ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 23, № 3 (2019) 3707(7 с.)

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 23, No. 3 (2019) 3707(7 p.)

НИЗЬКОЧАСТОТНА ДИНАМІКА ОДНОВИМІРНИХ СИСТЕМ З ВОДНЕВИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ

Р. Я. Стецiв
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, Львів, 79011, Україна
(Отримано 14 лютого 2019 р.; в остаточному вигляді — 24 квітня 2019 р.)

Розраховано частотну залежність динамічної диполь-дипольної сприйнятливості одновимірної системи з водневими зв'язками з використанням формалізму функцій Ґріна. Розгляд базується на моделі жорстких бозонів. Ураховано короткосяжну взаємодію між протонами, а також перенесення протонів як на водневих зв'язках у двоямному потенціалі, так і між зв'язками. Розрахунки проведено методом точної діагоналізації для скінченного одновимірного кластера з періодичними граничними умовами. Коливні спектри вивчено залежно від частоти тунелювання протона на зв'язку; досліджено вплив перенесення частинок між зв'язками на ці спектри. Розраховано густину коливних станів, проаналізовано її частотну дисперсію. Виявлено перебудову коливного спектра в ділянці переходу до впорядкованого основного стану та появу додаткових гілок за наявності переміщення протонів між зв'язками.

Ключові слова: коливний спектр, водневий зв'язок, динамічна сприйнятливість, модель жорстких бозонів.

DOI: https://doi.org/10.30970/jps.23.3707

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

I. ВСТУП

Низькочастотна динаміка кристалічних систем з водневими зв'язками є предметом уваги експериментальних і теоретичних досліджень протягом багатьох років. Початок досліджень у цьому напрямку припадає на 1960–1970 роки, коли на прикладі сеґнетоелектричних кристалів групи KH_2PO_4 (KDP), було виявлено в спектрах ІЧ поглинання та комбінаційного розсіяння існування т.зв. м'якої моди, частота якої у парафазі зменшується і прямує до нуля при прямуванні температури до критичної, що відповідає точці фазового переходу до сеґнетофази [1, 2]. Наявність такої моди була підтверджена і для низки інших сеґнетоелектриків з водневими зв'язками (див. [1–5]). Вважається, що поява м'якої моди є свідченням суттєвої ролі ангармонізму ґраткових коливань у кристалах з водневим зв'язком. Це пов'язане, передусім, з існуванням подвійних потенціальних ям для протонів на водневих зв'язках. Внесок тунельного руху протонів, що супроводжується перерозподілом заряду та поляризацією суміжних йонних груп [6] (йонних комплексів PO_4 в кристалах KDP), є визначальним у низькочастотному коливному спектрі, структуру якого виявляє дипольна динамічна сприйнятливість.

М'якомодова поведінка однієї з нижніх гілок низькочастотного спектра (коли $\omega_i(k = 0) \to 0$ у границі $T \to T_c$ чи $\Omega_0 \to \Omega_{0c}$) [1, 2] є характерною для тривимірних водневозв'язаних систем. Найпростіше пояснення цього ефекту ґрунтується на відомій моделі де Жена [7], що враховує тунелювання протонів на водневих зв'язках та їхню далекосяжну диполь-дипольну взаємодію. Результат, що стосується існування м'якої моди і її температурної залежності, тут легко отримуємо в наближенні хаотичних фаз (НХФ). Відомо, однак, що НХФ, яке є наступним за середньопольовим наближенням під час розкладів за оберненим радіусом взаємодії [8], стає незастосовним за низьких розмінностей простору ($d = 1$ та $d = 2$). У цьому випадку кориснішим може виявитися застосування числових методик, зокрема методу точної діагоналізації. Низькочастотна дипольна динаміка 1d-моделі де Жена (чи подібних до неї загальніших ґраткових моделей) залишається у цьому плані недостатньо дослідженою.

