

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-24-01U

Р.Я. Стеців, О.Я. Фаренюк

СТРУКТУРНИЙ І ДИНАМІЧНИЙ СТРУКТУРНИЙ
ФАКТОРИ
ОДНОВИМІРНИХ ЙОННИХ ПРОВІДНИКІВ

УДК: 538.931; 538.911

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

Структурний і динамічний структурний фактори одновимірних йонних провідників

Р.Я. Стеців, О.Я. Фаренюк

Анотація. Методом точної діагоналізації в рамках розширеної моделі жорстких бозонів розраховано енергетичний спектр одновимірного скінченного йонного провідника з періодичними граничними умовами. Досліджено одночастинкову кореляцію, розраховано структурний і динамічний структурний фактори при температурі $T = 0$. Показано наявність далекосяжної одночастинкової кореляції в фазі типу суперфлюїду (SF). Отримані максимуми структурного фактора при хвильовому векторі $k = \pi/a$ при половинному заповненні йонних позицій (густина $\rho = 0.5$) підтверджують наявність впорядкованої модульованої (CDW) фази при $\rho = 0.5$. Наявність максимумів динамічного структурного фактора в області низьких частот при $\rho = 0.25$ підтверджує можливість існування фази типу суперфлюїду (SF).

Structure factor and dynamic structure factor of one-dimensional ion conductors

R.Ya. Stetsiv, O.Ya. Farenjuk

Abstract. The energy spectrum of a one-dimensional finite ionic conductor with periodic boundary conditions was calculated within the framework of the extended hard-core boson lattice model using the exact diagonalization technique. The single-particle correlation was investigated in this research, and structure and dynamic structure factors at temperature $T = 0$ were calculated. The presence of long-range single-particle correlation in the superfluid-type phase is shown. The presence of an ordered modulated (CDW) phase at $\rho = 0.5$ is confirmed by the obtained maxima of the structural factor at $k = \pi/a$ for the half-filled ion positions (density $\rho = 0.5$).

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2024
Institute for Condensed Matter Physics 2024

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/>)

Роман Ярославович Стеців, Олег Ярославович Фаренюк

СТРУКТУРНИЙ І ДИНАМІЧНИЙ СТРУКТУРНИЙ ФАКТОРИ
ОДНОВИМІРНИХ ЙОННИХ ПРОВІДНИКІВ

Роботу отримано 16 квітня 2024 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

1. Вступ

Протягом останніх десятиліть спостерігаємо зростання зацікавленості системами низької розмірності, традиційно в фізиці конденсованих середовищ, а нещодавно і в фізиці квантових газів. Останні досягнення в атомній хвилеводній технології [1–5], реалізація квантових газів у дуже анізотропних пастках [6, 7], отримання бозе-конденсату Ейнштейна (БЕК) на оптичних ґратках [8–10], дозволило експериментаторам отримати багато різноманітних систем, де зниження розмірності спричиняє появу особливих властивостей. Особливо цікавим є випадок, коли квантова динаміка системи стає квазіодновимірною. Ця робота є продовженням попередніх наших досліджень фізичних властивостей одновимірних йонних провідників. В попередніх наших роботах встановлені ділянки існування різних фаз для одновимірних йонних провідників в залежності від величини взаємодії між йонами [11–14]. Показано можливість появи фази типу суперфлюїду (SF) (фаза з безмежно великою (розбіжною) довжиною кореляції між частинками). Були проведені розрахунки динамічної і статичної провідності [15].

Квантову систему взаємодіючих частинок можна характеризувати аналізом її реакції на слабе збурення. У рамках теорії лінійного відгуку, ключовою величиною є динамічний структурний фактор, який є Фур'є-перетворенням просторово-часової кореляційної функції густина-густина. Знання динамічного структурного фактору дає повну картину появи квазічастинкових мод, енергію їх збурення, час життя та середню заселеність. Ці моди визначають колективні флуктуації густини системи, а також можуть характеризувати критичну поведінку поблизу фазового переходу (див. наприклад [16–18]). У конденсованому середовищі динамічний структурний фактор можна виміряти за допомогою непружного розсіювання нейтронів.

В цій праці проведено розрахунки структурного і динамічного структурного факторів. Теоретичний опис систем з йонною провідністю, в основному, ґрунтується на ґраткових моделях. Частина з них трактує іони як фермі-частинки, хоча послідовніше описувати йони за допомогою “змішаної” статистики Паулі [12, 19–31], у якій частинки, з одного боку, мають бозонну природу, а з іншого – підлягають правилам заборони Фермі. Ґраткова модель частинок Паулі подібна до моделі Бозе-Габбарда в наближенні “жорстких” бозонів (за обмеження на числа заповнення $n_i = 0, 1$) (НСВ). Жорсткі бозони були реалізовані експериментально, за наявності решітки вздовж

1D труб [32].

В цій праці, використовуючи метод точної діагоналізації для скінченних одновимірних йонних провідників з періодичними граничними умовами, в рамках підходу жорстких бозонів, розраховано енергетичний спектр, досліджено одночастинкову кореляцію, розраховано структурний і динамічний структурний фактори при температурі $T = 0$. Досліджено залежність динамічного структурного фактора від хвильового вектора і частоти в різних фазах йонного провідника.

2. Модель

Йонні провідники ми описуємо квантовою ґратковою моделлю в наближенні жорстких бозонів. Розглядаємо одновимірний кластер з N позиціями для йона з періодичними граничними умовами. Гамільтоніан цієї моделі для ланцюжкової структури (яку тут розглядаємо) можна записати так:

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

Модель враховує переміщення йонів між сусідніми позиціями (параметр перенесення t) і короткосяжну відштовхувальну взаємодію між йонами, що заселяють сусідні позиції (параметр взаємодії V), а також модульовальне поле A . Поле A сприяє модуляції у просторовому розподілі йонів у т.зв. впорядкованій фазі (існування такої фази при низьких температурах є характерною рисою суперйонних провідників).

