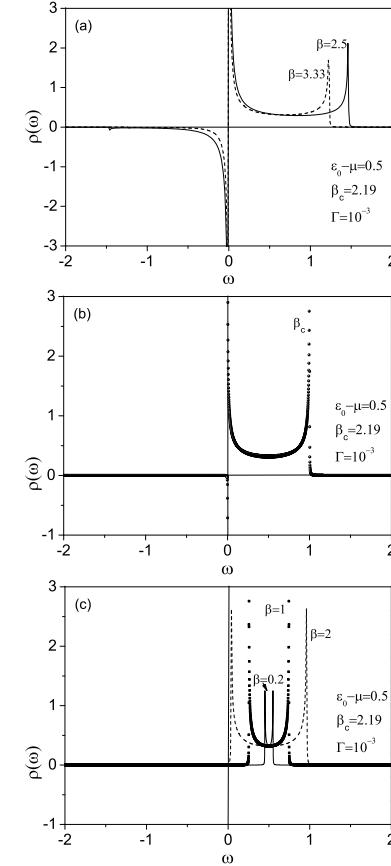


Рис. 6. Одновузлова густина станів: а - фаза $\langle S^x \rangle \neq 0, \beta > \beta_c$; б - $\beta = \beta_c$; с - фаза $\langle S^x \rangle = 0, \beta < \beta_c$.

J (відповідно до термічно активованого механізму, де $J(0) = \tilde{J}e^{-\beta\Delta}$) фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ виникає у проміжній області температур, що знаходиться між двома критичними точками. У наближенні середнього поля побудовано відповідні фазові діаграми при різних значеннях хімічного потенціалу частинок та при заданих їх концентраціях.

З використанням наближення хаотичних фаз знайдено у рамках методу двочасових функцій Гріна одночастинковий енергетичний спектр та розраховано одновузлову функцію густини станів $\rho(\omega)$. Частотні залежності $\rho(\omega)$ у неупорядкованій фазі ($\langle S^x \rangle = 0$) та фазі з конденсатом ($\langle S^x \rangle \neq 0$) проілюстровано на прикладі квазіодновимірної системи. Отримані графіки якісно узгоджуються з точними залежностями густини станів від частоти, розрахованими на основі процедури ферміонізації [8]. Є однак суттєва відмінність, пов'язана з тим, що в одновимірному випадку при $T \neq 0$ немає фазового переходу і перебудова функції $\rho(\omega)$ з температурою має плавний характер.

Отриманий енергетичний спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ для обидвох фаз відповідає знайденому у роботах Міцнаса, Робашкевича та ін. [7, 10]. При малих значеннях хвильового вектора $\varepsilon_{\mathbf{k}} \sim \mathbf{k}^2$ у неупорядкованій фазі і $\varepsilon_{\mathbf{k}} \sim |\mathbf{k}|$ у фазі з $\langle S^x \rangle \neq 0$.

Література

1. G. D. Mahan, Phys. Rev. B, **14**, 2, 793 (1976).
2. T. Tomoyose, J. Phys. Jap. Soc., 1997, **66**, 8, 2385.
3. I. V. Stasyuk, O. L. Ivankiv, N. I. Pavlenko, J. Phys. Stud., 1997, **1**, 418.
4. I. V. Stasyuk, N. I. Pavlenko, J. Chem. Phys., 2001, **114**, 10, 4607.
5. I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, B. Hilczner, Solid State Ionics, 2001, **145**, 211.
6. Yu. I. Dublenych, Phys. Rev. B., 2005, **71**, 012411.
7. R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, Rev. Modern Phys., 1990, **62**, 1, 170.
8. I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa, Condens. Matter Phys., 2007, **10**, 2(50), 268.
9. O. Derzhko, T. Krokhmal'skii, Phys. Stat. Sol. B, 1998, **208**, 221.
10. R. Micnas, S. Robaszkiewicz, Phys. Rev. B, 1990, **45**, 17, 45.

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
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzhirelo"

EDITOR IN CHIEF:

Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Myrghod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *Lviv*; 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)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>