

ОДНОЧАСТИНКОВІ СПЕКТРАЛЬНІ ГУСТИНИ ТА РІВНОВАЖНІ СТАНИ ОДНОВИМІРНОГО ЙОННОГО ПРОВІДНИКА

Р. Я. Стеців

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, Україна
(Отримано 17 жовтня 2013 р.)*

Досліджено рівноважні стани одновимірного йонного провідника. Розгляд базується на ґратковій моделі Паулі, у якій враховано йонне перенесення, взаємодію між сусідніми йонами, а також модулююче поле. Використовуючи метод точної діагоналізації для скінченних одновимірних йонних провідників із періодичними граничними умовами, розраховано одночастинкові спектральні густини й установлено області існування різних фаз системи залежно від величини міжчастинкової взаємодії та модулюючого поля. Показано, що при $T \neq 0$ переходи між фазами є розмитими і мають кросоверний характер.

Ключові слова: йонний провідник, спектральна густина, модель жорстких бозонів, фазові діаграми.

PACS number(s): 75.10.Pq, 03.75.Lm, 66.30.Dn

I. ВСТУП

Системи з йонною (протонною) провідністю останніми роками є предметом багатьох експериментальних і теоретичних досліджень. Незважаючи на те, що кристалічні йонні провідники відомі вже понад два століття, інтенсивне вивчення цих об'єктів почалося недавно у зв'язку з відкриттям суперйонних (суперпротонних) провідників, що містять високотемпературну фазу з високою провідністю. У низькотемпературній фазі йони займають фіксовані позиції в елементарній комірниці. У суперйонній фазі ці позиції заповнені частково з тою чи іншою ймовірністю. Теоретичний опис систем з йонною провідністю в основному базується на ґраткових моделях. Частина з них трактує йони як фермі-частинки й зосереджує увагу на таких аспектах, як роль далекосяжних взаємодій [1–3] чи вплив взаємодії з фононами [4, 5]. У деяких недавніх працях приділено увагу короткосяжним взаємодіям між частинками [6–8]. Послідовніше йони та протони описувати за допомогою “змішаної” статистики Паулі [9], у якій частинки, з одного боку, мають бозонну природу, а з іншого — підлягають правилам заборони Фермі. Порівняно з ферміонним підходом такий опис спричиняє додаткові ускладнення, викликані особливими правилами комутації операторів Паулі. З іншого боку, він може бути ефективнішим. Наприклад, показано, що ґраткова модель Паулі дає змогу описати появу стану типу суперфлюїду (SF) (фаза з бозе-конденсатом) навіть за відсутності прямої взаємодії між частинками [10–12]. Часто для розв'язання таких задач гамільтоніан, записаний на операторах Паулі, за допомогою процедури ферміонізації [13] (див. також [14–16]) зводять до гамільтоніана, записаного на операторах Фермі (для одновимірних систем). Ґаткова модель частинок Паулі подібна до моделі Бозе–Габбарда в наближенні “жорстких” бозонів (при обмеженні на числа заповнення $n_i = 0, 1$). Останню широко застосовують для опису йонної

провідності, дослідження енергетичного спектра адсорбованих йонів на кристалічній поверхні, а також інтеркаляції в кристалах [17]. Модель Бозе–Габбарда також описує перехід від моттівського діелектрика (MI) до стану типу суперфлюїду (SF) [18–24]. Деякі автори отримують проміжну фазу “суперсолід”, яка може появитися на фазовій діаграмі при переході від зарядовпорядкованої фази (CDW) до фази SF.

У цій праці ми досліджуємо рівноважні стани одновимірного провідника Паулі на основі ґраткової моделі, яка враховує йонне перенесення, модулююче поле й короткосяжну взаємодію між йонами. Особливу увагу приділено останній, оскільки, згідно з експериментом [25] і квантово-хімічними розрахунками [26, 27], короткосяжна взаємодія є важливою в реальних системах і великою мірою визначає поведінку системи. Щобільше для провідника Паулі короткосяжна взаємодія є відповідальною за перехід до CDW-стану [28]. Ми дослідили умови переходу від зарядовпорядкованої фази (CDW) до фази типу суперфлюїду (SF), яку може розглядати як аналог суперйонної фази, і до фази типу моттівського діелектрика (MI). Аналізуючи отримані йонні одночастинкові спектральні густини та їхні зміни при зміні концентрації йонів (а також при зміні температури), ми отримуємо діаграми станів одновимірного йонного провідника.