Тут оператори $c_i, (c_i^+)$, є операторами жорстких бозонів, (операторами частинок Паулі). Вони описують процес знищення (народження) частинки в позиції i , $n_i = c_i^+ c_i$ є заселеність цієї позиції (тут власні значення n_i дорівнюють 0 чи 1). Оператори народження і знищення частинок Паулі, що відносяться до різних позицій, комутують, що є властивим для бозонів:

$$[c_k, c_m^+] = [c_k, c_m] = [c_k^+, c_m^+] = 0, k \neq m, \quad (2)$$

В одній і цій же позиції ці оператори задовільняють антикомутаційні співвідношення типові для ферміонів:

$$\{c_m, c_m^+\} = 1, c_m^{+2} = c_m^2 = 0. \quad (3)$$

3. Основні співвідношення

Енергетичний спектр ланцюжкової структури з періодичними граничними умовами розраховано методом точної діагоналізації. Для ланцюжка із N позиціями в основній області вводимо багаточастинкові стани $|n_1, n_2 \dots n_N\rangle$. Матриця гамільтоніана як і матриці c_i і c_i^+ будуються на базисі цих станів. Матриця гамільтоніану на базі цих станів діагоналізується числовим способом. Це відповідає перетворенню:

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

де λ_p – власні значення гамільтоніана, \tilde{X}^{pp} – оператори Хаббарда. \tilde{X}^{pp} – проєкційний оператор на стан p , оператор $\tilde{X}^{pq} = |p\rangle\langle q|$ переводить стан $|q\rangle$ у стан $|p\rangle$ (див. [33], а також [34]). Таке ж перетворення застосовуємо до операторів народження і знищення частинок у позиції i на ланцюжку:

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

де коефіцієнти A_{pq}^i є матричними елементами оператора c_i на новому базисі.

Для характеристики різних фаз необхідно провести розрахунок ряду фізичних величин. Поява далекого порядку вказує на наявність впорядкованої фази (фази “solid”) (зокрема фази charge density waves, CDW, отриманої нами в попередніх працях [12, 14]). Стан ізолятора засвідчує також поява щілини в спектрі. Важливою характеристикою такої фази є кореляційна функція густина-густина:

$$b(l) = \langle n_{j+l} n_j \rangle, \quad (6)$$

і відмінний від нуля структурний фактор $S(k)$, що є її Фур’є образом:

$$S(k) = \frac{1}{N^2} \sum_{lm} e^{ik(R_l - R_m)} \langle n_l n_m \rangle, \quad (7)$$

з розрахунку на одну позицію ґратки.

Стан системи характеризується також одночастинковими кореляціями:

$$\rho_{lm} = \langle c_l^+ c_m \rangle, \quad (8)$$

і відповідним Фур'є образом:

$$n(k) = \frac{1}{N^2} \sum_{lm} e^{ik(R_l - R_m)} \langle c_l^+ c_m \rangle. \quad (9)$$

Динамічний структурний фактор визначаємо наступним чином (див. наприклад [18, 34, 35]):

$$S(k, \omega) = \langle \langle \rho_k | \rho_{-k} \rangle \rangle_\omega, \quad (10)$$

як Фур'є образ двочасової температурної функції Гріна. Тут:

$$\rho_k = \frac{1}{N} \sum_j n_j e^{ik(R_j)}. \quad (11)$$

В представленні вторинного квантування:

$$\rho_k = \sum_q c_{q+k}^+ c_q, \quad (12)$$

оператор ρ_k описує збудження всієї системи з хвильовим вектором k , перехід частинок зі стану з квазіімпульсом q до стану з квазіімпульсом $q + k$. В результаті отримуємо:

$$S(k, \omega) = \frac{1}{N^2} \sum_{jl} e^{ik(R_j - R_l)} \langle \langle n_j | n_l \rangle \rangle_\omega. \quad (13)$$

Методом рівнянь руху отримано функцію Гріна $\langle \langle n_j | n_l \rangle \rangle_\omega$ системи, що описується гамільтоніаном (1), а також отримані вирази для відповідних середніх в формулах (9), (7). В результаті маємо:

$$n(k) = \frac{1}{N^2} \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^N e^{ik(R_j - R_s)} \sum_{pq} A_{pq}^{s*} A_{pq}^j e^{-\beta \lambda_q}. \quad (14)$$

Структурний фактор:

$$S(k) = \frac{1}{N^2} \frac{1}{Z} \sum_{m=1}^N \sum_{j=1}^N e^{ik(R_j - R_m)} \sum_{rq} A_{pr}^{j*} A_{pq}^j \sum_n A_{nq}^{m*} A_{nr}^m e^{-\beta \lambda_r}. \quad (15)$$

Динамічний структурний фактор:

$$S(k, \omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{1}{N^2} \frac{1}{Z} \sum_{m=1}^N \sum_{j=1}^N e^{ik(R_j - R_m)} \sum_{rq} A_{pr}^{j*} A_{pq}^j \sum_n A_{nq}^{m*} A_{nr}^m \frac{e^{-\beta \lambda_r} - e^{-\beta \lambda_q}}{\hbar \omega - (\lambda_q - \lambda_r)}. \quad (16)$$

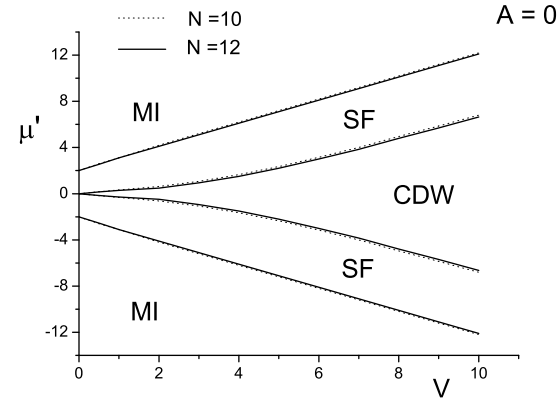


Рис. 1. Фазова діаграма одновимірного йонного провідника в (μ', V) координатах, $(T = 0)$ [37].

Для більш детального аналізу отриманих в цій праці результатів на рисунках 1, 2 наведені деякі з отриманих раніше фазових діаграм для моделі йонного провідника, описаної вище [36, 37], і в даній праці представлені розрахунки характеристик (14), (15), (16) при параметрах моделі, що є відповідними цим діаграмам.

