


СТРУКТУРНИЙ І ДИНАМІЧНИЙ СТРУКТУРНИЙ ФАКТОРИ ОДНОВИМІРНИХ ЙОННИХ ПРОВІДНИКІВ

Р. Я. Стеців¹, О. Я. Фаренюк^{1,2} 

¹ Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свенцицького, 1, Львів, 79011, Україна
e-mail: stetsiv@ictp.lviv.ua

² Український Католицький Університет, вул. Козельницька, 2а, Львів, 79026, Україна
e-mail: indrekis@ictp.lviv.ua

(Отримано 13 листопада 2023 р.; в остаточному вигляді — 15 лютого 2024 р.; прийнято до друку — 28 лютого 2024 р.; опубліковано онлайн — 02 травня 2024 р.)

Методом точної діагоналізації в межах розширеної моделі жорстких бозонів розраховано енергетичний спектр одновимірного скінченного йонного провідника з періодичними граничними умовами. Досліджено одночастинкову кореляцію, розраховано структурний і динамічний структурний фактори за температури $T = 0$. Показано наявність далекоюсяжної одночастинкової кореляції у фазі типу суперфлюїду (SF). Отримані максимуми структурного фактора при хвильовому векторі $k = \pi/a$ за половинного заповнення йонних позицій (густина $\rho = 0.5$), як і максимуми динамічного структурного фактора в ділянці частот, що за енергією відповідають ширині забороненої зони, підтверджують наявність упорядкованої модульованої (CDW) фази за $\rho = 0.5$. Наявність максимумів динамічного структурного фактора в ділянці низьких частот за $\rho = 0.25$ підтверджує можливість фази типу суперфлюїду.

Ключові слова: йонний провідник, модель жорстких бозонів, структурний фактор, динамічний структурний фактор.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.28.2701>

I. ВСТУП

Протягом останніх десятиліть спостерігаємо зростання зацікавленості системами низької розмірності традиційно у фізиці конденсованих середовищ, а нещодавно й у фізиці квантових газів. Сучасні досягнення в атомній хвильовій технології [1–5], реалізація квантових газів у дуже анізотропних пастках [6, 7], отримання конденсату Бозе–Айнштайна на оптичних ґратках [8–10] дали змогу експериментаторам одержати 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. У попередніх наших працях установлені ділянки наявності різних фаз для одновимірних йонних провідників залежно від величини взаємодії між йонами [11–14]. Показано можливість появи фази типу суперфлюїду (SF) (фаза з безмежно великою (розбіжною) довжиною кореляції між частинками). Розраховано динамічну та статичну провідності [15].

Квантову систему взаємодійних частинок можна характеризувати аналізом її реакції на слабе збурення. У межах теорії лінійного відгуку ключова величина — динамічний структурний чинник, який є фур'є-перетворенням просторово-часової кореляційної функції густини системи. Знання динамічного структурного фактора дає повну картину появи квазічастинкових мод, енергію їх збудження, 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.

У цій праці розраховано структурний і динамічний структурні фактори. Теоретичний опис систем з йонною провідністю переважно ґрунтується на ґраткових моделях. Частина з них трактує йони 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 ґратки вздовж 1D труб [32].

У цій праці, використовуючи метод точної діагоналізації для скінчених одновимірних йонних провідників з періодичними граничними умовами, у межах підходу жорстких бозонів розраховано енергетичний спектр, досліджено одночастинкову кореляцію, розраховано структурний і динамічний структурний фактори за температури $T = 0$. Досліджено залежність динамічного структурного фактора від хвильового вектора й частоти в різних фазах йонного провідника.

II. МОДЕЛЬ

Йонні провідники ми описуємо квантовою ґратковою моделлю в наближенні жорстких бозонів. Розглядаємо одновимірний кластер з N позиціями для йона з періодичними граничними умовами. Гамільто-



ніан 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 в просторовому розподілі йонів у т.зв. впорядкованій фазі (наявність такої фази за низьких температур є характерною рисою суперйонних провідників).

Тут оператори c_i , (c_i^+) є операторами жорстких бозонів, (операторами частинок Паулі). Вони описують знищення (народження) частинки в позиції i , $n_i = c_i^+ c_i$ — заселеність цієї позиції (тут власні значення n_i дорівнюють 0 чи 1). Оператори народження та знищення частинок Паулі, що належать до різних позицій, комутовують, як це властиво для бозонів:

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

У тій самій позиції ці оператори задовольняють антикомутаційні співвідношення, типові для ферміонів:

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

III. ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Енергетичний спектр ланцюжкової структури з періодичними граничними умовами розраховано методом точної діагоналізації. Для ланцюжка із N позиціями в основній ділянці вводимо багаточастинкові стани $|n_1, n_2 \dots n_N\rangle$. Матриця гамільтоніана, як і матриці c_i і c_i^+ , будується на базисі цих станів. Вона 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 Габбарда. \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 саме перетворення застосовуємо до операторів народження та знищення частинок у позиції i на ланцюжку:

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

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

Для характеристики різних фаз необхідно розрахувати ряд фізичних величин. Поява далекого порядку вказує на наявність упорядкованої фази (фази “solid”)

(зокрема фази charge density waves, CDW, яку ми отримали 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 так (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:

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

У 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 $q + k$.

У 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 одержано вираз для функції Гріна $\langle \langle n_j | n_l \rangle \rangle_\omega$ системи, що описується гамільтоніаном (1), а також отримано вирази для відповідних середніх у формулах (9), (7). Унаслідок 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:

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

Динамічний структурний фактор:

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

Для докладнішого аналізу отриманих у цій праці результатів на рисунках 1, 2 наведені деякі з одержаних раніше фазових діаграм для моделі йонного провідника, описаної вище [36, 37], і в цій статті подаємо розрахунки характеристик (14), (15), (16) при параметрах моделі, що відповідають цим діаграмам.