Ґраткові моделі, що явно враховують квантові ефекти, знайшли недавно своє застосування у теорії оптичних ґраток з ультрахолодними Бозе- та Ферміатомами. Предметом досліджень та розрахунків є переважно, крім термодинамічних характеристик, процеси, пов'язані з перенесенням частинок по ґратці, такі, як йонна провідність, квантова дифузія, а також спектри одночастинкових збуджень. Вивчення особливостей відповідних спектральних густин у різних фазах системи (нормальній, просторово модульованій, надплинній і т.п.) дозволяє, як показано, зокрема, в [9,10] ідентифікувати окремі фази. Це становить додатковий засіб під час побудови фазових діаграм рівноважних станів. Іншим прикладом об'єктів, де використання квантової ґраткової моделі виявилося успішним, є кристалічні системи з водневими зв'язками, у яких можливим є перехід до станів (фаз) з суперйонною провідністю. Ґрунтуючись на орієнтаційно-тунельній моделі [11], яку можна вважати узагальненням моделі де Жена, у працях [12,13] були описані фазові переходи до суперйонного стану в підсистемі протонів та розраховані коефіцієнти протонної провідності у кристалах групи $M_3H(XO_4)_2$ де $M = NH_4$, Rb, Cs і $X =$ S, Se. Згадану модель ми поклали в основу розрахунків одночастинкових спектрів та динамічної провідності одновимірних (1d) йонних про-

Цю працю можна використовувати на умовах Міжнародної Публічної Ліцензії Creative Commons 4.0 "Із Зазначенням Авторства". Поширюючи цей матеріал, потрібно вказувати авторів і назву статті, журнальне цитування та DOI.

відників [14,15] у підході точної діагоналізації на скінченних кластерах. Такий підхід дозволив установити існування різних основних станів та описати переходи кросоверного типу між ними за $T \neq 0$, а також виявити особливості колективної динаміки, що визначає частотну дисперсію провідності [14,15]. Ідейну основу наших розрахунків становив підхід жорстких бозонів; таку методику вперше сформулював Маган [16], описуючи динаміку квантових частинок на ґратках.

Підхід точної діагоналізації дозволяє, водночас, розглянути інші динамічні характеристики, що є важливими для опису водневозв'язаних систем і вимірюються експериментально. До таких належить, як було вже зазначено, низькочастотна динамічна сприйнятливість, яку для таких об'єктів пов'язують передусім з внеском тунельного руху протонів на водневих зв'язках (крім, звичайно, стандартного внеску фононних мод).

Ця робота є продовженням попередніх [17] розрахунків частотної залежності динамічної сприйнятливості диполь-дипольного типу одновимірної ґраткової моделі з двоямним локальним ангармонічним потенціалом, що описує протонну підсистему водневозв'язаних ланцюжків йонних груп у сеґнетоелектричних кристалах. Під час обчислень ми обмежились одновимірним кластером з N-позиціями з періодичними граничними умовами. Розрахунки проведено для абсолютного нуля температури ($T = 0$). Отримано густину коливних станів. Основну увагу звернено на вплив перенесення частинок між сусідніми парами близьких позицій (що моделюють водневі зв'язки) на структуру коливного спектра, в тому числі на появу та локалізацію додаткових гілок у спектрі та на їхню інтенсивність. Як і в [17], коливний спектр вивчено залежно від частоти Ω_0-перестрибувань між найближчими позиціями.

II. МОДЕЛЬ

Наша модель квантового ґраткового газу, коли частинки підлягають статистиці Паулі, відповідає наближенню жорстких бозонів. Коли позиції частинок характеризуються симетричним двомінімумним локальним потенціалом на зв'язку, враховуємо двостадійний механізм переносу частинок, якому відповідають дві константи переносу (Ω_0, що стосується переносу частинок між двома позиціями a і b на зв'язку, і Ω_R, яка описує перенос частинок між сусідніми (водневими) зв'язками, що є завдяки орієнтаційним рухам йонних груп). Саме тому модель і відома як орієнтаційно-тунельна модель [11]. Модель включає кореляцію між найближчими частинками (протонами), зумовлену короткосяжним відштовхуванням (відповідними енерґетичними параметрами є: V на зв'язку і w для сусідніх зв'язків).

Гамільтоніан цієї моделі для ланцюжкової структури (яку тут розглядаємо) можна записати так:

$$H = (\varepsilon - \mu)\sum_i (n_{ia} + n_{ib}) + V\sum_i n_{ia}n_{ib} + w\sum_i n_{ib}n_{i+1,a} + \Omega_0\sum_i (c^+_{ia}c_{ib} + c^+_{ib}c_{ia}) + \Omega_R\sum_i (c^+_{ib}c_{i+1,a} + c^+_{i+1,a}c_{ib}). \tag{1}$$

Оператори $c_{i,\alpha}$ ($c^+_{i,\alpha}$) у нашому випадку є операторами Паулі. Вони описують знищення і народження частинок (протонів) у позиції i, α ($\alpha = a, b$); тому $n_{i,\alpha} = c^+_{i,\alpha}c_{i,\alpha}$ є число частинок (протонів) у цій позиції (тут власні значення $n_{i,a}$ і $n_{i,b}$ дорівнюють 0 чи 1 незалежно, на противагу моделі де Жена). Задачу розглядаємо у великому канонічному ансамблі. Це дає змогу, міняючи хімічний потенціал частинок, розглядати випадки з різним значенням середнього числа частинок. У цій роботі досліджено випадок, коли середнє число заповнення водневого зв'язку дорівнює 1. Це забезпечується хімічним потенціалом, що дорівнює рівним $\mu = (V + w)/2$.