Ці фазові діаграми були отримані для випадків $N = 10$ і $N = 12$. На Рис. 1 фазова діаграма є в координатах (μ', V) при $A = 0$. Розрахунки показують, що різниця в розташуванні границі між фазами (в μ' координатах), для випадків $N = 10$ і $N = 12$, складає 2 – 3 відсотки. Для випадку фазової діаграми в (μ', A) координатах, (тут $V = 0$), (Рис. 2), ця різниця складає лише 0.5 відсотків і ця діаграма збігається з точною фазовою діаграмою, отриманою аналітично в працях [24, 26]. Точний аналітичний розв'язок отриманий застосуванням перетворення Йордана-Вігнера, яке робить можливим перехід від Гамільтоніану жорстких бозонів до Гамільтоніану невзаємодіючих безспінових ферміонів (лише в одновимірному випадку і лише при $V = 0$). На цих діаграмах ми отримали, що ширина області CDW фази (в μ' координатах) зростає як зі збільшенням величини короткосяжної взаємодії V (див. Рис. 1), так і величини модулювального поля A (див. Рис. 2). В останньому випадку ми отримали лінійну залежність від поля A (лінії, що розділяють CDW і SF фази мають вигляд $\mu' = A$ і $\mu' = -A$).

Числові значення всіх енергетичних параметрів, (включаючи $\hbar\omega$),

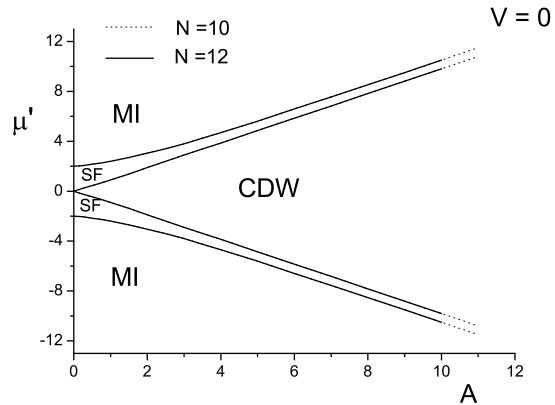


Рис. 2. Фазова діаграма одновимірного йонного провідника в (μ', A) координатах, $(T = 0)$ [37].

подаються у відношенні до параметра переносу t , і є безрозмірними. Експериментальні дані, квантово-хімічні розрахунки, напівемпіричні теоретичні оцінки пропонують широку область значень величини короткосяжної взаємодії між йонами, $V = 3 * 10^3 \dots 10^4 \text{cm}^{-1}$, в залежності від об'єктів, які розглядаються [38–40]. Параметр переносу t набуває значень в межах $40 \dots 2500 \text{cm}^{-1}$. Значення константи короткосяжної кореляції між частинками ми міняли в широких межах: $V/t = 0, 1, \dots, 10$. Для зручності введено величину $\mu' = \mu - V$. Всі розрахунки виконано для ланцюжка із $N = 12$ і температури рівної нулевій $(T = 0)$.

4. Структурний фактор

Розрахунки структурного фактора $S(k)$ проведені за співвідношенням (15). Стосовно величини $n(k)$, то ефективніше досліджувати уніфіковану характеристику, тому у виразі (14) слід не враховувати доданки з $R_j = R_s$, що в сумі визначають середню заселеність йонних позицій поділену на число позицій N і є однаковими для всіх значень хвильового вектора. Таким чином ми розраховували $n'(k)$:

$$n'(k) = \frac{1}{N^2} \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^N e^{ik(R_j - R_s)} \sum_{pq} A_{pq}^{s*} A_{pq}^j e^{-\beta \lambda_q}. \quad (17)$$

Нами отримано пік в $n'(k)$ при $k = 0$ і $k = \pi/a$ в фазі типу суперфлюїду (superfluid phase *SF*), що вказує на далекоюсяжну одночастинкову кореляцію (тут a стала гратки). На Рис. 3 показана отримана залежність $n'(k)$ від хвильового вектора в околі $k = \pi/a$ в *SF* фазі і у впорядкованій, модульованій *CDW* фазі при різних значеннях величини взаємодії між частинками V і різних значеннях величини модульовального поля A . При розрахунках ми обмежилися випадком $N = 12$. Ми не отримуємо розбіжність $n'(k)$ при $k \rightarrow 0$ із-за невеликого розміру ланцюжкової структури, яка тут розглядається. В попередніх наших працях, (див. наприклад [12, 36]), було показано, що в одновимірному випадку, який в нас розглядається, *CDW* – фаза реалізується лише при половинному заповненні йонних позицій (густина $\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle n_i \rangle = 0.5$); при $\rho = 0$ і $\rho = 1$ маємо стан мотівського діелектрика (*MI*), при решта проміжних густини нами отримано *SF* фазу. Між описаними вище фазами маємо квантові фазові переходи при $T = 0$, тобто зміну основного стану системи при зміні деяких параметрів. На рисунку 3 *SF* фаза представлена при густині $\rho = 0.25$, при якій в більшості випадків нами отримано максимальні значення $n'(k)$ при $k = 0$ і $k = \pi/a$.

На Рис. 4 представлена залежність $n'(k = \pi/a)$ від хімічного потенціалу μ' , що дає змогу бачити зміну величини цієї характеристики при $k = \pi/a$ в різних фазах і прямо порівняти з фазовими діаграмами, що є на рисунках 1, 2.

Отримані максимуми $n'(k = \pi/a)$ в *SF* фазі і мінімальні значення в *CDW* фазі. При наявності модульовального поля A максимуми вужчі, як і межі області *SF* фази. Зокрема, як приклад, при $A = 5$ ($V = 0$) (див. рисунки 2 і відповідно 4) *SF* фаза є в вузьких межах $-5.6 < \mu' < -4.86$ і $4.86 < \mu' < 5.6$, тоді як *CDW* фаза займає широку область $-4.86 < \mu' < 4.86$, яка відповідає щілині в спектрі, і на всьому цьому проміжку середня заселеність йонних позицій рівна $1/2$, ($\rho = 0.5$). Оптимальніше має вигляд залежність $n'(k = \pi/a)$ від густини ρ (рисунок 5).

Тут, знову ж, при $\rho = 0.5$, чіткіше виділяється *CDW* фаза за наявності модульовального поля A .