II. МОДЕЛЬ ЙОННОГО ПРОВІДНИКА

Йонний провідник розглядаємо як ланцюжок важких нерухомих йонних груп і легких йонів, що переміщуються вздовж такого ланцюжка, заселяючи певні позиції. У спрощеному вигляді таким способом враховуємо гроттхусівський механізм йонного транспорту в реальних системах. Підсистему легких йонів описуємо таким гамільтоніаном:

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

Модель враховує переміщення йонів між сусідніми позиціями (параметр перенесення t) і взаємодію між йонами, що заселяють сусідні позиції (параметр взаємодії V), а також модулююче поле (параметр A). Поле A робить систему двопідґратковою і певною мірою імітує далекоюсяжну взаємодію між частинками, яка сприяє модуляції у просторовому розподілі легких йонів у т. зв. впорядкованій фазі (існування такої фази за низьких температур є характерною рисою суперіонних провідників). Якщо гамільтоніан (1) розглядати в межах статистики Фермі, то така модель відома як безспінова ферміонна модель. Її широко використовують в теорії сильно корельованих електронних систем [29], а також для опису йонних провідників [30]. Складніший двопідґратковий випадок цієї моделі був застосований для опису протонних провідників [31]. У цій праці застосовано підхід, який ґрунтується на “змішаній” статистиці Паулі. У

такому разі модель (1) еквівалентна розширеній моделі “жорстких” бозонів чи бозонній моделі Хаббарда з відштовхувальною взаємодією між найближчими сусідами та великим одновузловим відштовхуванням ($U \rightarrow \infty$) [32]. Останню часто застосовують для дослідження проблем бозе-конденсації.

III. МЕТОД ТОЧНОЇ ДІАГОНАЛІЗАЦІЇ

Енергетичний спектр і спектральні густини одновимірного йонного провідника Паулі ми розраховуємо методом точної діагоналізації. Розглянемо скінченний ланцюжок з періодичними граничними умовами. Для ланцюжка із N позиціями в основній області вводимо багаточастинкові стани

$$|n_1, n_2 \dots n_N\rangle. \quad (2)$$

Матриця гамільтоніана на базі цих станів є матрицею порядку $2^N \times 2^N$ і має такий вигляд:

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

де

$$\begin{aligned} H_{mn}^{(1)} &= \langle n_1 \dots | c_i^+ c_{i+1} | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - n'_i - 1) \delta(n_{i+1} - n'_{i+1} + 1) \\ &\quad \times \prod_{l \neq i; i+1} \delta(n_l - n'_l), \\ H_{mn}^{(2)} &= \langle n_1 \dots | c_{i+1}^+ c_i | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - n'_i + 1) \delta(n_{i+1} - n'_{i+1} - 1) \\ &\quad \times \prod_{l \neq i; i+1} \delta(n_l - n'_l), \\ H_{mn}^{(3)} &= \langle n_1 \dots | n_i n_{i+1} | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - 1) \delta(n'_i - 1) \delta(n_{i+1} - 1) \\ &\quad \times \delta(n'_{i+1} - 1) \prod_{l \neq i; i+1} \delta(n_l - n'_l), \\ H_{mn}^{(4)} &= \langle n_1 \dots | n_i | n'_1 \dots \rangle = \delta(n_i - 1) \delta(n'_i - 1) \prod_{l \neq i} \delta(n_l - n'_l). \end{aligned}$$

Ця матриця 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. Таке ж перетворення застосовуємо до операторів народження та знищення частинок у позиції i на ланцюжку

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

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

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

та антикомутаторну функцію Гріна

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

Уявні частини цих функцій визначають одночастинкові спектральні густини:

