

ОДНОЧАСТИНКОВИЙ СПЕКТР ТА ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД У ЙОННОМУ ПРОВІДНИКУ ПАУЛІ

І. В. Стасюк, І. Р. Дулепа

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, Львів, Україна
(Отримано 14 жовтня 2008 р.)*

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

Ключові слова: статистика Паулі, фазовий перехід, одночастинкова густина станів, йонний провідник.

PACS number(s): 75.10.Pq, 66.30.Dn, 66.10.Ed

ВСТУП

Протягом минулих 30-ти років інтенсивно вивчають мікроскопічні процеси транспорту частинок у кристалічних йонних провідниках. У багатьох працях з дослідження йонної провідності процеси йонного переносу описано за допомогою моделей типу ґраткового газу в термінах операторів Паулі [1, 2]. Модель ґраткового газу широко застосовують у теоретичних дослідженнях багатьох фізичних процесів, у тому числі, крім йонного (протонного) транспорту, при описі процесів інтеркаляції у кристалах, при вивченні фазових переходів та нестійкостей у йонній підсистемі [3–6]. Основну увагу приділяють, з одного боку, опису процесів упорядкування та переходів між сегнетоеластичними й суперйонними фазами, а з другого — розрахунку коефіцієнтів електропровідності з урахуванням взаємодій із коливаннями ґратки. Менше досліджені все ще особливості енергетичного спектра йонної підсистеми, особливо в області іншого фазового переходу, пов’язаного з появою фази типу бозе-конденсату. Така фаза може з’являтися в системі частинок, що описуються статистикою Паулі, навіть за відсутності прямої міжчастинкової взаємодії [7]. У цій статті ми розглядаємо просту мікроскопічну модель ґраткового газу частинок Паулі без взаємодії між ними, як перший крок для опису енергетичного спектра йонного провідника.

Роль статистики в енергетичному спектрі одновимірної моделі ґраткового газу пауліонів проаналізовано 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 йонів (йон, як важкий “жорсткий бозон”), необхідно враховувати термічну активацію, за допомогою якої йон може подолати

енергетичний бар’єр при перескоку. Такий ефект був врахований, зокрема, у ґратковій моделі Магана [1]. У праці [8] термічної активації перескоків на найближчий сусідній вузол при обчисленні одночастинкової густини станів не враховано.

У цій статті розглянуто термодинаміку ґраткової моделі йонного 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 йонних перескоків. Методом функцій Гріна з використанням псевдоспінового представлення знайдено енергетичний спектр такого провідника в наближенні хаотичних фаз. Обчислено одночастинкову густину станів для одновимірної та тривимірної системи пауліонів з $S = \frac{1}{2}$ у різних фазах у широкому діапазоні температур. Результати, отримані для спектра з використанням наближених схем, порівнюємо з точними [8], знайденими в одновимірному випадку за допомогою процедури ферміонізації.

І. МОДЕЛЬ

Опишімо йонний провідник Паулі, використовуючи модель ґраткового газу для невзаємодіючих пауліонів:

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

b_i^+ , b_i — оператори народження і знищення частинки (йона) 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 заповненим одним йоном. Переставні співвідношення для операторів, що описують йони 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 еквівалентний до опису перевероту псевдоспіну. Нехай пустий вузол відповідає спіну, орієнтованому вгору, заповнений вузол — спіну, орієнтованому вниз; тоді $b_i = S_i^+$, $b_i^+ = S_i^-$. У псевдоспіновому представленні гамільтоніан (1.1) відповідає ізотропній XY моделі:

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

де

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

Розгляньмо спочатку цю модель у наближенні середнього поля:

$$H_{MF} = -2J(0) \langle S^x \rangle \sum_i S_i^x - (\varepsilon_0 - \mu) \sum_i S_i^z + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J(0) \langle S^x \rangle^2), \quad (3)$$

$$\langle S_i^x \rangle = \langle S^x \rangle, \quad \langle S_i^y \rangle = 0, \quad \sum_j J_{ij} = J(0).$$

Мовою операторів Паулі: $\langle b^+ \rangle = \langle b \rangle = \langle S^x \rangle$.

Розгляньмо тепер випадок, коли перескоки частинок є термічно активованими. Для цього запишімо $J(0) = J e^{-\beta\Delta}$, де $-\Delta$ енергія активації. Поворотом спінової системи координат на кут θ :

$$\begin{aligned} S_i^z &= \sigma_i^z \cos \theta + \sigma_i^x \sin \theta, \\ S_i^x &= \sigma_i^x \cos \theta - \sigma_i^z \sin \theta, \\ S_i^y &= \sigma_i^y, \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$H_{MF} = -E \sum_i \sigma_i^z + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J e^{-\beta\Delta} \langle S^x \rangle^2), \quad (5)$$

з рівнянням на кут θ :

$$(\varepsilon_0 - \mu) \sin \theta + 2J e^{-\beta\Delta} \langle S^x \rangle \cos \theta = 0. \quad (6)$$

Середні значення: $\langle S^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle \cos \theta$, $\langle S^x \rangle = -\langle \sigma^z \rangle \sin \theta$, $\langle \sigma^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta E}{2}\right)$, $\langle n \rangle = \frac{1}{2} - \langle S^z \rangle$.