Наявність як короткосяжної відштовхувальної взаємодії між йонами, що заселяють сусідні позиції (V), так і модульовального поля (A), навіть як завгодно малими за величиною, приводить до утворення щілини в спектрі і, відповідно, до появи *CDW* фази при половинному заповненні йонних позицій (див. фазові діаграми, рисунки 1, 2). Поле A значно сильніше розширює область *CDW* фази (в ко-

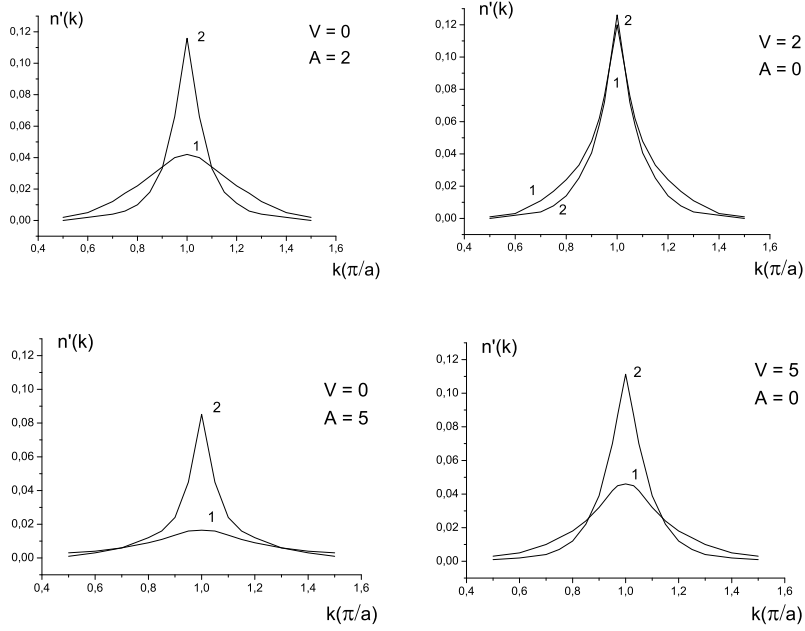


Рис. 3. Залежність $n'(k)$ від хвильового вектора. Зліва при $V = 0$, $A = 2$ і $A = 5$, праворуч $A = 0$, $V = 2$ і $V = 5$. На всіх графіках крива 1 – в CDW -фазі ($\rho = 0.5$), крива 2 – в SF -фазі ($\rho = 0.25$)

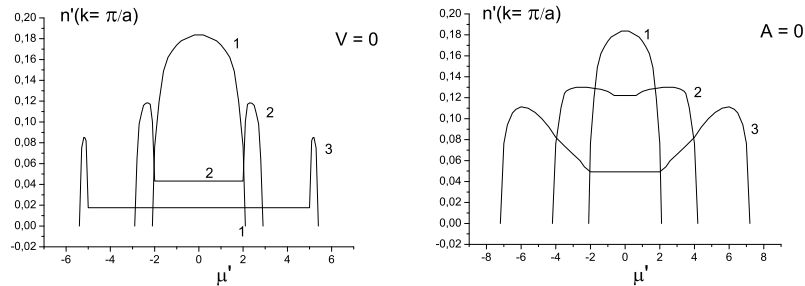


Рис. 4. Залежність $n'(k = \pi/a)$ від хімічного потенціалу μ' . Зліва криві 1; 2; 3, відповідно, при $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); праворуч криві 1; 2; 3, відповідно, при $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$).

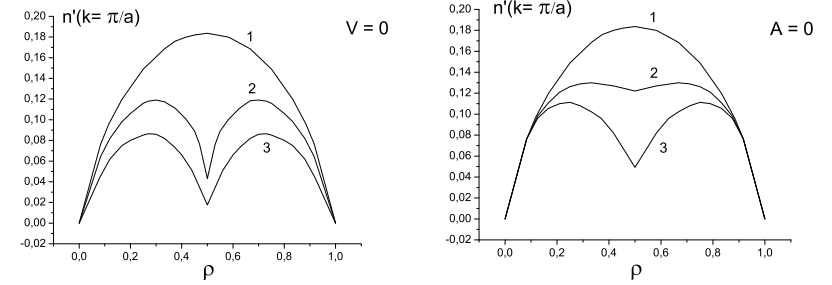


Рис. 5. Залежність $n'(k = \pi/a)$ від густини ρ . Зліва криві 1; 2; 3 відповідно при $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); праворуч криві 1; 2; 3 відповідно при $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$).

ординатах μ') і пригнічує SF фазу, ніж короткосяжна взаємодія між частинками V . Очевидно, саме тому ми отримали (див. рисунки 3–5), що зростання величини поля A приводить до значнішого зменшення далекосяжної кореляції між частинками $n'(k = \pi/a)$ ніж відповідне збільшення взаємодії між частинками V .

В даній праці представлені розрахунки структурного фактора $S(k)$ при хвильовому векторі $k = \pi/a$, який характеризує впорядковану CDW фазу (модульована структура, “шахове” впорядкування, checkerboard order). На Рис. 6 представлена отримана залежність $S(k = \pi/a)$ від густини ρ .

Отриманий максимум $S(k = \pi/a)$ при $\rho = 0.5$ підтверджує наявність впорядкованої, модульованої структури, CDW фази. Також, підтверджується те, що наявність модульовального поля A значно більше сприяє утворенню модульованої структури, ніж взаємодія V . На Рис. 7 показано залежність максимуму $S(k = \pi/a)$, який є при густині $\rho = 0.5$, від поля A і взаємодії між частинками V .

При $A = 10$ ($V = 0$), крива вже виходить на насичення, тоді як при $V = 10$ ($A = 0$) такого не спостерігаємо. Згідно наших розрахунків для виходу кривої на насичення потрібна величина взаємодії $V > 20$.

5. Динамічний структурний фактор

Динамічний структурний фактор $S(k, \omega)$ розраховуємо за співвідношенням (16). Частотна залежність $S(k, \omega)$ має дискретну структуру

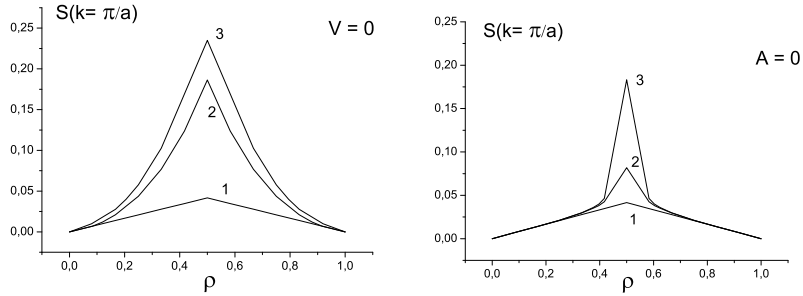


Рис. 6. Залежність структурного фактора $S(k = \pi/a)$ від густини ρ . Зліва криві 1; 2; 3, відповідно, при $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); праворуч криві 1; 2; 3, відповідно, при $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$).