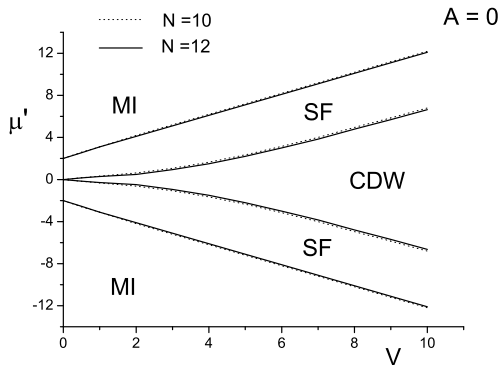


Рис. 1. Фазова діаграма одновимірного йонного провідника в (μ', V) координатах, $(T = 0)$ [37]

Fig. 1. Phase diagram for a one-dimensional ionic conductor in the (μ', V) coordinates, $(T = 0)$ [37]

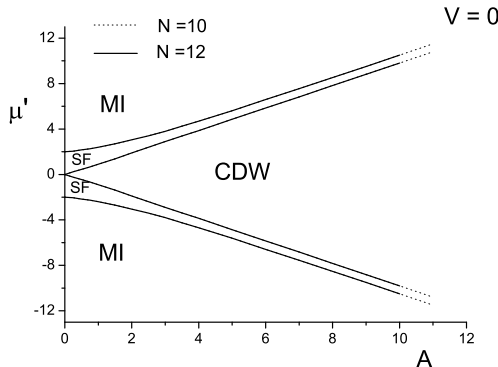


Рис. 2. Фазова діаграма одновимірного йонного провідника в (μ', A) координатах, $(T = 0)$ [37]

Fig. 2. Phase diagram for a one-dimensional ionic conductor in the (μ', A) coordinates, $(T = 0)$ [37]

Ці фазові діаграми були отримані для $N = 10$ і $N = 12$. На рис. 1 фазова діаграма є в координатах (μ', V) , якщо $A = 0$. Розрахунки показують, що різниця в розташуванні границі між фазами (в μ' -координатах) для $N = 10$ і $N = 12$ становить 2–3

відсотки. Для фазової діаграми в (μ', A) -координатах (рис. 2; тут $V = 0$) ця різниця становить лише 0.5 відсотка і ця діаграма збігається з точною фазовою діаграмою, отриманою аналітично в працях [24, 26]. Точний аналітичний розв'язок одержано застосуванням перетворення Йордана-Вігнера, яке робить можливим перехід від гамільтоніана жорстких бозонів до гамільтоніана незваємодійних безспінових ферміонів (лише в одновимірному випадку і лише за $V = 0$). На цих діаграмах ми отримали, що ширина ділянки CDW-фази (у μ' -координатах) зростає як зі збільшенням величини короткосяжної взаємодії V (див. рис. 1), так і величини модульовального поля A (див. рис. 2). В останньому випадку ми одержали лінійну залежність від поля A (лінії, що розділяють CDW- і SF-фази, мають вигляд $\mu' = A$ і $\mu' = -A$).

Числові значення всіх енергетичних параметрів (включно з $\hbar\omega$) подано у відношенні до параметра переносу t , і вони безрозмірні. Експериментальні дані, квантово-хімічні розрахунки, напівемпіричні теоретичні оцінки пропонують широку ділянку значень величини короткосяжної взаємодії між йонами, $V = 3 \cdot 10^3 \dots 10^4 \text{ cm}^{-1}$, залежно від об'єктів, які розглядаємо [38–40]. Параметр переносу t набуває значень у межах $40 \dots 2500 \text{ cm}^{-1}$. Значення константи короткосяжної кореляції між частинками ми міняли в широкій межі: $V/t = 0, 1, \dots, 10$. Для зручності введено величину $\mu' = \mu - V$. Усі розрахунки виконано для ланцюжка із $N = 12$ і температури, що дорівнює нулеві ($T = 0$).

IV. СТРУКТУРНИЙ ФАКТОР

Структурний фактор $S(k)$ розраховано за співвідношенням (15). Стосовно величини $n(k)$, то ефективніше досліджувати уніфіковану характеристику, тому у виразі (14) потрібно не враховувати доданків з $R_j = R_s$, що в сумі визначають середню заселеність йонних позицій, поділену на кількість позицій N , і є однаковими для всіх значень хвильового вектора. Таким способом ми розраховували $n'(k)$:

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

Ми отримали пік в $n'(k)$ за $k = 0$ і $k = \pi/a$ у фазі типу суперфлюїду, що вказує на далекосяжну одночастинкову кореляцію (тут a — стала ґратки). На рис. 3 показано отриману залежність $n'(k)$ від хвильового вектора в околі $k = \pi/a$ в SF-фазі й у впорядкованій, модульованій CDW-фазі за різних значень величини взаємодії між частинками V і від різних значень величини модульовального поля A . Під час розрахунків ми обмежилися випадком $N = 12$. Ми не отримуємо розбіжності $n'(k)$ за $k \rightarrow 0$ через невеликий розмір ланцюжкової структури, яку тут розглядаємо. У попередніх наших працях (див., наприклад, [12, 36]) показано, що в одновимірному випадку, який розглядаємо, CDW-фаза реалізується лише за половинного запов-

нення йонних позицій (густина $\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle n_i \rangle = 0.5$); за $\rho = 0$ і $\rho = 1$ маємо стан моттівського діелектрика (MI), за решти проміжних густин ми отримали SF-фазу. Між описаними вище фазами маємо квантові

фазові переходи, якщо $T = 0$, тобто зміну основного стану системи зі зміною деяких параметрів. На рисунку 3 SF-фаза зображена за густини $\rho = 0.25$, за якої здебільшого ми отримали максимальні значення $n'(k)$ при $k = 0$ і $k = \pi/a$.