Власні значення гамільтоніана (5) характеризуються параметром E , який можна записати через середнє значення $\langle S^x \rangle$ чи $\langle \sigma^z \rangle$

$$E = (\varepsilon_0 - \mu) \cos \theta - 2J e^{-\beta\Delta} \langle S^x \rangle \sin \theta. \quad (7)$$

Розв'язки рівняння (6) дають дві фази:

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

$$\cos \theta = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{E_1}, \quad \sin \theta = -\frac{2J e^{-\beta\Delta} \langle S^x \rangle}{E_1}, \quad (8)$$

де

$$E_1 = 2|J| e^{-\beta\Delta} \sqrt{\langle S^x \rangle^2 + \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{4J^2}} e^{-\beta\Delta}. \quad (9)$$

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

$$\cos \theta = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2J e^{-\beta\Delta} \langle \sigma^z \rangle}, \quad E_1 = 2J e^{-\beta\Delta} \langle \sigma^z \rangle, \quad (10)$$

яке визначаємо з рівняння

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh(\beta J e^{-\beta\Delta} \langle \sigma^z \rangle), \quad (11)$$

тоді як середнє $\langle S^z \rangle$ визначаємо формулою

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &\equiv \frac{1}{2} - \langle n \rangle = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2J} e^{\beta\Delta} \\ &= \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2E_1} \tanh\left(\frac{\beta E_1}{2}\right). \end{aligned} \quad (12)$$

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

$$\langle S^x \rangle^2 - \frac{1}{4} \tanh^2\left(\frac{\beta E_1}{2}\right) + \frac{(\varepsilon_0 - \mu)^2}{4J^2} e^{2\beta\Delta} = 0. \quad (13)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \sigma^z \rangle &= \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta E_2}{2}, \\ E_2 &= \varepsilon_0 - \mu, \\ \langle S^z \rangle &\equiv \frac{1}{2} - \langle n \rangle = \langle \sigma^z \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Статистичну суму й вільну енергію на один вузол у наближенні середнього поля записуємо у вигляді

$$\begin{aligned} Z_{MF} &= e^{-\beta \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J e^{-\beta\Delta} \langle S^x \rangle^2)} \\ &\times \left(2 \cosh\left(\frac{\beta E}{2}\right) \right)^N, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} f_{MF} &= \frac{1}{2} (\varepsilon_0 - \mu + 2J e^{-\beta\Delta} \langle S^x \rangle^2) \\ &- \frac{1}{\beta} \ln \left(2 \cosh\left(\frac{\beta E}{2}\right) \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Отримані вище рівняння відповідають умові мінімуму вільної енергії $\frac{\partial f_{MF}}{\partial \langle S^x \rangle} = 0$. Рівняння (11) і (14) дають рівноважні значення для $\langle \sigma^z \rangle$ в обох фазах: $\langle S^x \rangle \neq 0$ (впорядкованій); $\langle S^x \rangle = 0$ (невпорядкованій). Рівняння (13) визначає залежність параметра $\langle S^x \rangle$ від температури й хімічного потенціалу в упорядкованій фазі.

На рисунку 1а зображено зміну $\langle S^x \rangle$ з температурою у випадку відсутності термічної активації йонних перескоків ($\Delta = 0$) та при фіксованому значенні

$\varepsilon_0 - \mu$. Отримана залежність ε в наближенні середнього поля такою ж, як і для моделі Ізинга з поперечним полем, роль якого в нас відіграє різниця $\varepsilon_0 - \mu$. Критична температура, при якій фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ зникає, дається співвідношенням $\beta_c = \frac{1}{\varepsilon_0 - \mu} \ln \left(\frac{1 + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J(0)} e^{\beta \Delta}}{1 - \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J(0)} e^{\beta \Delta}} \right)$.

Маємо фазовий перехід з упорядкованої в невпорядковану фазу з підвищенням 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 $\mu \rightarrow \varepsilon_0 - J(0)$.

Урахування температурної залежності параметра перескоку не міняє більшості отриманих співвідно-

шень. Як і раніше, система може перебувати у двох фазах; температуру переходу між фазами визначаємо тепер із рівняння

$$\beta = \frac{1}{\varepsilon_0 - \mu} \ln \frac{1 + \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J} e^{\beta \Delta}}{1 - \frac{\varepsilon_0 - \mu}{J} e^{\beta \Delta}}. \quad (17)$$

При $\Delta \neq 0$ це рівняння має два розв'язки; крім високотемпературного переходу при температурі θ_{c1} (що зводиться при $\Delta = 0$ до розглянутого раніше), з'являється ще низькотемпературний у 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 1а-с при різних значеннях різниці $\varepsilon_0 - \mu$ та енергії активації Δ .