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^N \text{Im} \ll c_j | c_j^+ \gg_{\omega+i\varepsilon}$$

$$= -\frac{1}{\pi N} \sum_{j=1}^N \text{Im} \left[\frac{1}{Z} \sum_{pq} A_{pq}^j A_{pq}^{j*} \frac{e^{-\beta\lambda_p} - \eta e^{-\beta\lambda_q}}{\omega - (\lambda_q - \lambda_p) + i\varepsilon} \right]. \quad (8)$$

$$\text{Тут } Z = \sum_p e^{-\beta\lambda_p}.$$

Спектральні густини у (8), розраховані для комутаторної $\eta = 1$ (6) й антикомутаторної $\eta = -1$ (7) функцій Гріна відповідно, мають дискретну структуру, містять ряд δ -піків у зв'язку зі скінченним розміром ланцюжка. Якщо збільшувати розмір ланцюжка (N), дельта-піки будуть розташовуватися густіше, формуючи зонну структуру, яку отримуємо при $N = \infty$. При числових розрахунках ми обмежилися випадком $N = 10$. Уведено також малий параметр Δ для розширення δ -піків згідно з розподілом Лоренца

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

IV. ЙОННІ СПЕКТРАЛЬНІ ГУСТИНИ ТА ДІАГРАМИ СТАНІВ

Ми розрахували спектральні густини (8) в широкій області значень короткосяжної взаємодії між йонами для різних температур і значень хімічного потенціалу. Експериментальні дослідження деяких специфічних кристалів [25,33], а також квантово-хімічні розрахунки [26] дають змогу оцінити величину кореляційної константи $V = 3000 \dots 10000 \text{ см}^{-1}$; а також величину параметра переносу $t = 40 \dots 2500 \text{ см}^{-1}$. Це показує, що в реальних системах є сильна кореляція між йонами, що має вагомий вплив на структуру й енергетичний спектр системи. У нашій праці ми брали: $V/t = 0, 1, \dots 6$. Усі енергетичні параметри, включаючи kT , представлені у відношенні до параметра t , який трактується як енергетична одиниця. Аналізуючи зміну форми й характеру розрахованих частотно залежних спектральних густин при зміні параметрів моделі, ми побудували відповідні діаграми станів (рис. 1).

Діаграми представлені для $\delta < 0$ ($\delta = n - 1/2$). Діаграми симетричні щодо зміни знака δ . При їх побудові ми використали той факт, що характерною рисою комутаторної спектральної густини у фазі суперфлюїду (SF) є наявність від'ємної гілки (при $\omega < 0$), яка по'являється неперервно як продовження додатної гілки в точці $\omega = 0$ (див., наприклад [34]). На відміну від цього в зарядовпорядкованій фазі (CDW) ця гілка відділена від додатної гілки щілиною. Таким чином, ми маємо розщеплення спектра на дві підзони й відповідно модульований стан із подвоєнням періоду ґратки. Фаза CDW при $T = 0$ характерна для станів із половинним заповненням. Рівень хімічного потенціалу μ при цьому є в середині щілини. Зі зниженням рівня хімічного потенціалу й виходом його зі щілини

матимемо перехід до SF-фази, коли при $\omega = 0$ додатна гілка неперервно переходить у від'ємну. При подальшому зниженні рівня хімічного потенціалу від'ємна гілка пропадає й маємо фазовий перехід від фази суперфлюїду до фази типу моттівського діелектрика (MI), коли рівень хімічного потенціалу є нижче від дна нижньої підзони. У такому стані йони потребують певної енергії активації для індукування їхнього перенесення. Комутаторна спектральна густина при цьому має лише додатну гілку. Стан типу моттівського діелектрика буде і тоді, коли рівень хімічного потенціалу є над верхньою підзоною. У такому разі комутаторна спектральна густина має лише від'ємну гілку. Значення середньої заселеності стану n при даному μ розраховано згідно зі спектральною теоремою $n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_a(\omega) d\omega}{e^{\beta\omega} + 1}$, де ρ_a — антикомутаторна спектральна густина (густина станів).