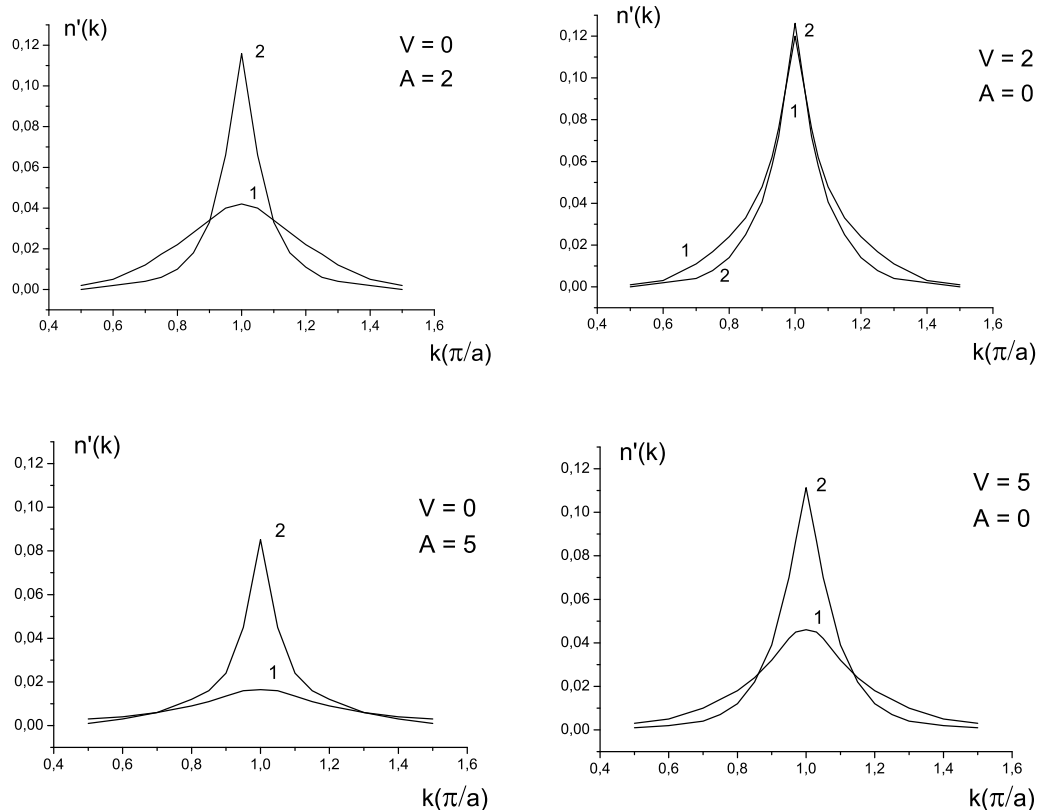


Рис. 3. Залежність $n'(k)$ від хвильового вектора. Зліва при $V = 0$, $A = 2$ і $A = 5$, праворуч $A = 0$, $V = 2$ і $V = 5$. На всіх графіках крива 1 – в CDW-фазі ($\rho = 0.5$), крива 2 – в SF-фазі ($\rho = 0.25$)

Fig. 3. Dependence of $n'(k)$ on the wave vector. On the left: for $V = 0$, $A = 2$ and $A = 5$, on the right: for $A = 0$, $V = 2$ and $V = 5$. On all graphs, curve 1 is in CDW-phase ($\rho = 0.5$), curve 2 is in SF-phase ($\rho = 0.25$)

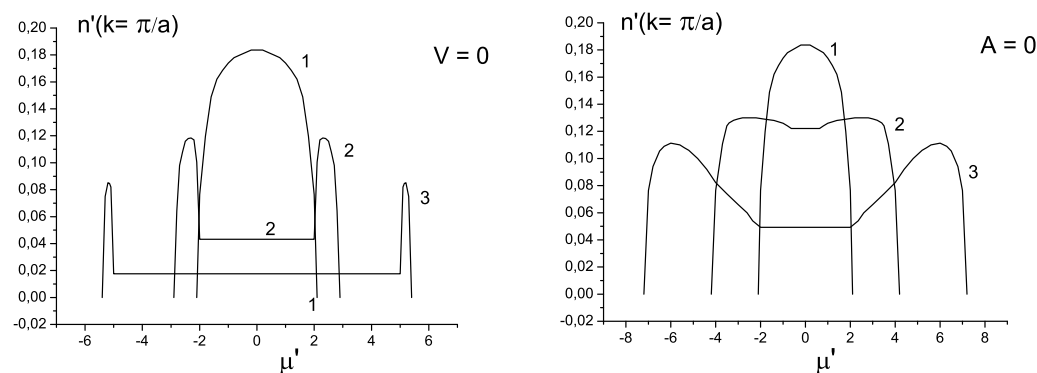


Рис. 4. Залежність $n'(k = \pi/a)$ від хімічного потенціалу μ' . Зліва криві 1; 2; 3, відповідно, за $A = 0$; 2; 5, ($V = 0$); праворуч криві 1; 2; 3, відповідно, за $V = 0$; 2; 5, ($A = 0$)

Fig. 4. Dependence of $n'(k = \pi/a)$ on the chemical potential μ' . On the left: 1; 2; 3 curves, respectively, for $A = 0$; 2; 5, ($V = 0$); on the right: 1; 2; 3 curves, respectively, for $V = 0$; 2; 5, ($A = 0$)

На рис. 4 проказана 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.