III. ДІЕЛЕКТРИЧНА СПРИЙНЯТЛИВІСТЬ. МЕТОД ТОЧНОЇ ДІАГОНАЛІЗАЦІЇ

Енерґетичний спектр ланцюжкової структури ми розраховуємо методом точної діагоналізації. Матриця гамільтоніана як і матриці $c_{i,a}$ and $c^+_{i,a}$, будуються на базисі багаточастинкових станів $|n_{1,a}n_{1,b}\ldots, n_{N,a}n_{N,b}\rangle$. Матриця гамільтоніана діагоналізується числовим способом. Це відповідає перетворенню:

$$U^{-1}HU = \widetilde{H} = \sum_p \lambda_p \widetilde{X}^{pp}, \tag{2}$$

де λ_p — власні значення гамільтоніана, $\widetilde{X}^{pp}$ — оператори Габбарда. $\widetilde{X}^{pp}$ — проекційний оператор на стан p, оператор $\widetilde{X}^{pq} = |p\rangle\langle q|$ переводить стан $|q\rangle$ у стан $|p\rangle$ (див. [18], а також [8]). Таке ж перетворення застосовуємо до операторів народження і знищення частинок у позиції i, α на ланцюжку

$$U^{-1}c_{i,a}U = \sum_{pq} A^{ia}_{pq}\widetilde{X}^{pq},$$
$$U^{-1}c^+_{i,a}U = \sum_{rs} A^{ia*}_{rs}\widetilde{X}^{sr}, \tag{3}$$

де коефіцієнти A^{ia}_{pq} є матричними елементами оператора $c_{i,a}$ на новому базисі.

Внесок підсистеми рухомих частинок (протонів) у дипольний момент i-го зв'язку дорівнює

$$D^p_i = q_1 d_1 (n_{ib} - n_{ia}), \tag{4}$$

де d_1 — відстань між рівноважними положеннями частинки на зв'язку, q_1 — заряд частинки. Повний дипольний момент формується як рухомими частинками (протонами), так і їхнім найближчим оточенням (під час формування водневого зв'язку частина електронного заряду атомів водню переходить до їх оточення [6]). У цьому випадку потрібно брати до уваги ефективні дипольні моменти водневих зв'язків і розглядати їх як параметри модельного опису. Таке наближення відповідає моделі протонного впорядкування, яку успішно використовують для опису сеґнетоелектричних фазових переходів у ряді водневозв'язаних сеґнетоелектриків (див. [19]). Виходячи з цього, сумарний дипольний момент запишеться так:

$$D_i = \mu_{\text{eff}} (n_{ib} - n_{ia}), \tag{5}$$

де μ_{eff} — ефективний локальний дипольний момент, пов'язаний з водневим зв'язком.

Для розрахунку діелектричної сприйнятливості використовуємо стандартне співвідношення між сприйнятливістю і диполь-дипольною двочасовою функцією Ґріна

$$\chi_q(\omega) = -\frac{2\pi}{\hbar} \ll D|D \gg_{q,\omega} . \tag{6}$$

Методом рівнянь руху отримано такий вираз для функції Ґріна системи, що описується гамільтоніаном $\widetilde{H}$:

$$\begin{aligned}
\ll D|D \gg_{q,\omega} &= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \ll D_i|D_j \gg e^{iq(R_i - R_j)} \\
&= \frac{\hbar}{2\pi} \mu^2_{\text{eff}} \frac{1}{N^2} \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} e^{iq(R_i - R_j)} \sum_{kk_1} \Bigg(\sum_l A^{ib*}_{lk} A^{ib}_{lk_1} \sum_m A^{jb*}_{mk_1} A^{jb}_{mk} \\
&+ \sum_l A^{ia*}_{lk} A^{ia}_{lk_1} \sum_m A^{ja*}_{mk_1} A^{ja}_{mk} - \sum_l A^{ia*}_{lk} A^{ia}_{lk_1} \sum_m A^{jb*}_{mk_1} A^{jb}_{mk} \\
&- \sum_l A^{ib*}_{lk} A^{ib}_{lk_1} \sum_m A^{ja*}_{mk_1} A^{ja}_{mk} \Bigg) \frac{e^{-\beta\lambda_k} - e^{-\beta\lambda_{k_1}}}{\hbar\omega - (\lambda_{k_1} - \lambda_k)}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Тут q — компонента хвильового вектора направлена вздовж водневозв'язаного ланцюжка атомів, R_i — координата i-го зв'язку, $\beta = 1/kT$.

Уявна частина цієї функції Ґріна визначає густину коливних станів

$$\rho_q(\omega) = 2\text{Im} \ll D|D \gg_{q,\omega+i\varepsilon} . \tag{8}$$

IV. ГУСТИНА КОЛИВНИХ СТАНІВ

У наших розрахунках густини коливних станів $\rho_0(\omega)$ ми обмежились температурою рівної нулеві ($T = 0$). Числові значення модельних параметрів (включаючи $\hbar\omega$) подаються у відношенні до енерґетичного параметра $V/6$ і є безрозмірними ($V/6 \simeq 0.1 - 0.2\,\text{eV}$, таку величину отримуємо, виходячи з експериментальних даних для T_c водневозв'язаних сеґнетоелектриків). Вибір інших параметрів відповідає величинам, характерним для ланцюжкових протонних провідників (див. наприклад [20, 21]), і використовувався в наших попередніх дослідженнях їх рівноважних станів [14]. Ми проводимо розрахунки для кластера з $N = 10$ позиціями і застосовуємо періодичні граничні умови. Густина коливних станів має дискретну структуру, містить ряд δ -піків у зв'язку з скінченним розміром ланцюжка. Розширення δ-піків проводимо згідно з розподілом Лоренца

$$\delta(\hbar\omega) \to \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\hbar\omega)^2 + \Delta^2}. \tag{9}$$

Малий параметр розширення Δ в цій роботі взято рівним $\Delta = 0.01$ в безрозмірних енерґетичних одиницях.

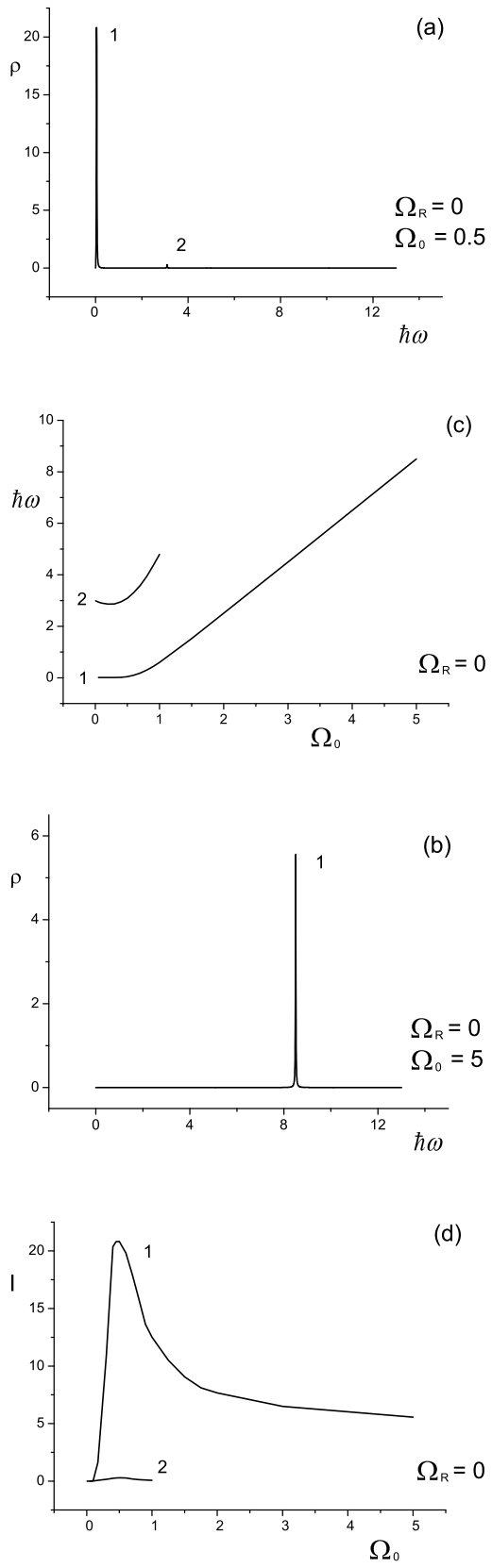

Рис. 1. Густина коливних станів (a) і (b) одновимірної системи з двоямним локальним потенціалом для частинок (протонів). Позиції (c) і інтенсивності (d) піків густини станів залежно від величини константи переносу Ω_0; $V = 6$, $w = 3$, $q = 0$; $\Omega_R = 0$.