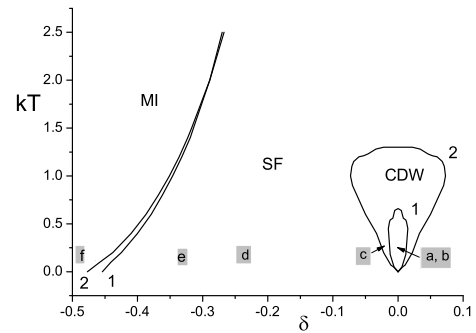


Рис. 1. Діаграма станів одновимірного йонного провідника за відсутності та наявності модулюючого поля A , відповідно: 1 — $A = 0$; 2 — $A = 1$. В обох випадках $V = 4$, $t = 1$, $\delta = n - 1/2$.

Для одновимірної структури, яка розглядається, описані вище CDW-, SF- і MI-фази та фазові переходи між ними існують лише при $T = 0$. Для $T \neq 0$ ми можемо виділяти області існування станів типу CDW, SF, MI (див. рис. 1) як таких, у яких наближено зберігається вигляд спектральних функцій, характерний для фаз при $T = 0$. У цьому випадку перехід між областями не є справжнім фазовим переходом і має кросверний характер. На рисунку 2 зображено йонний спектр (зокрема комутаторна спектральна густина) при $T = 0$ і $T = 0.2$, який ми розрахували. Для зручності введено величину $\mu' = \mu - V$.

На рисунках 2,d і 2,e показана SF-фаза. Для вищих значень μ' , ближчих до половинного заповнення, є фаза CDW, графіки 2,b і 2,c. На рисунку 2,a зображена антикомутаторна спектральна густина (густина станів) при $\mu' = 0$, тут є щілина в спектрі (CDW фаза). Як видно з рисунка 2, характер спектральних функцій при $T = 0.2$ в усіх фазах такий, як і при $T = 0$. Положення рівня хімічного потенціалу збігається з позицією $\omega = 0$. У фазі CDW, графіки 2,a і 2,b, а також у фазі MI, графік 2,f, спектральні функції при $T = 0$ і $T = 0.2$ мало відрізняються навіть кількісно. Лише вже біля границі переходу CDW-SF при $T = 0.2$ з'являються додаткові піки (див. рис. 2,c).