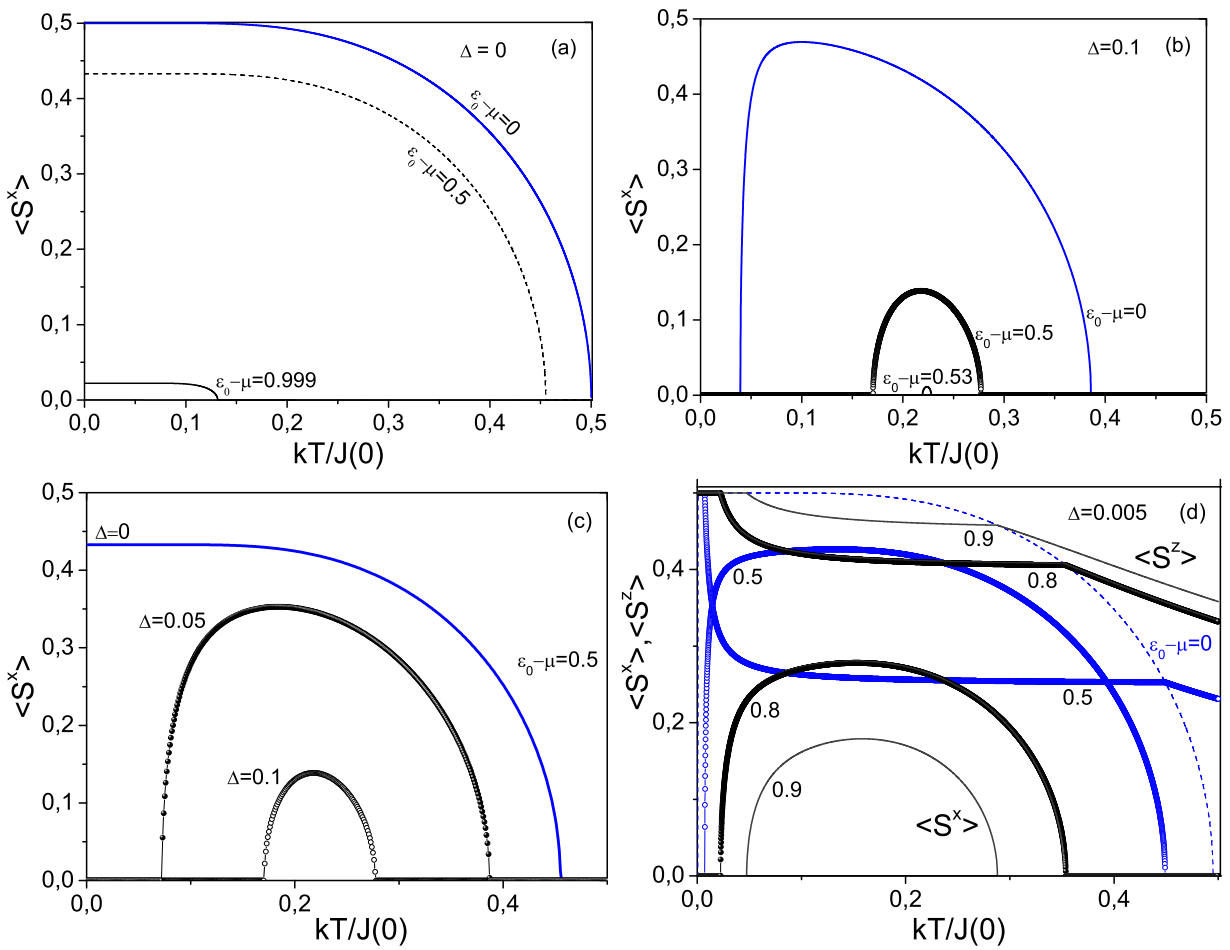


Рис. 1. Поведінка $\langle S^x \rangle$, $\langle S^z \rangle$ при фіксованих значеннях Δ та $\varepsilon_0 - \mu$.

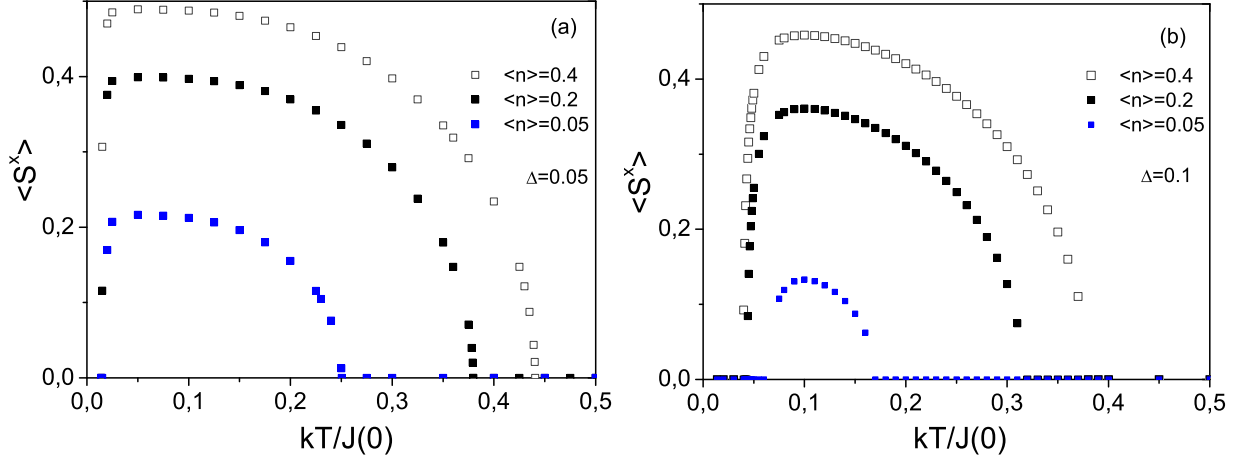
Температурний інтервал $[\theta_{c2}, \theta_{c1}]$ є найбільшим при $\varepsilon_0 - \mu = 0$. Рівняння для критичних температур (18) зводиться при цьому до вигляду

$$\frac{1}{2} \beta J e^{-\beta \Delta} = 1. \quad (18)$$

Як можна переконатися, ненульові розв'язки тут існують при $\Delta < \frac{J}{2e} \equiv \Delta_{cr}$ (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 й середнього $\langle S^z \rangle$. На рис. 1d подано графіки для $\langle S^z \rangle$ при проходженні через різні фази (в межах упорядкованої фази параметр $\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle n \rangle$ стає при фіксованому $\varepsilon_0 - \mu$ залежним від температури: $\langle S^z \rangle = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{2J} e^{\beta \Delta}$).