На рис. 1 подано криві густини коливних станів та позиції й інтенсивності піків функції $\rho_{q=0}(\omega)$. За великих значень константи переносу Ω_0, коли $\Omega_0 > 2w$, ми отримали лише один пік густини коливних станів на частоті, позначеній як ω_1. Зі зростанням Ω_0 $\hbar\omega_1 \to 2\Omega_0$ (рисунок 1). Цей пік зміщується в ділянку нижчих частот $\Omega_0 < \hbar\omega_1 < 2\Omega_0$ за $w < \Omega_0 < 2w$, і його інтенсивність монотонно зростає. Із дальшим зменшенням Ω_0 позиція піка фіксується ($\omega_1 \to \omega_1^0$) і не міняється у відносно широкій зоні зміни Ω_0. Якщо $\Omega_0 \to 0$ і $\Omega_R = 0$, то інтенсивність піка ω_1^0 прямує до нуля ($I \to 0$). У цій ділянці частот появляється другий пік; він спричинений взаємодією (параметр w) між частинками на сусідніх зв'язках. Якщо $\Omega_0 \to 0$, то його позиція — $\hbar\omega_2 \approx w$.

Із включенням переносу частинок між сусідніми зв'язками ($\Omega_R \neq 0$) появляється третій пік. Він спричинений взаємодією (параметр V) між частинками на зв'язку, оскільки за такого переносу з'являються подвійно заповнені зв'язки, де $n_{ia} + n_{ib} = 2$. Із зниженням Ω_0 частота, на якій спостерігається цей пік, спадає, і якщо $\Omega_0 \to 0$, то $\hbar\omega_3 \to V$ (за малих значень параметра Ω_R $0 < \Omega_R < 1$). При цьому зміни позиції піка ω_2 не суттєві (див. рисунок 2). Із дальшим зростанням параметра Ω_R спектр ускладнюється і наведена вище інтерпретація походження піків від тієї чи іншої взаємодії між частинками вже не однозначна (рис. 2).

Густина коливних станів для $\Omega_R = 3$ і $\Omega_R = 4$ зображена на рис. 3.

Із зростанням параметра переносу Ω_R пік ω_1^0 зміщується до вищих частот (див. табл. 1, а також рис. 2) і його інтенсивність зростає, якщо $\Omega_0 \to 0$. Також варто зазначити, що за $\Omega_R > 1$ ω_1^0 вже не є найнижчою частотою, за якої спостерігається пік густини коливних станів і залежно ω_1 від параметра Ω_0 появляється широкий мінімум, положення якого зміщується в бік більших Ω_0 за зростанням Ω_R.

Ω_R	ω_1^0
0	0.0075
0.01	0.0075
1	0.0875
2	1.198
3	3.05
4	5.02

Таблиця 1. Значення частоти ω_1^0 залежно від величини параметра переносу Ω_R.

Інтенсивність піка ω_1 на два порядки більша, ніж інтенсивність решти піків. У табл. 2 наведені частоти на яких отримані піки густини коливних станів, а також інтенсивності піків, якщо $\Omega_0 = 0.5$ (як приклад) за різних значень константи переносу Ω_R, прочерк у певній графі таблиці означає, що за наведених параметрів такий пік відсутній. Густина станів тут подана у відносних одиницях, без урахування множника $\frac{\hbar}{\pi}\mu_{\text{eff}}^2$.