Отримано максимуми $n'(k = \pi/a)$ в SF-фазі й мінімальні значення в CDW-фазі. За наявності модульовального поля A -максимуми вузьчі, як і межі ділянки SF-фази. Зокрема, як приклад, якщо $A = 5$ ($V = 0$) (див. рис. 2 і відповідно 4), то SF-фаза є у вузьких межах $-5.6 < \mu' < -4.86$ і $4.86 < \mu' < 5.6$, тоді як CDW-фаза займає широку ділянку $-4.86 < \mu' < 4.86$, що відповідає щілині в спектрі, і на всьому цьому проміжку середня заселеність йонних позицій дорівнює $1/2$, ($\rho = 0.5$). Оптимальніший має вигляд залежність $n'(k = \pi/a)$ від густини ρ (рис. 5).

Тут, знову ж, якщо $\rho = 0.5$, то чіткіше виділяється CDW-фаза за наявності модульовального поля A .

Наявність як короткосяжної відштовхувальної вза-

ємодії між йонами, що заселяють сусідні позиції (V), так і модульовального поля (A), навіть як завгодно малими за величиною, спричиняє утворення щілини в спектрі і, відповідно, появу CDW-фази за половинного заповнення йонних позицій (див. фазові діаграми, рис. 1, 2). Поле A значно сильніше, ніж короткосяжна взаємодія між частинками V , розширює ділянку CDW-фази (у координатах μ') і пригнічує SF-фазу. Очевидно, саме тому ми отримали (див. рис. 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 .

У цій статті подано 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 зображено отриману залежність $S(k = \pi/a)$ від густини ρ .

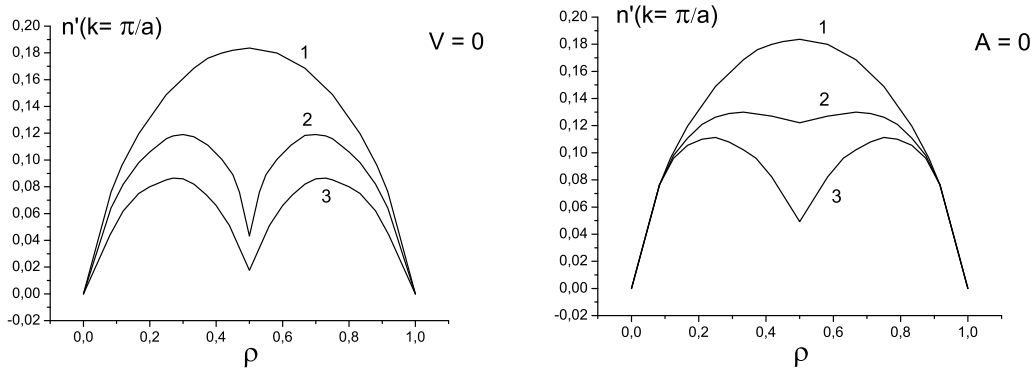


Рис. 5. Залежність $n'(k = \pi/a)$ від густини ρ . Зліва криві 1; 2; 3 відповідно за $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); праворуч криві 1; 2; 3 відповідно за $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$)

Fig. 5. Dependence of $n'(k = \pi/a)$ on the density ρ . On the left: 1; 2; 3 curves, respectively, for $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); on the right: 1; 2; 3 curves, respectively, for $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$)

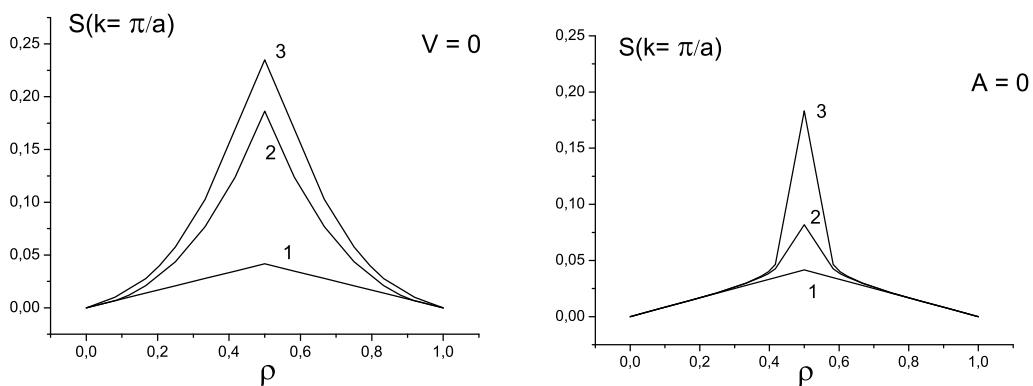


Рис. 6. Залежність структурного фактора $S(k = \pi/a)$ від густини ρ . Зліва криві 1; 2; 3 відповідно за $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); праворуч криві 1; 2; 3 відповідно за $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$)

Fig. 6. Dependence of $n'(k = \pi/a)$ on the density ρ . On the left: 1; 2; 3 curves, respectively, for $A = 0; 2; 5$, ($V = 0$); on the right: 1; 2; 3 curves, respectively, for $V = 0; 2; 5$, ($A = 0$)