Отримано також температурну залежність $\langle S^x \rangle$ при заданому значенні $\langle n \rangle = \frac{1}{2} - \langle S^z \rangle$ (рисунки 2a,b), шляхом розв'язання системи рівнянь для $\langle S^x \rangle$ і $\varepsilon_0 - \mu$ при фіксованих значеннях $\langle S^z \rangle$, Δ .


 Рис. 2. Температурна залежність $\langle S^x \rangle$ для деяких значень $\langle n \rangle$ (a — $\Delta = 0.05$, b — $\Delta = 0.1$).

Наведені 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 згадувалося вище, вона також зникає з перевищенням критичного значення Δ_{cr} енергії активації йонного перескоку.

II. ЗНАХОДЖЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА

Одночастинковий енергетичний спектр досліджуваної моделі можна визначити, використовуючи ме-

тод функцій Гріна. Знайдемо двочасову температурну функцію Гріна $\langle\langle b_i | b_j^+ \rangle\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\langle b_i | b_j^+ \rangle\rangle &= \langle\langle S_i^x | S_j^x \rangle\rangle - i \langle\langle S_i^x | S_j^y \rangle\rangle \\ &+ i \langle\langle S_i^y | S_j^x \rangle\rangle + \langle\langle S_i^y | S_j^y \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (19)$$

де, наприклад, після перетворення повороту (1)

$$\begin{aligned} \langle\langle S_i^x | S_j^x \rangle\rangle &= \langle\langle \sigma_i^x | \sigma_j^x \rangle\rangle \cos^2 \theta \\ &- (\langle\langle \sigma_i^x | \sigma_j^z \rangle\rangle + \langle\langle \sigma_i^z | \sigma_j^x \rangle\rangle) \sin \theta \cos \theta + \langle\langle \sigma_i^z | \sigma_j^z \rangle\rangle \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (20)$$

Повний гамільтоніан (2) в операторах псевдоспіну в повернутій системі координат має вигляд

$$\begin{aligned} H &= - \sum_i (\sigma_i^z \cos \theta + \sigma_i^x \sin \theta) (\varepsilon_0 - \mu) - \sum_{ij} J_{ij} (\sigma_i^x \sigma_j^x \cos^2 \theta \\ &+ \sigma_i^z \sigma_j^z \sin^2 \theta - (\sigma_i^x \sigma_j^z + \sigma_i^z \sigma_j^x) \cos \theta \sin \theta + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \frac{N}{2} (\varepsilon_0 - \mu). \end{aligned} \quad (21)$$

Запишемо рівняння руху для операторів псевдоспіну σ_i^α , роблячи розщеплення в дусі наближення хаотичних фаз

$$\begin{aligned} [\sigma_i^x, H] &= i \sigma_i^y (\varepsilon_0 - \mu) \cos \theta + 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_i^y \sin^2 \theta \\ &- 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_j^y = i E \sigma_i^y - 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_j^y, \\ [\sigma_i^y, H] &= i (\varepsilon_0 - \mu) \sigma_i^z \sin \theta - i E \sigma_i^x + 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} \sigma_j^x \cos^2 \theta \\ &- 2i \langle \sigma^z \rangle \sum_j J_{lj} (\sigma_j^z + \sigma_i^z) \cos \theta \sin \theta, \\ [\sigma_i^z, H] &= 0, \end{aligned} \quad (22)$$

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

Із рівнянь руху для функцій Гріна $\langle\langle \sigma_i^\alpha | \sigma_{i'}^\beta \rangle\rangle$ ($\alpha, \beta = x, y, z$):

$$\hbar \omega \langle\langle \sigma_i^\alpha | \sigma_{i'}^\beta \rangle\rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \langle [\sigma_i^\alpha, \sigma_{i'}^\beta] \rangle + \langle\langle [\sigma_i^\alpha, H] | \sigma_{i'}^\beta \rangle\rangle \quad (23)$$

впливає, що оскільки $[\sigma_i^z, H] = 0$, то $\langle\langle\sigma_i^z|\sigma_i^\alpha\rangle\rangle = 0$, $\langle\langle\sigma_i^\alpha|\sigma_i^z\rangle\rangle = 0$. Тоді

$$\begin{aligned}\langle\langle S_i^x|S_j^x\rangle\rangle &= \langle\langle\sigma_i^x|\sigma_j^x\rangle\rangle \cos^2\theta, \quad \langle\langle S_i^x|S_j^y\rangle\rangle = \langle\langle\sigma_i^x|\sigma_j^y\rangle\rangle \cos\theta, \\ \langle\langle S_i^y|S_j^x\rangle\rangle &= \langle\langle\sigma_i^y|\sigma_j^x\rangle\rangle \cos\theta, \quad \langle\langle S_i^y|S_j^y\rangle\rangle = \langle\langle\sigma_i^y|\sigma_j^y\rangle\rangle.\end{aligned}\quad (24)$$

Для знаходження функції Гріна $\langle\langle b_i|b_j^+\rangle\rangle$ отримуємо систему двох пар рівнянь: для $\langle\langle\sigma_i^x|\sigma_j^x\rangle\rangle$, $\langle\langle\sigma_i^y|\sigma_j^x\rangle\rangle$

$$\begin{aligned}\hbar\omega\langle\langle\sigma_i^x|\sigma_i^x\rangle\rangle &= iE\langle\langle\sigma_i^y|\sigma_i^x\rangle\rangle - 2i\langle\sigma^z\rangle\sum_j J_{ij}\langle\langle\sigma_j^y|\sigma_i^x\rangle\rangle, \\ \hbar\omega\langle\langle\sigma_i^y|\sigma_i^x\rangle\rangle &= -i\hbar\frac{\langle\sigma^z\rangle}{2\pi}\delta_{iV} - iE\langle\langle\sigma_i^x|\sigma_i^x\rangle\rangle + 2i\langle\sigma^z\rangle\sum_j J_{ij}\cos^2\theta\langle\langle\sigma_j^y|\sigma_i^x\rangle\rangle\end{aligned}\quad (25)$$