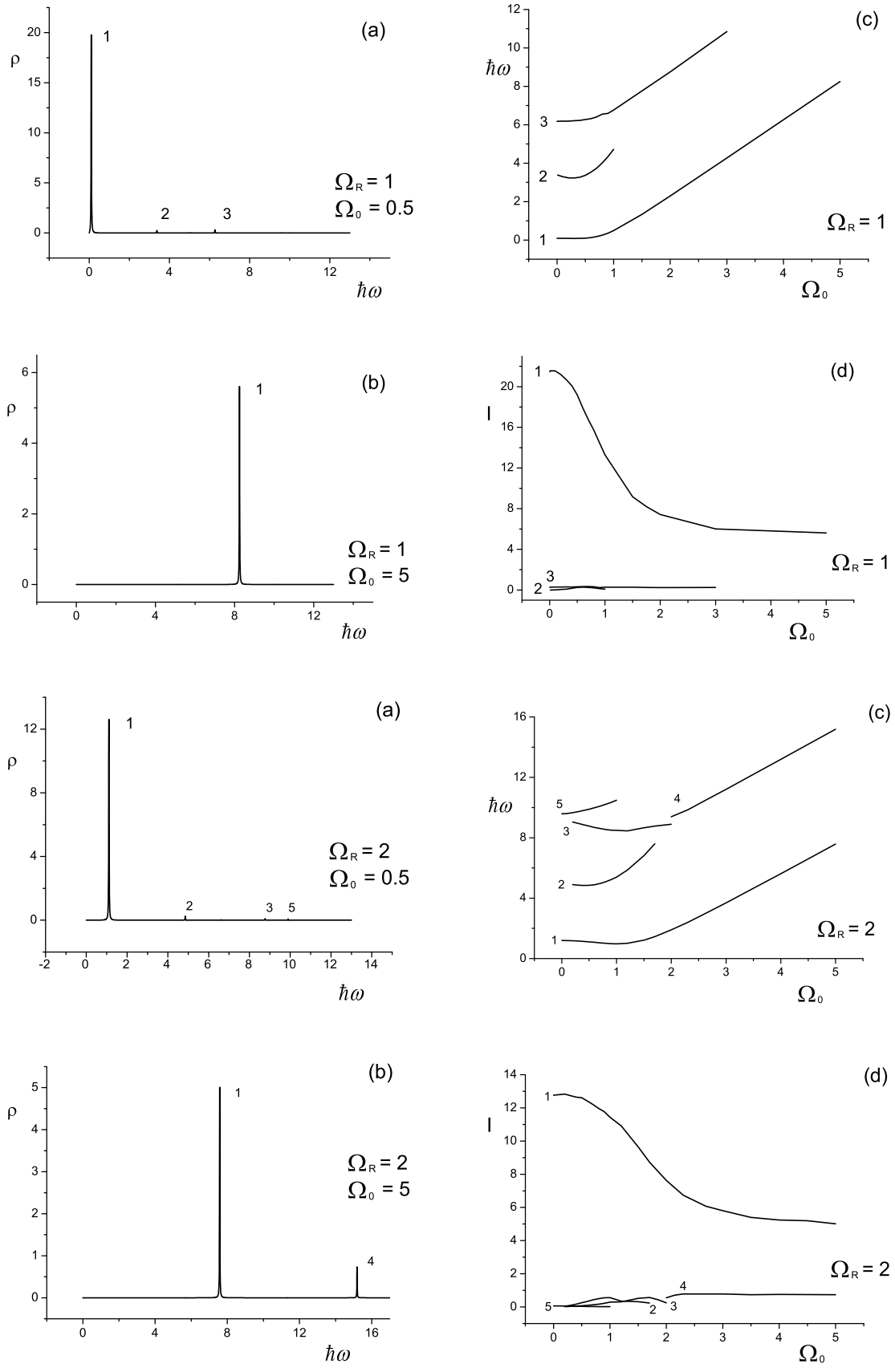

Рис. 2. Густина коливних станів (a) і (b) одновимірної системи з двоямним локальним потенціалом для частинок (протонів). Позиції (c) і інтенсивності (d) піків густини станів залежно від величини константи переносу Ω_0; $V = 6$, $w = 3$, $q = 0$ для двох випадків: $\Omega_R = 1$ і $\Omega_R = 2$.

Ω_R	$\hbar\omega_1$	I_1	$\hbar\omega_2$	I_2	$\hbar\omega_3$	I_3	$\hbar\omega_4$	I_4	$\hbar\omega_5$	I_5
0	0.043	20.82	3.09	0.294	—	—	—	—	—	—
1	0.098	19.22	3.37	0.250	6.27	0.320	—	—	—	—
2	1.108	12.61	4.85	0.256	8.77	0.074	—	—	9.89	0.032
3	2.93	8.71	7.0	0.227	8.77	0.024	12.03	0.010	—	—
4	4.90	7.44	9.14	0.193	10.93	0.018	—	—	—	—

Таблиця 2. Частоти, на яких отримані піки густини коливних станів, а також інтенсивності піків, якщо $\Omega_0 = 0.5$ за різних значень константи переносу Ω_R.