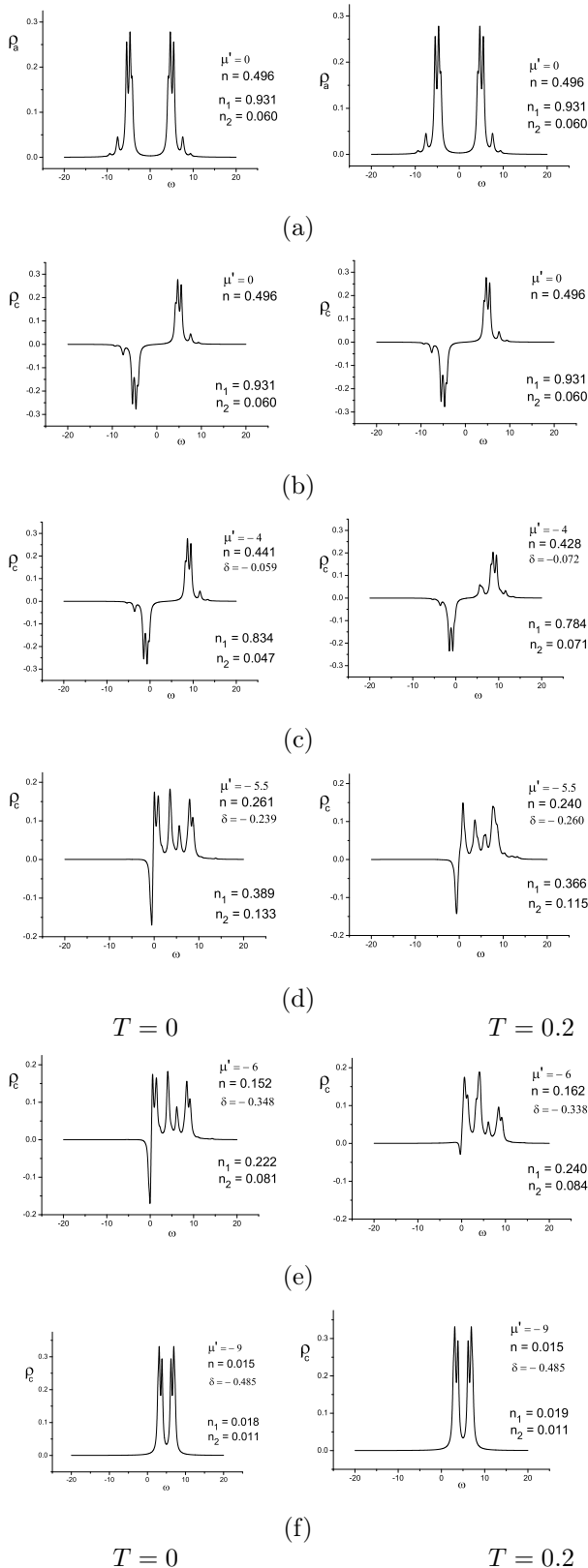


Рис. 2. Комутаторні й антикомутаторна (а) одночастинкові спектральні густини за різних температур: ліва колонка — $T = 0$, права колонка — $T = 0.2$. Положення рівня хімічного потенціалу задане значенням частоти $\omega = 0$. Рисунок (а, b, ..., f) відповідають позиціям на діаграмі на рисунку 1, $V =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

У SF-фазі температурні зміни спектральних густин дещо значніші. Так із підвищенням температури згладжуються піки спектральних густин (див. рис. 2, d, рис. 2, e). Зокрема при $\mu' = -6$, рис. 2, e, при $T = 0$ значно сильніше виражена особливість спектральної густини, типова для SF-фази, ніж при $T = 0.2$, проте характер функцій є однаковий. Наведені вище густини станів відповідають точкам на діаграмі (рис. 1) з аналогічними позначеннями (а, b, ...). Як видно з діаграми станів (рис. 1), при $T = 0$ CDW-фаза є лише в станах з половинним заповненням ($n = 1/2$) при цьому $-4.1 \leq \mu' \leq 4.1$ для $V = 4, A = 1$ (оскільки для наведеного випадку ($V = 4, A = 1$) перехід CDW-SF відбувається при $\mu' = -4.1$ і $\mu' = +4.1$). Із підвищенням температури CDW-фаза розмивається й існує не лише при $n = 1/2$; маємо ефект температурного переходу типу діелектрик-провідник (так званий перехід Мотта).

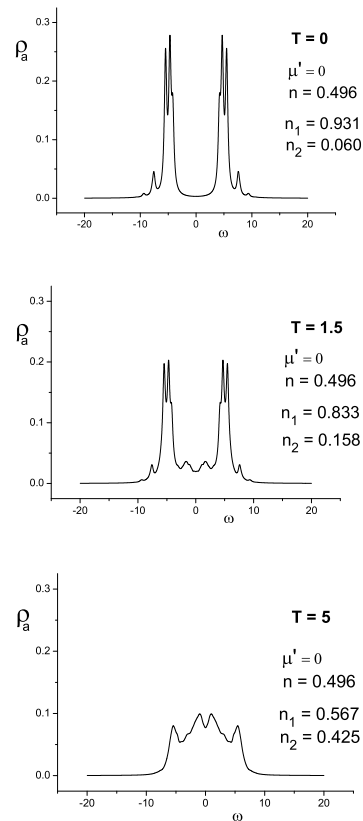


Рис. 3. Температурний перехід типу діелектрик-провідник в одновимірному йонному провіднику. Випадок половинного заповнення, $n = 1/2$, ($\mu' = 0$), $V = 4, A = 1, t = 1$. Положення рівня хімічного потенціалу збігається з позицією $\omega = 0$.