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 $\langle\langle\sigma_i^x|\sigma_j^x\rangle\rangle$, $\langle\langle\sigma_i^y|\sigma_j^x\rangle\rangle$ та $\langle\langle\sigma_i^y|\sigma_j^y\rangle\rangle$, $\langle\langle\sigma_i^x|\sigma_j^y\rangle\rangle$ після перетворення Фур'є до хвильових векторів набувають форму:

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

та

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

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

У результаті

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx} &= \frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z\rangle\frac{E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})}{\hbar^2\omega^2 - (E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}))(E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})\cos^2\theta)}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx} &= -i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z\rangle\frac{\hbar\omega}{\hbar^2\omega^2 - (E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}))(E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})\cos^2\theta)}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy} &= -\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy} &= \frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z\rangle\frac{E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})\cos^2\theta}{\hbar^2\omega^2 - (E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}))(E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})\cos^2\theta)}.\end{aligned}\quad (26)$$

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

$$\begin{aligned}\langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} &= \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xx}\cos^2\theta - i\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yx}\cos\theta + i\mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{xy}\cos\theta + \mathbf{G}_{\mathbf{k},\omega}^{yy}, \\ \langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} &= \frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z\rangle\frac{E(\cos^2\theta + 1) + 2\hbar\omega\cos\theta - 4\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})\cos^2\theta}{\hbar^2\omega^2 - (E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k}))(E - 2\langle\sigma^z\rangle J(\mathbf{k})\cos^2\theta)},\end{aligned}\quad (27)$$

де параметр E у фазах з $\langle S^x\rangle \neq 0$, $\langle S^x\rangle = 0$ дається формулами (9), (14).

Для фази з $\langle S^x\rangle \neq 0$, $E = E_1 = 2Je^{-\beta\Delta}\langle\sigma^z\rangle$ отримуємо температурно залежний спектр

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 = 4\sigma_z^2(1 - \gamma_{\mathbf{k}})(1 - \gamma_{\mathbf{k}}\cos^2\theta), \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{J(\mathbf{k})}{J(0)}. \quad (28)$$

У фазі $\langle S^x\rangle = 0$:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{E_2}{J(0)} - 2\langle\sigma^z\rangle\gamma_{\mathbf{k}}, \quad (29)$$

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

ІІІ. ОДНОЧАСТИНКОВА ГУСТИНА СТАНІВ У КВАЗІОДНОВИМІРНОМУ ТА ТРИВИМІРНОМУ ВИПАДКАХ

Перепишімо для зручності формулу (30) для функції Гріна у вигляді

$$\langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k},\omega} = \frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z\rangle\left[\frac{\cos\theta + \frac{c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{\cos\theta - \frac{c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right], \quad (30)$$

де $c_{\mathbf{k}} = \frac{E}{J(0)}(\cos^2 \theta + 1) - 4\langle \sigma_z \rangle \gamma_{\mathbf{k}} \cos^2 \theta$, що дає змогу легко знайти одночастинкову густину станів $\rho_{\mathbf{k}}(\omega) = -2\text{Im}\langle\langle b|b^+\rangle\rangle_{\mathbf{k}, \hbar\omega+i\delta}$, $\delta \rightarrow 0$.

Отримуємо

$$\rho_{\mathbf{k}}(\omega) = \left[\langle S^z \rangle + \frac{\langle \sigma^z \rangle c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right] \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}\right) + \left[\langle S^z \rangle - \frac{\langle \sigma^z \rangle c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right] \delta\left(\omega + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}\right); \quad (31)$$

звідси одержуємо густину станів з розрахунку на один вузол ґратки: $\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\omega)$. Уведемо функцію

$$\rho_0(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta\left(z - \frac{J(\mathbf{k})}{J(0)}\right), \quad (32)$$

тоді

$$\rho(\omega) = \int (\mathcal{F}_+(\omega, z) + \mathcal{F}_-(\omega, z)) \rho_0(z) dz, \quad (33)$$

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

$$\mathcal{F}_{\pm}(\omega, \gamma_{\mathbf{k}}) = \left[\langle S^z \rangle \pm \langle \sigma^z \rangle \frac{c_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right] \delta(\omega \mp \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (34)$$

З метою ілюстрації розглянемо квазіодновимірний випадок і обмежимося найпростішою формою функції $\rho_0(z)$, апроксимуючи виразом, що відповідає врахуванню перескоків на сусідні вузли тільки вздовж одного напрямку $\rho_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\delta(x)}{\sqrt{1-(z-x)^2}} dx = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-z^2}}$, $|z| < 1$. У тривимірному випадку функцію (32) змодельюємо напівеліптичною функцією $\rho_0(z) = \frac{4}{\pi} \sqrt{1-z^2}$, $|z| < 1$. δ -функцію у $\mathcal{F}_{\pm}(\omega, z)$ візьмемо при числових розрахунках у вигляді границі розподілу Лоренца $\delta(\omega \mp \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega \mp \varepsilon_{\mathbf{k}}^2) + \Gamma^2}$.