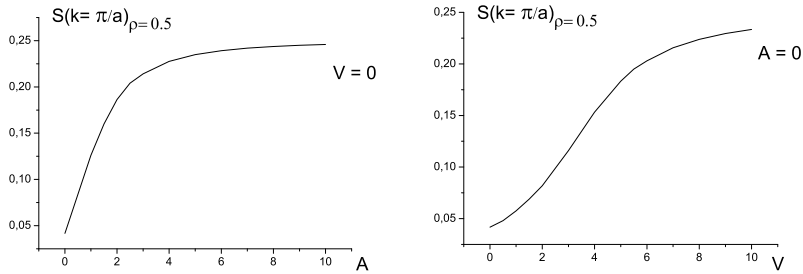


Рис. 7. Залежність структурного фактора $S(k = \pi/a)$ при густині $\rho = 0.5$ від модульовального поля A ($V = 0$); і від взаємодії між частинками V ($A = 0$).

та містять ряд δ -піків у зв'язку з скінченим розміром ланцюжка. При розрахунках ми обмежилися випадком $N = 12$. Введено також малий параметр Δ для розширення δ -піків згідно розподілу Лоренца $\delta(\hbar\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\hbar\omega)^2 + \Delta^2}$. В даній праці Δ взято рівним $\Delta = 0.15$ в безрозмірних енергетичних одиницях. На рисунках 8–10 представлено результати розрахунку залежності $S(k, \omega)$ від хвильового вектора і частоти в різних фазах і при різних значеннях короткосяжної взаємодії між частинками V і модульовального поля A . На рисунку 8 представлено $S(k, \omega)$ в модульованій CDW фазі ($\rho = 0.5$) для випадків $V = 0$; $A = 2$ і $A = 5$. На відповідній фазовій діаграмі (див. рис. 2) це відповідає $\mu' = 0$ і відповідно $A = 2$ чи $A = 5$. Для обидвох випадків отримано широкий максимум, який представляє собою групу піків, в області частот, що за енергією відповідають ширині забороненої зони в спектрі E_g , яку легко бачити на відповідній фазовій діаграмі. Одночастинкові спектральні густини, з використанням яких будувалися фазові діаграми (див. [12, 36, 37]) і динамічний структурний фактор $S(k, \omega)$ мають взагалі різні особливості. $S(k, \omega)$ визначається двочастинковими переходами.

Для випадку $A = 2$, група піків є на проміжку $4 < \hbar\omega < 6$, для $A = 5$ на проміжку $10 < \hbar\omega < 11$ (всі енергії в одиницях t). Як видно з Рис. 8, положення отриманих груп піків практично не залежить від хвильового вектора k , але зі зростанням k , в межах $0 \leq k \leq \pi/a$, відбувається перерозподіл інтенсивностей піків всередині груп і інтенсивність їх зростає, починаючи від $k = 0$, де $S(k = 0, \omega) = 0$. Низькочастотних піків нема. Аналіз енергетичного спектру системи в CDW фазі свідчить, що в спектрі відсутні низькоенергетичні збуджені стани. При $T = 0$ маємо переходи лише з основного стану в збуджені стани. Натомість, в SF -фазі (див. Рис. 9), отримано низькочастотні піки, що є підтвердженням можливості наявності такої фази. Відповідно, і в енергетичному спектрі ми маємо наявність низькоенергетичних збуджених станів, в які можливі переходи з основного стану системи. Правила відбору, які визначаються матрицями A_{lm} , регулюють, в які стани відбуваються переходи. На Рис. 9 представлено $S(k, \omega)$ в SF -фазі для цих же параметрів $V = 0$; $A = 2$ і $A = 5$, але тут $\rho = 0.25$, що на діаграмі (див. рис. 2) відповідає $\mu' = -2.4$ для $A = 2$ і $\mu' = -5.2$ для $A = 5$. В SF -фазі нами отриманий максимум $S(k, \omega)$ і у високочастотній області, де спостерігався максимум в CDW фазі, але тут він значно вузьчий. Інтенсивності піків, що формують цей максимум, суттєво менші ніж інтенсивності низькочастотних піків. Як і у випадку CDW фази положення максимуму слабо залежить від хвильового вектора k .