Ефект можна проілюструвати на прикладі антикомутаторної одночастинкової спектральної густини (густини станів) при різних температурах (див. рисунок 3), розрахованої за формулою (8). Щілина в спектрі ($\rho_a = 0$), що спостерігається за низьких температур при половинному заповненні, пов'язана з появою зарядовпорядкованого стану. Це зумовлено відштов-

хувальною короткодючою взаємодією між частинками, яка й формує такий тип основного стану системи. При $T \neq 0$ щілина закривається. Можливість ефекту закриття щілини з підвищенням температури для об'єктів, що досліджуються в цій роботі, показано у праці [7], а також підтверджено числовими розрахунками [35] для випадку, коли частинки підлягають статистиці Фермі. У праці [35] розрахунки проведено на основі аналітичного наближення, що базується на наближенні когерентного потенціалу (СПА), з одного боку, а з іншого боку, одночастинковий спектр розраховано чисельно з використанням методу точної діагоналізації. Для випадку коли частинки підлягають статистиці Паулі (який розглядається в цій статті), фазу, в яку переходить система з підвищенням температури, ми називаємо фазою типу суперфлюїду ("SF"). Це не є справжня SF-фаза (як при $T = 0$), оскільки ще одною ознакою SF-фази є розбіжність Фур'є-образу дійсної частини комутаторної функції Гріна при нульовій частоті ($\omega = 0$) і нульовому хвильовому векторі ($k = 0$), $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0) \rightarrow \infty$, тобто розбіжність статичної сприйнятливості йонної підсистеми щодо дії поля, пов'язаного з народженням і знищенням частинок, що описує нестійкість стосовно появи бозе-конденсату; а як показали наші розрахунки, при $T > 0$ в області "SF"-фази $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ має скінченне значення. У випадку скінченного ланцюжка, який ми розглядаємо,

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

Ми розрахували $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ для різних значень взаємодії V між йонами й різних значень модулюючого поля A . Для всіх випадків отримано значне зростання (максимум) функції $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ в області "SF"-фази за $T > 0$, але особливостей (розбіжностей) нема, і за підвищенням температури максимум розвивається (див. рисунок 4). Тільки в границі $T \rightarrow 0$ $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ як функція температури в певних областях значень хімічного потенціалу розбігається, що свідчить про нестійкість стосовно появи бозе-конденсату. На відміну від цього, у випадку вищих розмірностей ($d = 2$ чи $d = 3$) SF-фаза існує і за $T > 0$.

Включення модулюючого поля A робить сусідні положення йонів нерівноправними, і ґратка розділяється на дві підґратки з різною йонною заселеністю. Заселеність йонних позицій залежно хімічного потенціалу та від величини модулюючого поля показана на рис. 5.

Зовсім малі поля A викликають велику різницю в заселеності сусідніх йонних позицій (див. рисунок 5). Також слід відзначити, що включення модулюючого поля розширює область CDW-фази, тоді як область SF-фази при цьому зменшується. У праці [28] досліджено випадок $T > 0$. У цій статті розрахунки проведено і для $T = 0$. Ми отримали діаграми стану при

$T = 0$ залежно від величини модулюючого поля A і величини короткодючої взаємодії між йонами V . Деякі з них наведені на рисунку 6.

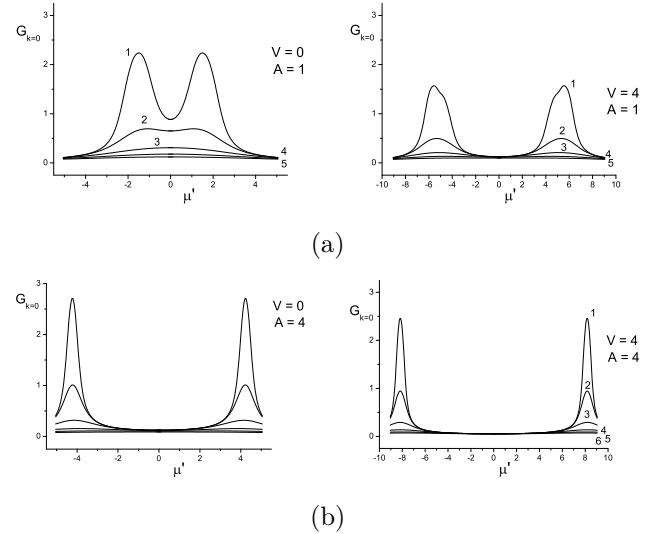


Рис. 4. Фур'є-образ дійсної частини комутаторної функції Гріна за нульової частоти ($\omega = 0$) і нульового хвильового вектора ($k = 0$), $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ для різних значень величини взаємодії між частинками і різних значень величини модулюючого поля: (a) 1 – $T = 0.2$; 2 – $T = 0.5$; 3 – $T = 1$; 4 – $T = 1.5$; 5 – $T = 2$; (b) 1 – $T = 0.1$; 2 – $T = 0.2$; 3 – $T = 0.5$; 4 – $T = 1$; 5 – $T = 1.5$; 6 – $T = 2$; $\Delta = 1 \cdot 10^{-6}$.