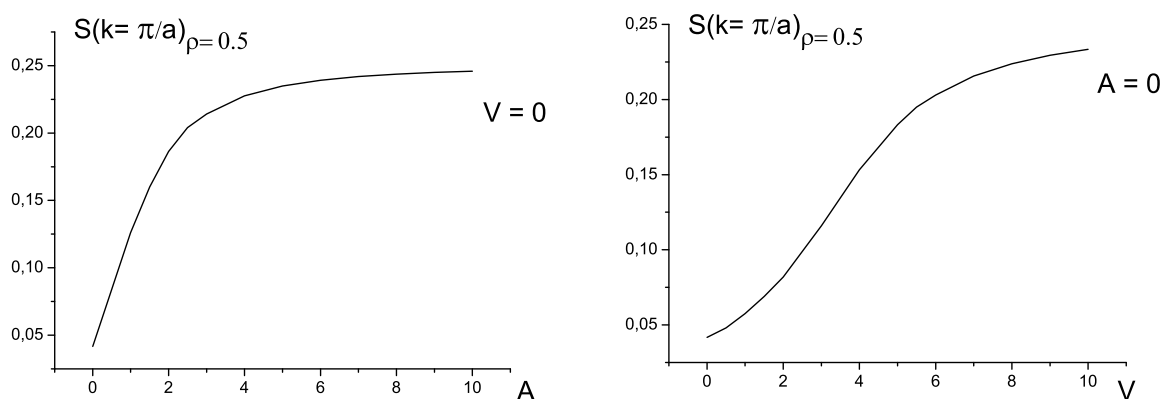


Рис. 7. Залежність структурного фактора $S(k = \pi/a)$ за густини $\rho = 0.5$ від модулювального поля A ($V = 0$) і від взаємодії між частинками V ($A = 0$)

Fig. 7. Dependence of structure factor $S(k = \pi/a)$ with the density $\rho = 0.5$ on the modulating field A ($V = 0$); and on the interactions between ions V ($A = 0$)

Одержаний максимум $S(k = \pi/a)$ за $\rho = 0.5$ підтверджує наявність упорядкованої модульованої структури CDW-фази. Також підтверджується те, що наявність модульовального поля A значно більше, ніж взаємодія V , сприяє утворенню модульованої структури. 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 .

Якщо $A = 10$ ($V = 0$), то крива вже виходить на насичення, тоді як за $V = 10$ ($A = 0$) такого не спостерігаємо. Згідно з нашими розрахунками для виходу кривої на насичення потрібна величина взаємодії $V > 20$.

V. ДИНАМІЧНИЙ СТРУКТУРНИЙ ФАКТОР

Динамічний структурний фактор $S(k, \omega)$ розраховуємо за співвідношенням (16). Частотна залежність $S(k, \omega)$ має дискретну структуру та містить ряд δ -піків у зв'язку зі скінченним розміром ланцюжка. Розраховуючи, ми обмежилися випадком $N = 12$. Уведено також малий параметр Δ для розширення δ -піків згідно з розподілом Лоренца $\delta(\hbar\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\hbar\omega)^2 + \Delta^2}$. У цій праці Δ узято рівним $\Delta = 0.15$ у безрозмірних енергетичних одиницях. На рисунках 8-10 зображено результати розрахунку залежності $S(k, \omega)$ від хвильового вектора та частоти в різних фазах і за різних значень короткосяжної взаємодії між частинками V і модульовального поля A . На рисунку 8 показано $S(k, \omega)$ у модульованій CDW-фазі ($\rho = 0.5$) для $V = 0$; $A = 2$ і $A = 5$. На відповідній фазовій діаграмі (див. рис. 2) це відповідає $\mu' = 0$ і відповідно $A = 2$ чи $A = 5$. У ділянці частот для обох випадків отримано широкий максимум, який являє собою групу піків, що за енергією відповідають ширині забороненої зони (щільність в спектрі E_g), яку легко бачити на відповідній фазовій діаграмі. Зазначимо, що одночастинкові спектральні густини, з використанням яких будувалися