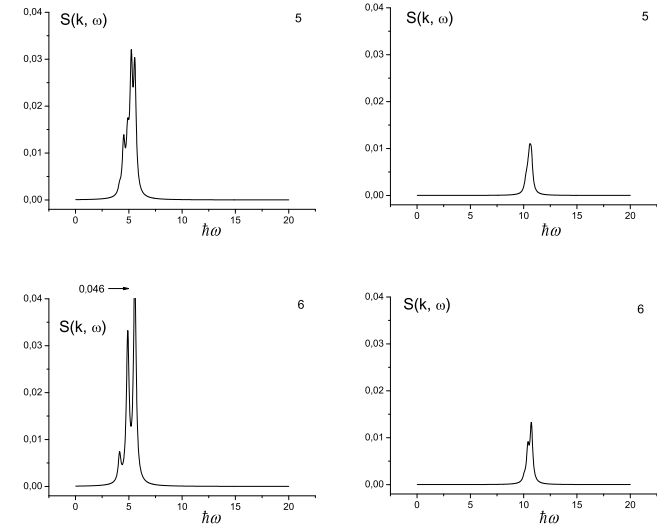
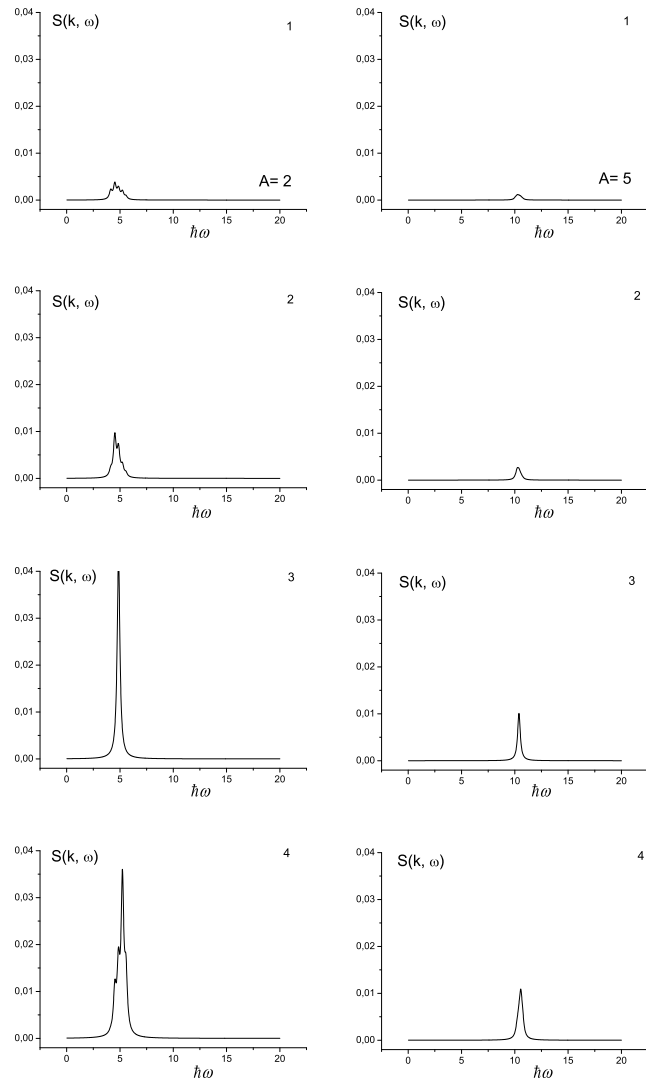
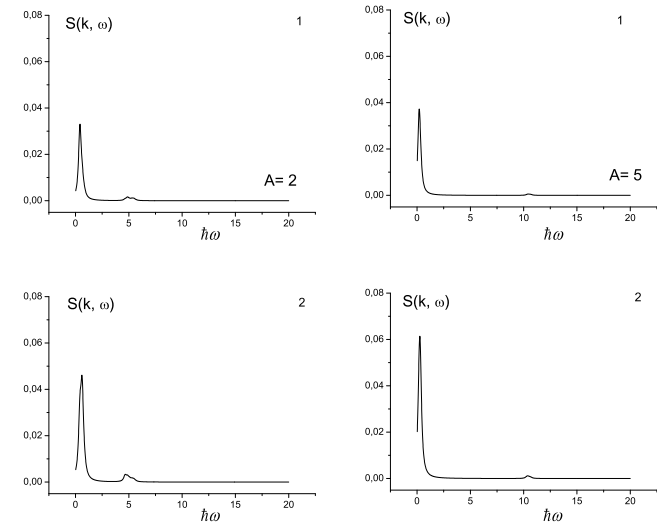


Рис. 8. Залежність динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ від хвильового вектора і частоти при $V = 0$ в CDW -фазі ($\rho = 0.5$). Зліва $A = 2$, праворуч $A = 5$. Рисунок 1; 2; 3; 4; 5; 6 відповідає хвильовий вектор $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$



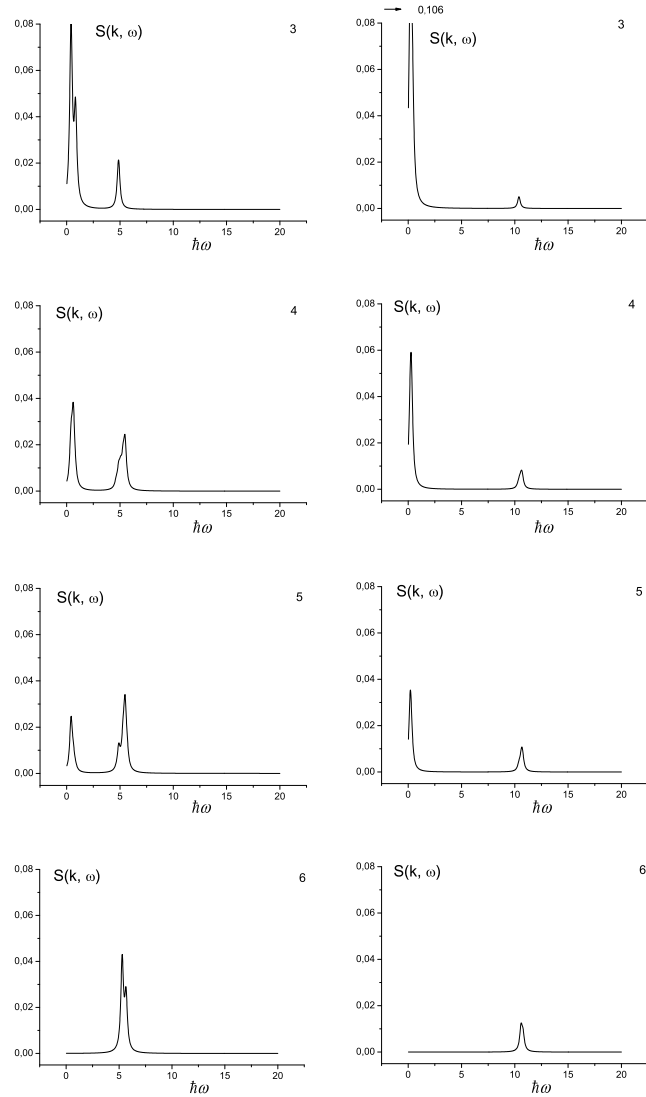
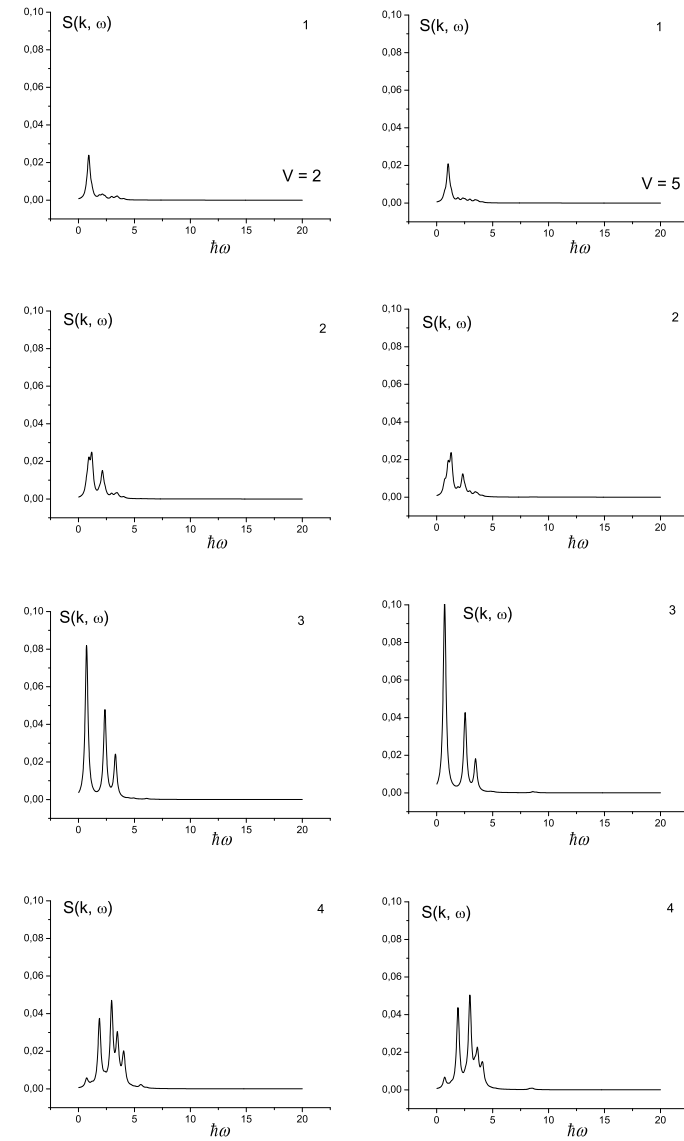