На рисунку 3а,б зображено одновузлову густину станів (33) в одновимірному випадку при $\Delta = 0$ для значень $\varepsilon_0 - \mu$, указаних на графіках, у двох фазах: $\langle S^x \rangle \neq 0$ (а) ($\beta > \beta_c$), $\langle S^x \rangle = 0$ (б) ($\beta < \beta_c$) ($\varepsilon_0 - \mu = 0.8$, $\beta_c = 2.75$; $\varepsilon_0 - \mu = 0.5$, $\beta_c = 2.2$; $\varepsilon_0 - \mu = 0.3$, $\beta_c = 2.06$; $\varepsilon_0 - \mu = 0.1$, $\beta_c = 2.01$).

Функція $\rho(\omega)$ у випадку $\varepsilon_0 - \mu = 0$, $\Delta = 0$ (рисунок 4 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.

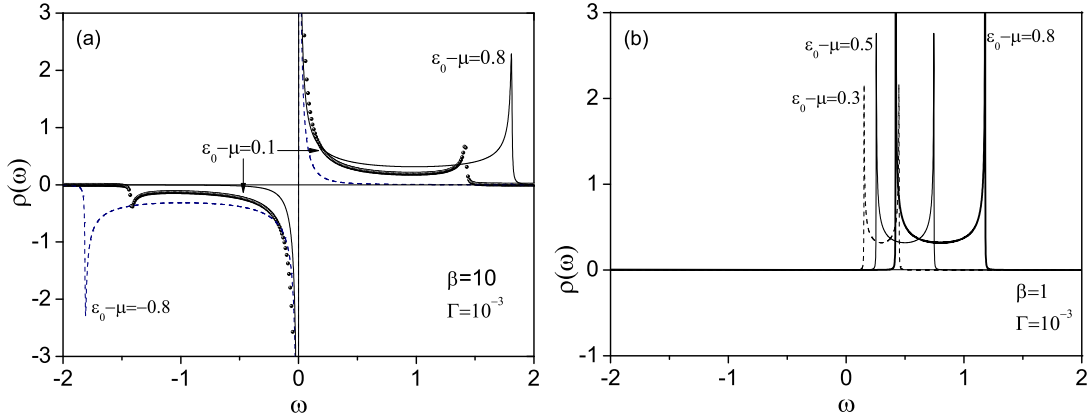


Рис. 3. Одновузлова густина станів для деяких значень $\varepsilon_0 - \mu$ у фазах: а — $\langle S^x \rangle \neq 0$; б — $\langle S^x \rangle = 0$.

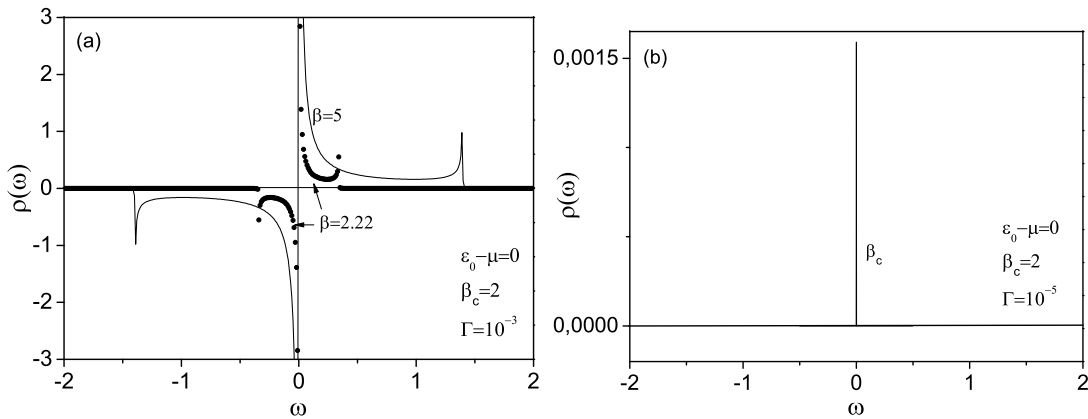


Рис. 4. Одновузлова густина станів у випадку $\varepsilon_0 - \mu = 0$, $\Delta = 0$: а — фаза $\langle S^x \rangle \neq 0$, $\beta > \beta_c$; б — $\beta = \beta_c$.

Одноузлову густину станів для фаз $\langle S^x \rangle \neq 0$, $\langle S^x \rangle = 0$ у квазіодновимірному та тривимірному випадках, а також у точці фазового переходу зображено на рисунку 5а,b,c для $\varepsilon_0 - \mu = 0.5$, $\Delta = 0$. Спостерігаємо перебудову її форми при переході з упорядкованої в неупорядковану фазу з підвищенням температури. У критичній точці і при $\beta < \beta_c$ (у неупорядкованій фазі) одноузлова густина станів відмінна від нуля лише в додатному діапазоні частот. У критичній точці $E = E_1 = E_2$ і спектр має вигляд $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{E}{J(0)}(1 - \gamma_{\mathbf{k}})$. Тут отримуємо аналітичний

вираз для $\rho(\omega)$: $\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{2J(0)\langle \sigma_z \rangle}{\sqrt{E^2 - (\omega - (\varepsilon_0 - \mu))^2}}$. Числові результати для $\rho(\omega)$ у критичній точці збігаються з аналітичним.

Як згадувалося вище, фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ зникає при перевищенні деякого значення Δ_{cr} енергії активації йонного перескоку у випадку фіксованого значення $\varepsilon_0 - \mu$. На рисунку 6 зображено одночастинкову густину станів для $\varepsilon_0 - \mu = 0.5$ у випадках $\Delta = 0.05$, $\Delta = 0.1$. Спостерігаємо зникнення фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ при $\Delta \rightarrow \Delta_{cr}$.