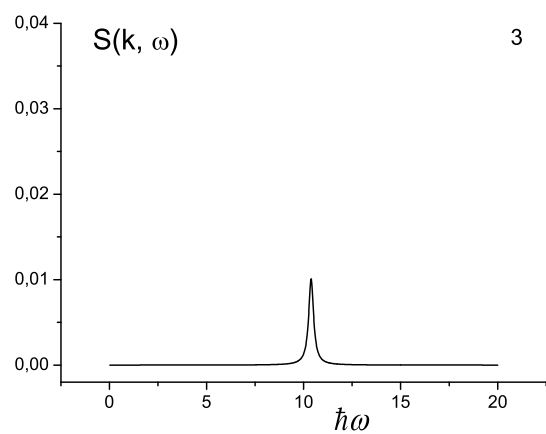
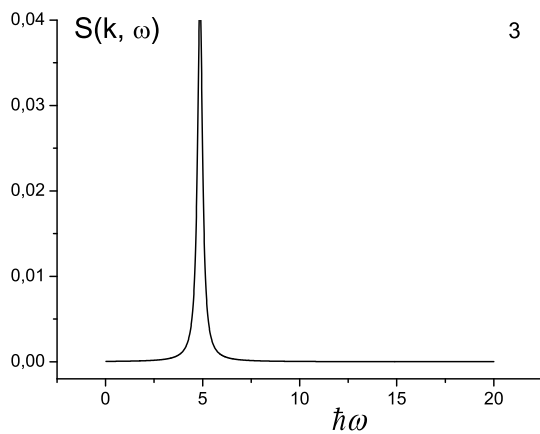
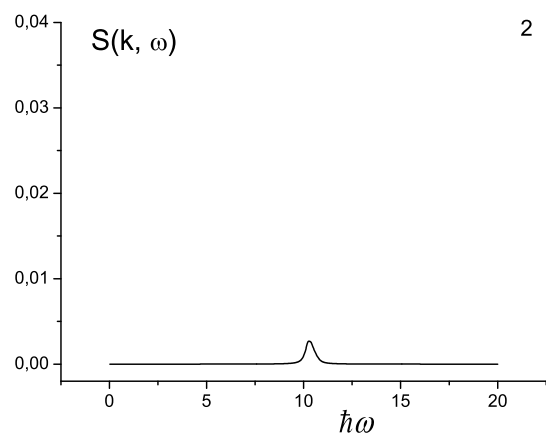
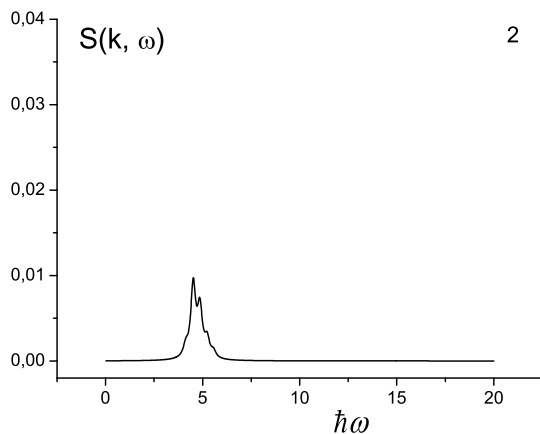
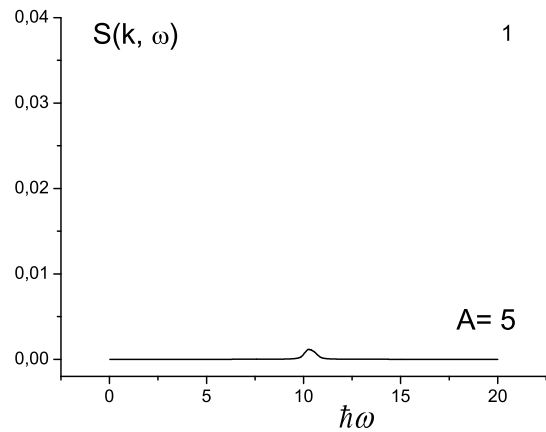
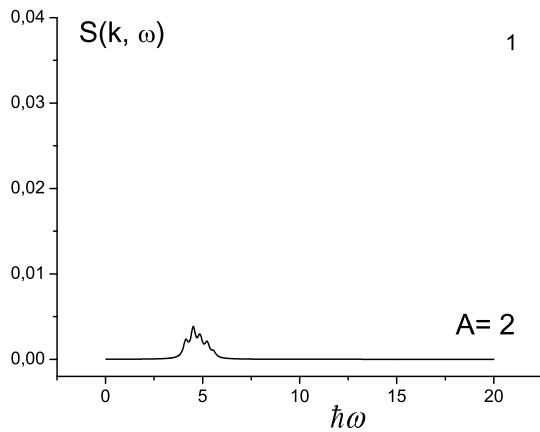
фазові діаграми (див. [12, 36, 37]) і динамічний структурний фактор $S(k, \omega)$, мають узагалі різні особливості. $S(k, \omega)$ визначається двочастинковими переходами. Тому не треба очікувати в усьому аналогії в їхній поведінці.

Для $A = 2$ група піків є на проміжку $4 < \hbar\omega < 6$, для $A = 5$ — на проміжку $10 < \hbar\omega < 11$ (усі енергії в одиницях t). Як видно з рис. 8, положення отриманих груп піків практично не залежить від хвильового вектора k , але зі зростанням k у межах $0 \leq k \leq \pi/a$ відбувається перерозподіл інтенсивностей піків усередині груп й інтенсивність їхня зростає, починаючи від $k = 0$, де $S(k = 0, \omega) = 0$. Низькочастотних піків нема. Аналіз енергетичного спектра системи в CDW-фазі свідчить, що в спектрі відсутні низькоенергетичні збуджені стани. За $T = 0$ маємо переходи лише з основного стану в збуджені. Натомість, в SF-фазі (див. рис. 9), отримано низькочастотні піки, що є підтвердженням можливості такої фази. Відповідно, і в енергетичному спектрі ми маємо наявність низькоенергетичних збуджених станів, у які можливі переходи з основного стану системи. Правила відбору, які визначаються матрицями A_{lm} , регулюють, у які стани відбуваються переходи. На рис. 9 зображено $S(k, \omega)$ 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 ми отримали максимум $S(k, \omega)$ й у високочастотній ділянці, де спостерігався максимум в CDW-фазі, але тут він значно вужчий. Інтенсивності піків, що формують цей максимум, суттєво менші, ніж інтенсивності низькочастотних піків. Як і у CDW-фазі, положення максимуму слабо залежить від хвильового вектора k .