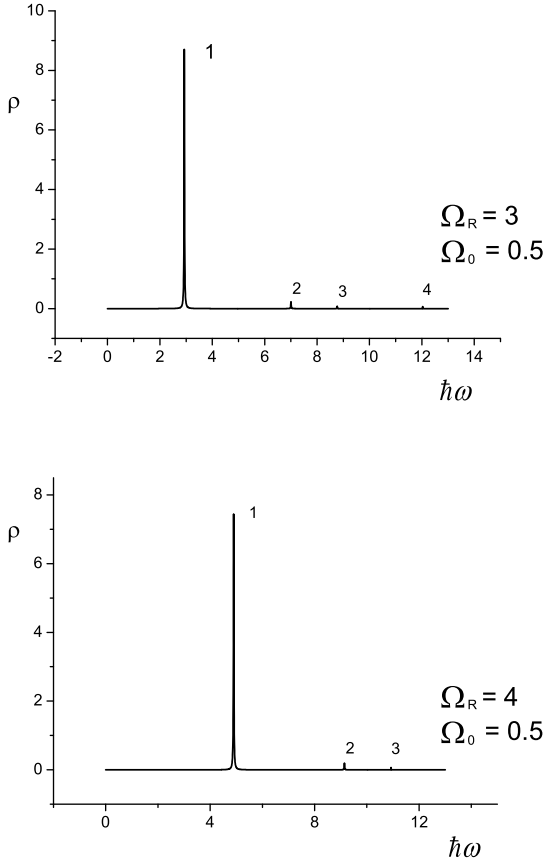

Рис. 3. Густина коливних станів одновимірної системи з двоямним локальним потенціалом для частинок (протонів). $\Omega_0 = 0.5$; $V = 6$, $w = 3$, $q = 0$ для двох випадків: $\Omega_R = 3$ і $\Omega_R = 4$.

V. ВИСНОВКИ

Отримані в цій роботі результати ілюструють перебудову дипольної сприйнятливості та коливного спектра одновимірної ґраткової моделі (що описує ланцюжкові водневозв'язані структури) в зоні низьких частот. За відсутнього перенесення частинок між зв'язками виявлено існування моди, частота якої ω_1 зменшується із прямуванням параметра тунелювання до зони значень, яка для 3d-системи могла б відповідати переходу до впорядкованої (СЕ) фази. У нашому 1d випадку не спостережено, однак, поведінки типу м'якої моди. Замість цього з'являється додаткова мода (ω_2); її частота визначається енергією взаємодії протонів (w), що є на сусідніх зв'язках.

Додаткове ускладнення спектра виникає під впливом перенесення частинок (протонів) між зв'язками (у цьому випадку модель відповідає протонному 1d-провіднику). У коливному спектрі виникає ще одна гілка з частотою ω_3; її значення визначається енергією взаємодії V-частинок на ближніх позиціях (випадок двох протонів на водневому зв'язку). Із подальшим зростанням параметра міжзв'язкового перенесення Ω_R кількість додаткових гілок у спектрі збільшується і інтерпретація їх появи, хоч і пов'язана із взаємодією V, стає ускладненою. Таке розщеплення може бути характеристикою появи колективного транспорту частинок уздовж ланцюжка (виникнення протонної енергетичної зони). Такий результат корелює з розрахунками динамічної провідності одновимірних йонних провідників, де позиція першого низькочастотного піка визначалася константою короткодійної взаємодії, аналогічної до V [15]. Зі зростанням величини параметра перенесення частинок між зв'язками спектр ускладнюється, появляються нові гілки в спектрі. Зауважимо, що ми навели результати розрахунків за $T = 0$. За ненульових температур відбувається додаткове розщеплення спектра (розширення згаданих піків густини коливних станів, а також поява нових).

[1] R. Blinc, B. Žekš, Adv. Phys. **21**, 693 (1972); https://doi.org/10.1080/00018737200101348.

[2] R. Blinc, Croat. Chem. Acta. **1–2**, 7 (1982).

[3] N. Nakaushi, A. Nagasava, Y. Murakami, J. Phys. Colloq. **43**, C4 (1982); https://doi.org/10.1051/jphyscol:1982403.