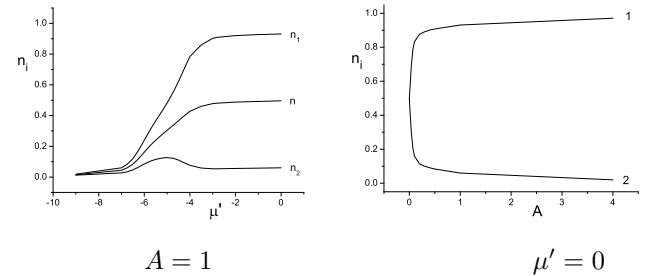


Рис. 5. Заселеність йонних позицій залежно від хімічного потенціалу і від величини модулюючого поля, $T = 0.2$; $V = 4$, $t = 1$.

Для випадку залежності від величини короткодючої взаємодії між йонами V отримано, що лінія розмежування SF- і MI-фаз є прямою лінією (значення хімічного потенціалу, при якому відбувається перехід, пропорційне до V). Подібна залежність від величини V одержана при розрахунках квантовим Монте-Карло двовимірної моделі жорстких бозонів, застосованої до високотемпературних надпровідників [23]. Зі зростанням як величини V , так і величини A збільшується щілина у спектрі в CDW-фазі. Розширення щілини у спектрі зі збільшенням взаємодії V отримували і в попередніх дослідженнях, але для Фермі-систем [8, 35]. Загалом ширина області CDW-фази зростає як зі збільшенням величини короткодючої взаємодії V , так і величини модулюючого поля A .

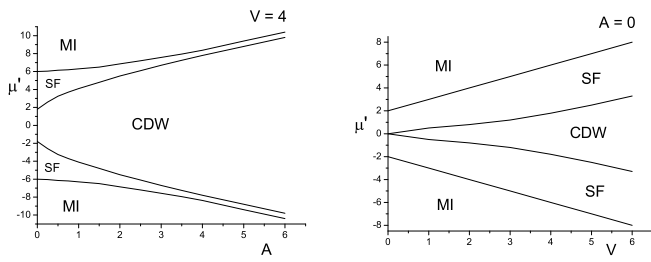


Рис. 6. Діаграми стану за $T = 0$ залежно від величини модулюючого поля A і величини короткодіючої взаємодії між йонами V .

V. ВИСНОВКИ

Структура енергетичного спектра одновимірного йонного провідника визначається величиною взаємодії між йонами, їх концентрацією й температурою. Методом точної діагоналізації показано, що при $T = 0$ короткосяжна відштовхувальна взаємодія між йонами приводить до розщеплення енергетичного спектра одновимірного йонного провідника й появи щілини у спектрі при половинному заповненні йонних позицій. При $T \neq 0$ щілина зникає, поступово заповнюючись із підвищенням температури. Установлено, що в одновимірному йонному провіднику Паулі при $T = 0$ CDW-фаза є лише при половинному заповненні станів

($n = 1/2$). Ширина області CDW-фази (в μ координатах) зростає як зі збільшенням величини короткосяжної взаємодії V , так і величини модулюючого поля A , яке можна пов'язувати з внутрішнім полем, що виникає внаслідок далекосяжної взаємодії; при цьому щілина в спектрі в цій фазі збільшується із збільшенням величин V і A . Аналізуючи одночастинкові спектральні густини $\rho_c(\omega)$ для одновимірних йонних провідників, встановлено границі фаз CDW, SF, MI при $T = 0$ для різних значень короткосяжної взаємодії й модулюючого поля. Для $T \neq 0$ границі між фазами розмиваються, і переходи між ними мають кросоверний характер, перестаючи бути реальними фазовими переходами.