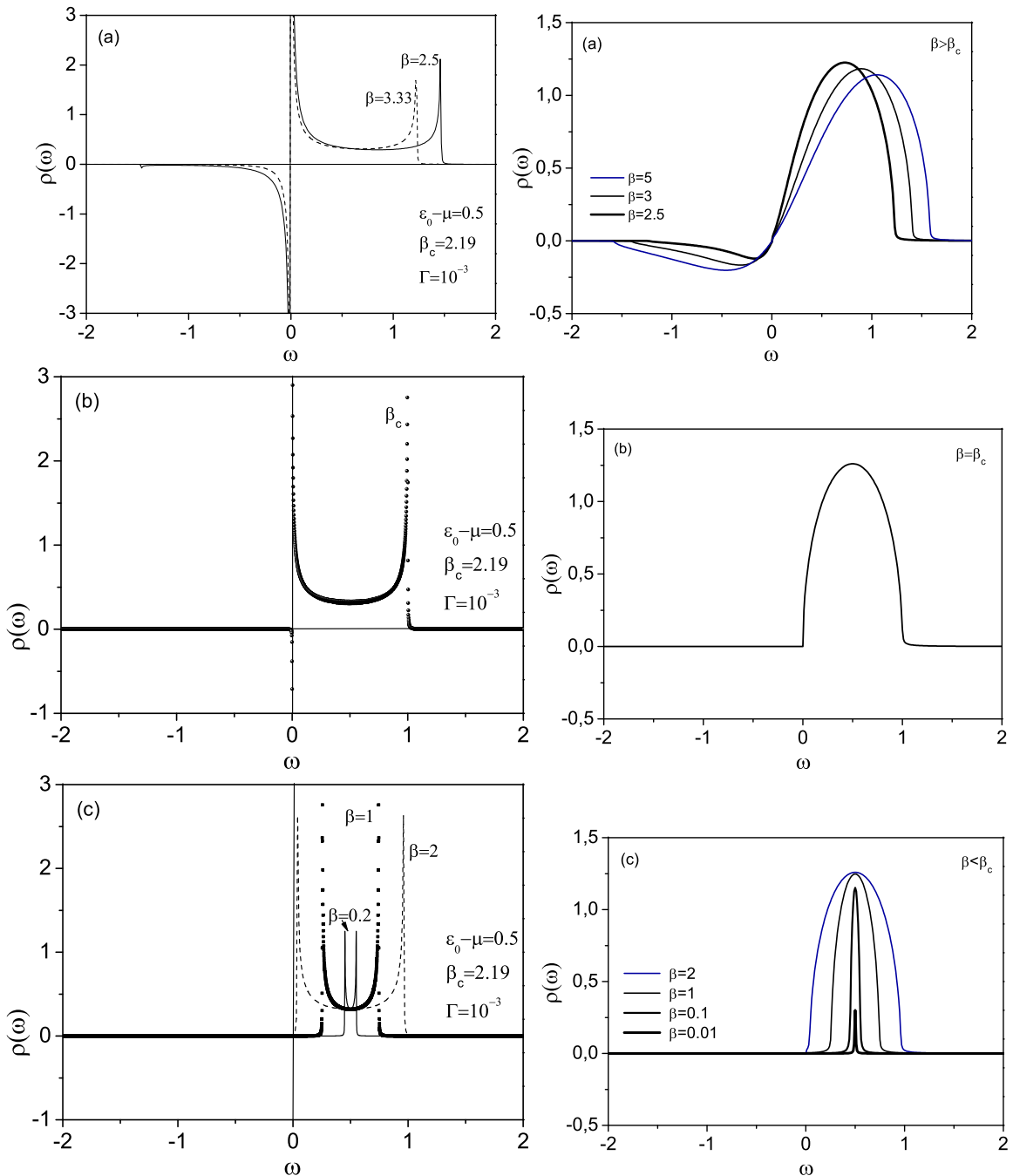


Рис. 5. Одноузлова густина станів у квазіодновимірному та тривимірному випадках ($\varepsilon_0 - \mu = 0.5$, $\Delta = 0$): а – фаза $\langle S^x \rangle \neq 0$, $\beta > \beta_c$; б – $\beta = \beta_c$; в – фаза $\langle S^x \rangle = 0$, $\beta < \beta_c$.