[4] D. Merunka, B. Rakvin, Phys. Rev. B **66**, 174101 (2002); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.174101.

[5] T. Shigenari, in *Ferroelectric Materials: Synthesis and Characterization*, edited by A. Peláiz-Barranco (InTech, Rijeka, 2015), p. 3; https://doi.org/10.5772/60613.

[6] I. V. Stasyuk, R.Ya. Stetsiv, Yu.V. Sizonenko, Condens. Matter Phys. **5**, 685 (2002); https://doi.org/10.5488/CMP.5.4.685.

[7] P. G. De Gennes, Solid State Commun. **1**, 132 (1963); https://doi.org/10.1016/0038-1098(63)90212-6.

[8] І. В. Стасюк, *Функції Гріна у квантовій статистиці твердих тіл* (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2013).

[9] I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, Condens. Matter Phys. **16**, 23005 (2013); https://doi.org/10.5488/CMP.16.23005.
[10] C. Menotti, N. Trivedi, Phys. Rev. B. **77**, 235120 (2008); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.235120.
[11] I. V. Stasyuk, O. L. Ivankiv, N. I. Pavlenko, J. Phys. Stud. **1**, 418 (1997).
[12] I. V. Stasyuk, N. I. Pavlenko, B. Hilczer, Phase Transit. **62**, 135 (1997); https://doi.org/10.1080/01411599708220065.
[13] N. I. Pavlenko, I. V. Stasyuk, J. Chem. Phys. **114**, 4607 (2001); https://doi.org/10.1063/1.1348030.
[14] R.Ya. Stetsiv, I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, Ukr. J. Phys. **59**, 515 (2014); https://doi.org/10.15407/ujpe59.05.0515.
[15] I. V. Stasyuk, R. Ya. Stetsiv, Condens. Matter Phys. **19**, 43704 (2016); https://doi.org/10.5488/CMP.19.43704.
[16] G. D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 780 (1976); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.780.
[17] I. Stasyuk, R. Stetsiv, O. Farenyuk, Math. Mod. Comp. **5**, 235 (2018); https://doi.org/10.23939/mmc2018.02.235.
[18] J. Hubbard, Proc. R. Soc. Lond. **A 285**, 542 (1965); https://doi.org/10.1098/rspa.1965.0124.
[19] I. V. Stasyuk, R. R. Levitskii, A. P. Moina, Phys. Rev. B **59**, 8530(1999); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.8530.
[20] W. Münch, K. D. Kreuer, U. Traub., J. Maier, Solid State Ionics **77**, 10 (1995); https://doi.org/10.1016/0167-2738(95)00045-8.
[21] R. Hassan, E. S. Campbell, J. Chem. Phys. **97**, 4362 (1992); https://doi.org/10.1063/1.463902.

LOW-FREQUENCY DYNAMICS OF ONE-DIMENSIONAL SYSTEMS WITH HYDROGEN BONDS

R. Ya. Stetsiv
Institute for Condensed Matter Physics National Academy of Sciences of Ukraine, 1, Svientsitskii St., Lviv, UA–79011, Ukraine

The frequency dependence of the dynamical susceptibility of the dipole-dipole type one-dimensional systems with hydrogen bonds is calculated using the Green's function formalism. The consideration is based on the hard-core boson model. We take into account short-range interactions between protons, and their transfer along hydrogen bonds with the two minima local anharmonic potential as well as their inter-bond hopping. Calculations are performed for a finite one-dimensional cluster with periodic boundary conditions using exact diagonalization technique. The vibrational spectra are studied at $T = 0$ depending on the particles (protons) tunneling frequency on the bond; the influence of the transfer of particles between the bonds on these spectra is also investigated. The density of vibrational states is found, its frequency dependence is analyzed. In the absence of the hopping of particles between bonds, the existence of a mode whose frequency decreases if the tunneling parameter approaches the region of the values that, in the case of a $3d$ system, could correspond to the transition to the ordered (FE) phase, is revealed. But in our 1d case we see, however, the absence of the behavior of the soft mode type. Instead, a new branch appears; its frequency is determined by the energy of repulsion of the protons residing on nearest bonds. An additional complication of the spectrum arises due to the transfer of protons between bonds (in this case the model describes the proton 1d conductor). Another branch appears in this case; its frequency is determined by the energy of interaction of the nearest particles (the case of two protons on hydrogen bond). The splitting of the spectrum can be considered as a manifestation of the appearance of the collective transport of particles along a chain.