Отримано, що Фур'є-образ дійсної частини комутаторної функції Гріна $\text{Re } G_{k=0}(\omega = 0)$ має максимум в області фази суперфлюїду (SF), що підтверджує тенденцію до появи такого стану в системі. Однак із підвищенням температури максимум розмивається. Це є свідченням того, що в одновимірному випадку при $T \neq 0$ немає справжньої SF-фази з бозе-конденсатом, яка може існувати лише при $T = 0$.

VI. ПОДЯКА

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

- [1] W. Salejda, N. A. Dzhavadov, Phys. Stat. Solidi B **158**, 119 (1990).
- [2] W. Salejda, N. A. Dzhavadov, Phys. Stat. Solidi B **158**, 475 (1990).
- [3] I. V. Stasyuk, N. Pavlenko, B. Hilczer, Phase Transit. **62**, 135 (1997).
- [4] N. I. Pavlenko, Phys. Rev. B **61**, 4988 (2000).
- [5] V. V. Krasnogolovets, P. M. Tomchuk, Phys. Stat. Solidi B **130**, 807 (1985).
- [6] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, B. Hilczer, Solid State Ionics **145**, 211 (2001).
- [7] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, Integr. Ferroelectrics **215** (2004).
- [8] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, Phase Transit. **80**, 63 (2007).
- [9] G. D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 780 (1976).
- [10] I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa, Condens. Matter Phys. **10**, 259 (2007).
- [11] I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa, J. Phys. Stud. **13**, 2701 (2009).
- [12] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 170 (1990).
- [13] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
- [14] O. Derzhko, T. Krokhamalskii, Phys. Stat. Solidi B **208**, 221 (1998).
- [15] O. Derzhko, T. Krokhamalskii, Phys. Stat. Solidi B **217**, 927 (2000).
- [16] O. Derzhko, J. Phys. Stud. **5**, 49 (2001).
- [17] T. S. Mysakovich, V. O. Krasnov, I. V. Stasyuk, Condens. Matter Phys. **11**, 663 (2008).
- [18] I. V. Stasyuk, T. S. Mysakovich, Condens. Matter Phys. **12**, 539 (2009).
- [19] G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992).
- [20] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, Phys. Rev. B **45**, 9900 (1992).
- [21] G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **84**, 1599 (2000).
- [22] K. Bernardet *et al.*, Phys. Rev. B **65**, 104519 (2002).
- [23] K. Bernardet, G. G. Batrouni, M. Troyer, Phys. Rev. B **66**, 054520 (2002).
- [24] G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich, Phys. Rev. Lett. **88**, 167208 (2002).
- [25] R. Hassan, E. S. Campbell, J. Chem. Phys. **97**, 4362 (1992).
- [26] M. Eckert, G. Zundel, J. Phys. Chem. **92**, 7016 (1988).
- [27] I. V. Stasyuk, R. Ya. Stetsiv, Yu. V. Sizonenko, Condens. Matter Phys. **5**, 685 (2002).
- [28] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, R. Ya. Stetsiv, Ferroelectrics **426**, 6 (2012).
- [29] R. Vlaming, G. S. Uhrig, D. Vollhardt, J. Phys. Condens. Matter **4**, 7773 (1992).
- [30] B. Lorenz, Phys. Stat. Solidi B **101**, 297 (1980).
- [31] I. V. Stasyuk, O. L. Ivankiv, N. I. Pavlenko, J. Phys. Stud. **1**, 418 (1997).
- [32] P. Niyaz, R. T. Scalettar, C. Y. Fong, G. G. Batrouni,

- Phys. Rev. B **50**, 363 (1994).
[33] W. Munch, K. D. Kreuer, U. Traub, J. Maier, Solid State Ionics **77**, 10 (1995).
[34] C. Menotti, N. Trivedi, Phys. Rev. B **77**, 235120 (2008).
[35] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, Ferroelectrics **376**, 64 (2008).

OF THE ONE-PARTICLE SPECTRAL DENSITIES AND EQUILIBRIUM STATES OF ONE-DIMENSIONAL ION CONDUCTOR

R. Ya. Stetsiv

*Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
1, Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine*

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