Рис. 9. Залежність динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ від хвильового вектора і частоти при $V = 0$ в SF -фазі ($\rho = 0.25$). Зліва $A = 2$, праворуч $A = 5$. Рисункам 1; 2; 3; 4; 5; 6 відповідає хвильовий вектор $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$



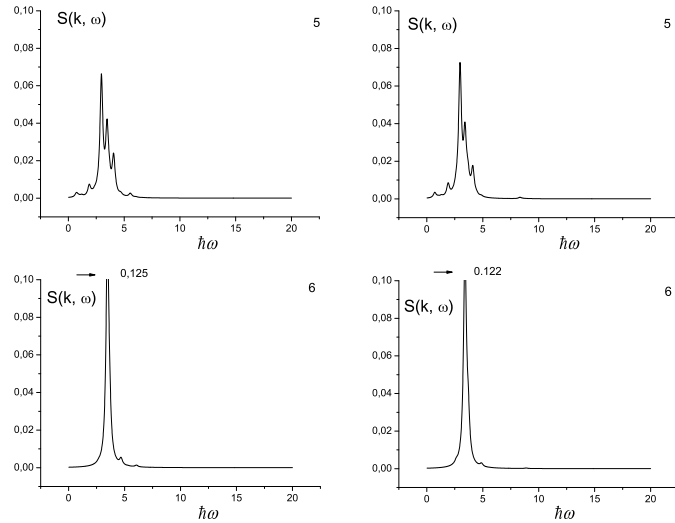


Рис. 10. Залежність динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ від хвильового вектора і частоти при $A = 0$ в SF -фазі ($\rho = 0.25$). Зліва $V = 2$, праворуч $V = 5$. Рисункам 1; 2; 3; 4; 5; 6 відповідає хвильовий вектор $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$

На рисунку 10 представлено $S(k, \omega)$ в SF -фазі для випадку $A = 0$; $V = 2$ і $V = 5$, $\rho = 0.25$, що на діаграмі (див. рис. 1) відповідає $\mu' = -3.2$ для $V = 2$ і $\mu' = -5.6$ для $V = 5$. На відміну від попереднього випадку ми отримали значно ширші максимуми $S(k, \omega)$ (які складаються з груп піків) в області низьких частот. Зі зміною хвильового вектора k відбувається перерозподіл інтенсивностей піків. Широкий максимум $S(k, \omega)$ в SF -фазі при $A = 0$ є в одній і цій же області частот $0 < \hbar\omega < 5$ для $V = 2$ і $V = 5$ (див. рис. 10) і також для випадку $V = 0$, який тут не представлено. Різниця лише в інтенсивності окремих піків, які формують цей максимум. Таким чином, вплив міжчастинкової взаємодії V на спектри $S(k, \omega)$ є значно слабший ніж вплив поля A . В усіх випадках інтенсивності низькочастотних піків (SF фаза) зростають при зростанні хвильового вектора k на проміжку $0 \leq k \leq \pi/2a$ і спадають на проміжку $\pi/2a \leq k \leq \pi/a$ і є відсутні при $k = \pi/a$ (як і при $k = 0$). Інтенсивності високочастотних піків, які є в області енергії E_g суттєво зростають на всьому проміжку $0 \leq k \leq \pi/a$.

6. Висновки

В рамках розширеної моделі жорстких бозонів методом точної діагоналізації розраховано енергетичний спектр одновимірного скінченного йонного провідника з періодичними граничними умовами. Модель враховує переміщення йонів між сусідніми позиціями (параметр t), короткосяжну відштовхувальну взаємодію між йонами (параметр V) а також модульовальне поле A , що сприяє модуляції у просторовому розподілі йонів. В цій праці досліджено одночастинкову кореляцію, розраховано структурний і динамічний структурний фактори при температурі $T = 0$. Нами отримано пік характеристики одночастинкової кореляції $n'(k)$ при $k = 0$ і $k = \pi/a$ в SF фазі, що сигналізує про далекосяжну одночастинкову кореляцію. Поле A значно сильніше розширює область CDW фази (в координатах μ') і пригнічує SF фазу ніж короткосяжна взаємодія між частинками V . Очевидно, саме тому ми отримали, що зростання величини поля A приводить до значнішого зменшення далекосяжної кореляції між частинками $n'(k = \pi/a)$ ніж відповідне збільшення взаємодії між частинками V . Для структурного фактора навпаки : зростання величини поля A приводить до значнішого збільшення $S(k = \pi/a)$ ніж відповідна зміна взаємодії між частинками V . Отримані максимуми структурного фактора при $k = \pi/a$ при половинному заповненні йонних позицій (густина $\rho = 0.5$), як і максимуми динамічного структурного фактора в області частот, що за енергією відповідають ширині забороненої зони, підтверджують наявність впорядкованої модульованої (CDW) фази при $\rho = 0.5$. Наявність максимумів динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ в області низьких частот при $\rho = 0.25$ підтверджує можливість існування фази типу суперфлюїду (SF). Нами показано, що вплив міжчастинкової взаємодії V на спектри $S(k, \omega)$ є значно слабший ніж вплив поля A .