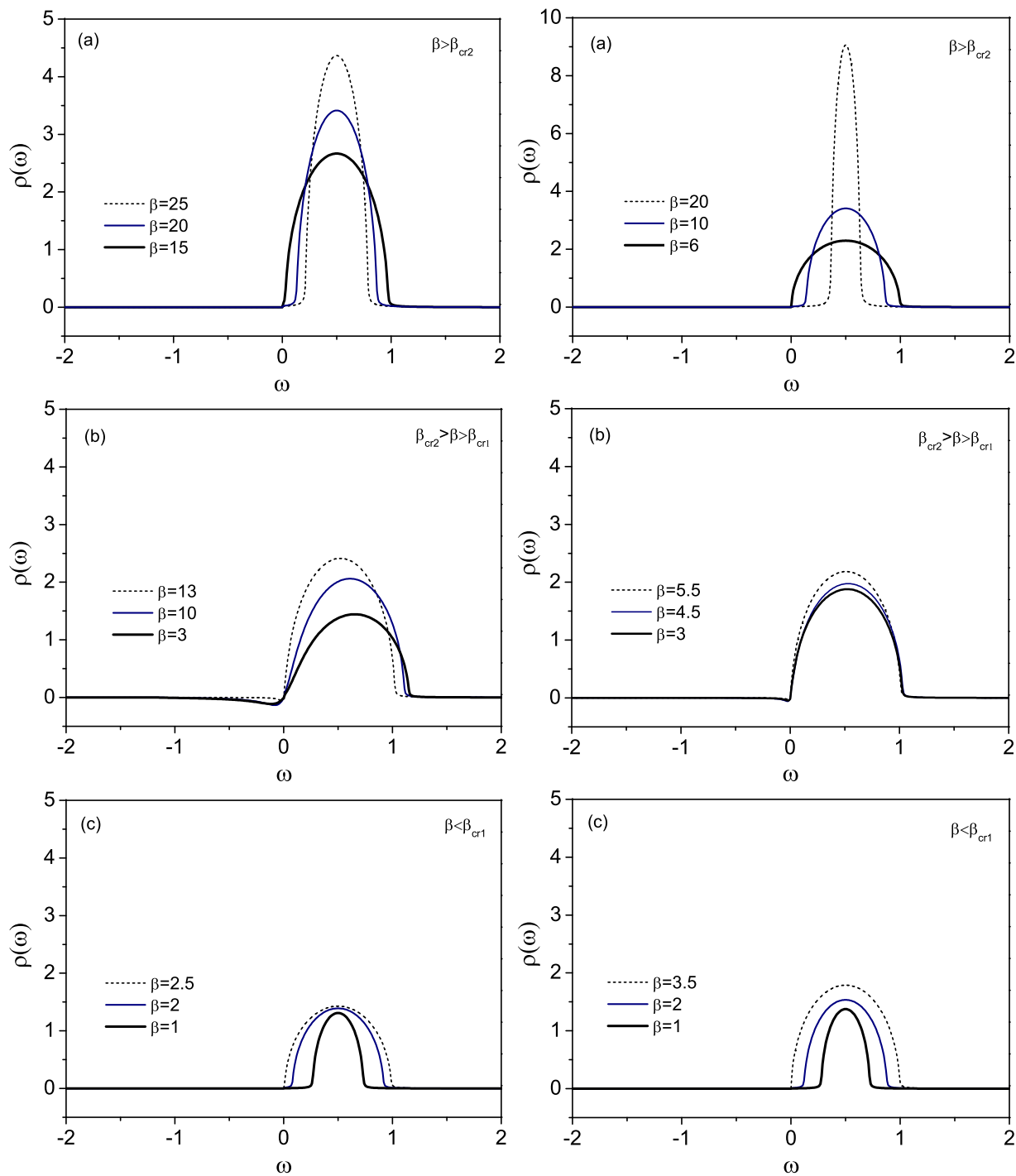


Рис. 6. Одновузлова густина станів у тривимірному випадку ($\varepsilon_0 - \mu = 0.5$; $\Delta = 0.05$, $\Delta = 0.1$): а — фаза $\beta > \beta_{cr2}$; б — фаза $\langle S^x \rangle \neq 0$, $\beta_{cr2} > \beta > \beta_{cr1}$; с — фаза $\langle S^x \rangle = 0$, $\beta < \beta_{cr1}$.

ВИСНОВКИ

Граткова модель йонного провідника, де частинки описуються статистикою Паулі, має навіть при відсутності міжчастинкової взаємодії фазовий перехід до стану, в якому $\langle b \rangle = \langle b^+ \rangle = \langle S^x \rangle \neq 0$. Такий стан є

аналогом фази з ґратковим конденсатом т. зв. “жорстких бозонів”, що досліджено у низці робіт (див. [7]), починаючи з модельного опису поведінки рідкого He^4 . Показано, що у випадку температурно залежного параметра йонного перескоку $J(0)$ (відповідно до термічно активованого механізму, де $J(0) = J e^{-\beta \Delta}$) фа-

за 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.

Із використанням наближення хаотичних фаз знайдено в межах методу двочасових функцій Гріна одностинковий 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 гра-

фіки якісно узгоджуються з точними залежностями густини станів від частоти, розрахованими для одновимірної моделі 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 обох фаз відповідає знайденому в 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 $\langle S^x \rangle \neq 0$.

-
- [1] G. D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 2, 793 (1976).
 [2] T. Tomoyose, J. Phys. Jap. Soc. **66**, 8, 2385 (1997).
 [3] I. V. Stasyuk, O. L. Ivankiv, N. I. Pavlenko, J. Phys. Stud. **1**, 418 (1997).
 [4] I. V. Stasyuk, I. V. Pavlenko, J. Chem. Phys. **114**, 10, 4607 (2001).
 [5] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, B. Hilczer, Solid State Ionics **145**, 211 (2001).
 [6] Yu. I. Dublenych, Phys. Rev. B. **71**, 012411 (2005).
 [7] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 170 (1990).
 [8] I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa, Condens. Matter Phys. **10**, 2(50), 268 (2007).
 [9] O. Derzhko, T. Krokhmalkii, Phys. Status Solidi B **208**, 221 (1998).
 [10] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, Phys. Rev. B **45**, 45 (1990).

ONE-PARTICLE SPECTRUM AND PHASE TRANSITION IN IONIC PAULI CONDUCTOR

I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa

*Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
1, Svientsitskii Str., 79011, Lviv, Ukraine*

A microscopic simple noninteracting model for the description of the energy spectrum of ion subsystem in Pauli ionic conductor is considered. Phase diagram of the model is obtained with taking into account the possibility of transition into phase, that includes “condensate” in the mean field approximation. The temperature dependence of ionic hopping parameter caused by thermal activation is taken into account too. The one-particle spectrum is calculated in random phase approximation. The frequency dependence of the density of states in different phases is investigated in a wide range of temperatures by considering the example of quasi-one-dimensional and three-dimensional systems.