Література

1. D. Müller, D. Z. Anderson, R. J. Grow, P. D. D. Schwindt, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **83**, 5194 (1999); <https://doi.org/10.1103/Physrevlett.83.5194>.
2. J. H. Thywissen, R. M. Westervelt, and M. Prentiss, Phys. Rev. Lett. **83**, 3762 (1999); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.3762>.
3. N. H. Dekker, C. S. Lee, V. Lorent, J. H. Thywissen, S. P. Smith,

- M. Drndic, R. M. Westervelt, and M. Prentiss, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1124 (2000); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1124>.
4. M. Key, I. G. Hughes, W. Rooijackers, B. E. Sauer, E. A. Hinds, D. J. Richardson, and P. G. Kazansky, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1371 (2000); <https://doi.org/10.1103/Physrevlett.84.1371>.
 5. K. Bongs, S. Burger, S. Dettmer, D. Hellweg, J. Arlt, W. Ertmer, and K. Sengstock, *Phys. Rev. A* **63**, 031602(R) (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.63.031602>.
 6. F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 080403 (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.080403>.
 7. A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.130402>.
 8. H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250402 (2003); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.250402>.
 9. M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160405 (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.160405>.
 10. T. Stöferle, H. Moritz, C. Schori, M. Köhl, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 130403 (2004); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.130403>.
 11. I.V. Stasyuk, O.A. Vorobyov, R.Ya. Stetsiv, *Ferroelectrics* **426**, 6 (2012); <http://dx.doi.org/10.1080/00150193.2012.671087>.
 12. R.Ya. Stetsiv, *J. Phys. Studies* **17**, 4702 (2013); <https://doi.org/10.30970/jps.17.4702>.
 13. R.Ya. Stetsiv, O. Vorobyov, *Physics and Chemistry of Solid State* **15**, No. 2, p. 244-249 (2014).
 14. R.Ya. Stetsiv, O.Ya. Farenjuk, *J. Phys. Studies* **25**, No. 2, 2702 (2021); <https://doi.org/10.30970/jps.25.2702>.
 15. I.V. Stasyuk, R.Ya. Stetsiv, *Condens. Matter Phys.* **19**, No 4, 43704 (2016); <https://doi.org/10.5488/CMP.19.43704>.
 16. D. Pines and P. Nozieres. *The Theory Of Quantum Liquids* (Perseus Books, 1999).
 17. S. Sachdev, *Science* **288**, 475-480 (2000); <https://doi.org/10.1126/science.288.5465.475>.
 18. R. Roth and K. Burnett, *J. Phys. B* **37**, 3893-3907 (2004); <https://doi.org/10.1088/0953-4075/37/19/009>.
 19. G.D. Mahan, *Phys. Rev. B* **14**, 780 (1976);

- <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.780>.
20. I.V. Stasyuk, I. R. Dulepa, *Condens. Matter Phys.* **10**, 259 (2007); <https://doi.org/10.5488/CMP.10.2.259>.
 21. I.V. Stasyuk, I. R. Dulepa, *J. Phys. Studies* **13**, 2701 (2009);
 22. R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 170 (1990); <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.62.113>.
 23. R. Micnas, S. Robaszkiewicz, *Phys. Rev. B* **45**, 9900 (1992); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.9900>.
 24. M. Rigol, A. Muramatsu, M. Olshanii, *Phys. Rev. A* **74**, 053616 (2006); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.053616>.
 25. I. Hen, M. Rigol, *Phys. Rev. B* **80**, 134508 (2009); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.134508>.
 26. I. Hen, M. Iskin, M. Rigol, *Phys. Rev. B* **81**, 064503 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.064503>.
 27. G.G. Batrouni, R.T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **46**, 9051 (1992); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.9051>.
 28. G.G. Batrouni, R.T. Scalettar, *Phys. Rev. Letters* **84**, 1599 (2000); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1599>.
 29. K. Bernardet, G.G. Batrouni, J.-L. Meunier, G. Schmid, M. Troyer, A. Dorneich, *Phys. Rev. B* **65**, 104519 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.104519>.
 30. K. Bernardet, G.G. Batrouni, M. Troyer, *Phys. Rev. B* **66**, 054520 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.054520>.
 31. G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich, *Phys. Rev. Letters* **88**, 167208 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.167208>.
 32. B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature (London)* **429**, 277 (2004); <https://doi.org/10.1038/nature02530>.
 33. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond.* **A 285**, 542 (1965); <https://doi.org/10.1098/rspa.1965.0124>.
 34. І.В. Стасюк, Функції Гріна у квантовій статистиці твердих тіл (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2013).
 35. P. Pippan, H.G. Evertz, and M. Hohenadler, *Phys. Rev. A* **80**, 033612 (2009); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.033612>.
 36. R.Ya. Stetsiv, I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, *Ukr. J. Phys.* **59**, 515 (2014).
 37. R.Ya. Stetsiv, *Condens. Matter Phys.* **24**, No 2, 23704 (2021); <https://doi.org/10.5488/CMP.24.23704>.
 38. Münch W., Kreuer K.D., Traub U., Maier J., *Solid State Ionics* **77**, 10 (1995); [https://doi.org/10.1016/0167-2738\(95\)00045-8](https://doi.org/10.1016/0167-2738(95)00045-8).

39. Hassan R., Campbell E.S., J. Chem. Phys. **97**, 4362 (1992);
<https://doi.org/10.1063/1.463902>.
40. Eckert M., Zundel G., J. Phys. Chem. **92**, 7016 (1988);
<https://doi.org/10.1021/j100335a035>.

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>