На рис. 10 зображено $S(k, \omega)$ в SF-фазі для $A = 0$; $V = 2$ 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) у ділянці низьких частот. Зі зміною хвильового вектора k відбувається перерозподіл інтенсивностей піків. Широкий максимум $S(k, \omega)$ в SF-фазі за $A = 0$ є в тій самій ділянці частот $0 < \hbar\omega < 5$ для $V = 2$ і $V = 5$ (див. рис. 10) і також для $V = 0$, якого тут не подано. Різниця лише в інтенсивності окремих піків, які формують цей максимум. Отже, вплив

міжчастинкової взаємодії V на спектри $S(k, \omega)$ значно слабший, ніж вплив поля A . У всіх випадках інтенсивності низькочастотних піків (SF-фаза) зростають зі зростанням хвильового вектора k на проміжку $0 \leq k \leq \pi/2a$ і спадають на проміжку $\pi/2a \leq k \leq \pi/a$, є і відсутні за $k = \pi/a$ (як і за $k = 0$). Інтенсивності високочастотних піків, які є в ділянці енергії E_g , суттєво зростають на всьому проміжку $0 \leq k \leq \pi/a$.



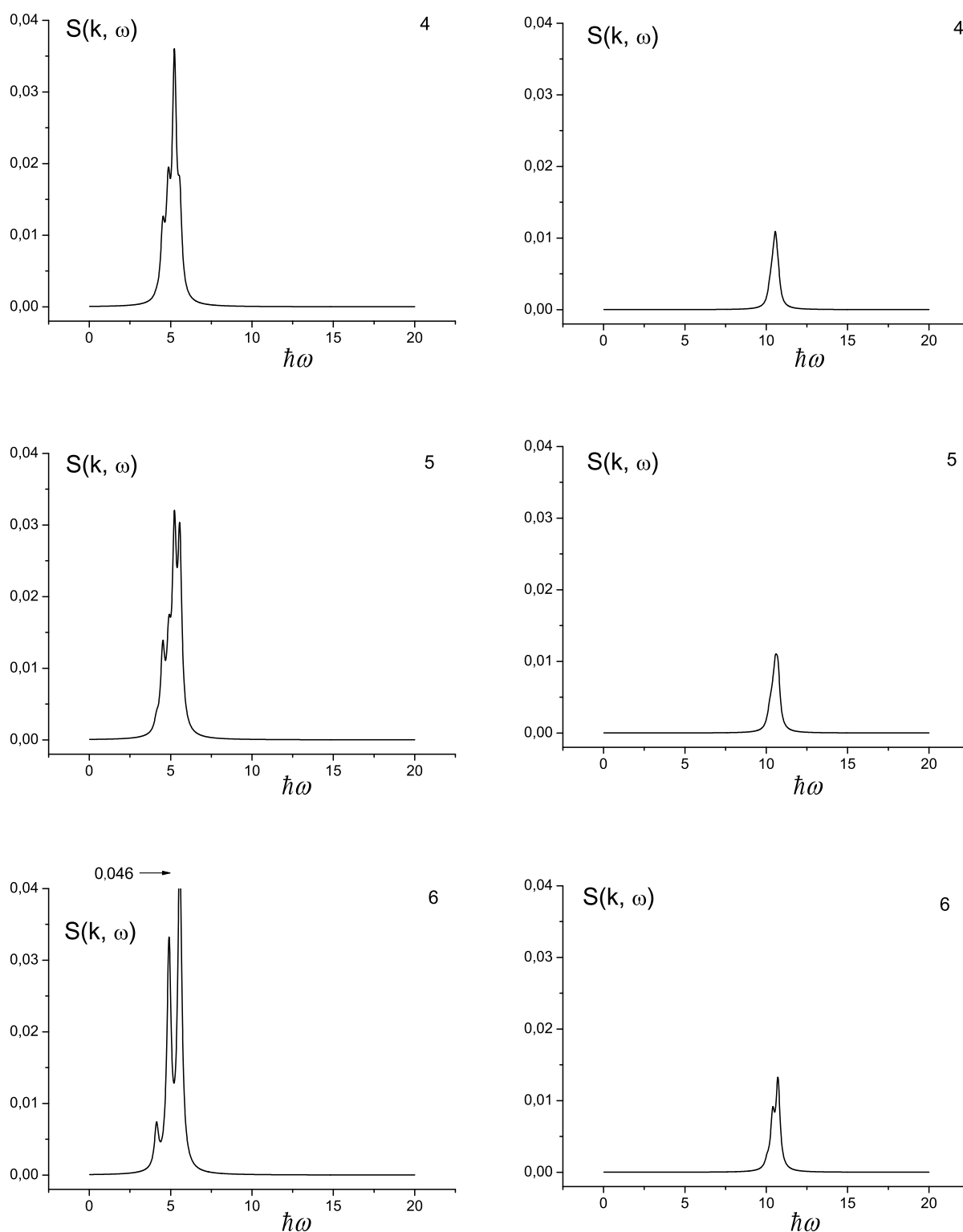
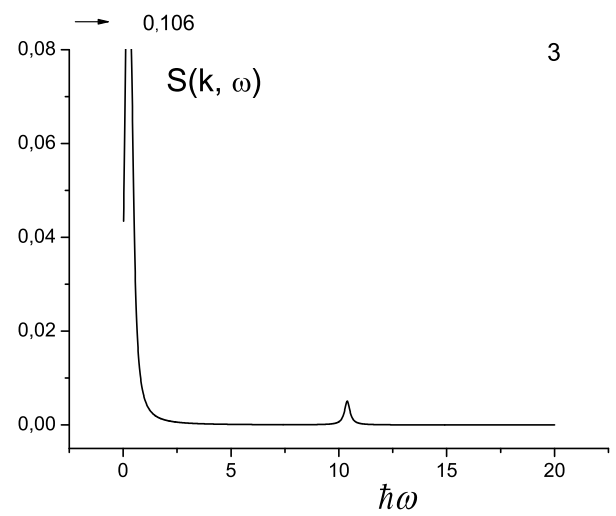
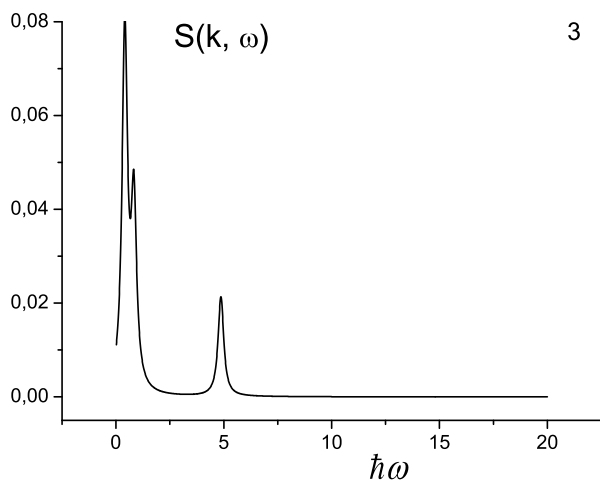
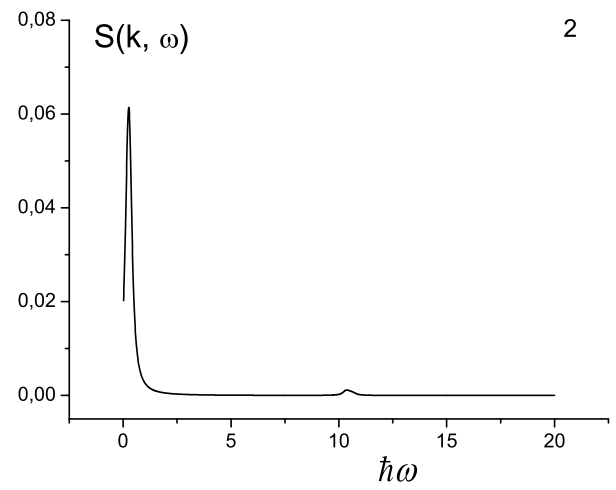
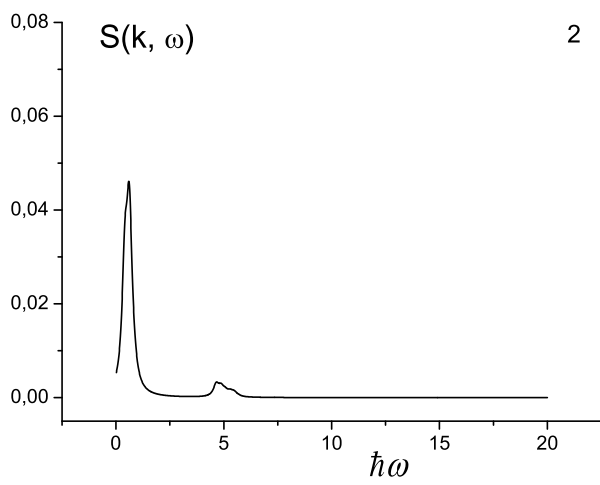
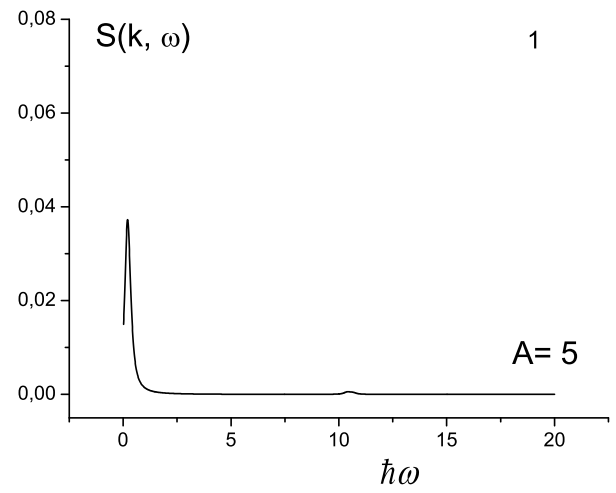
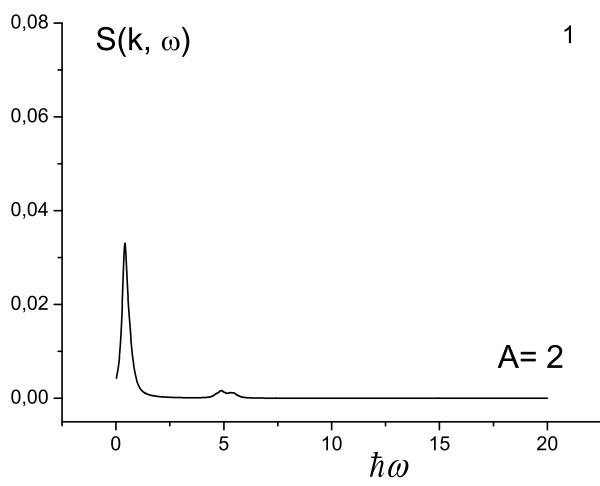


Рис. 8. Залежність динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ від хвильового вектора й частоти за $V = 0$ в CDW-фазі ($\rho = 0.5$). Зліва $A = 2$, праворуч $A = 5$. Рисункам 1; 2; 3; 4; 5; 6 відповідає хвильовий вектор $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$

Fig. 8. Dependence of dynamic structure factor $S(k, \omega)$ on the wave vector and frequency for $V = 0$ in CDW phase ($\rho = 0.5$). On the left: $A = 2$, on the right: $A = 5$. Figures 1; 2; 3; 4; 5; 6 corresponds to wave-vector $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$



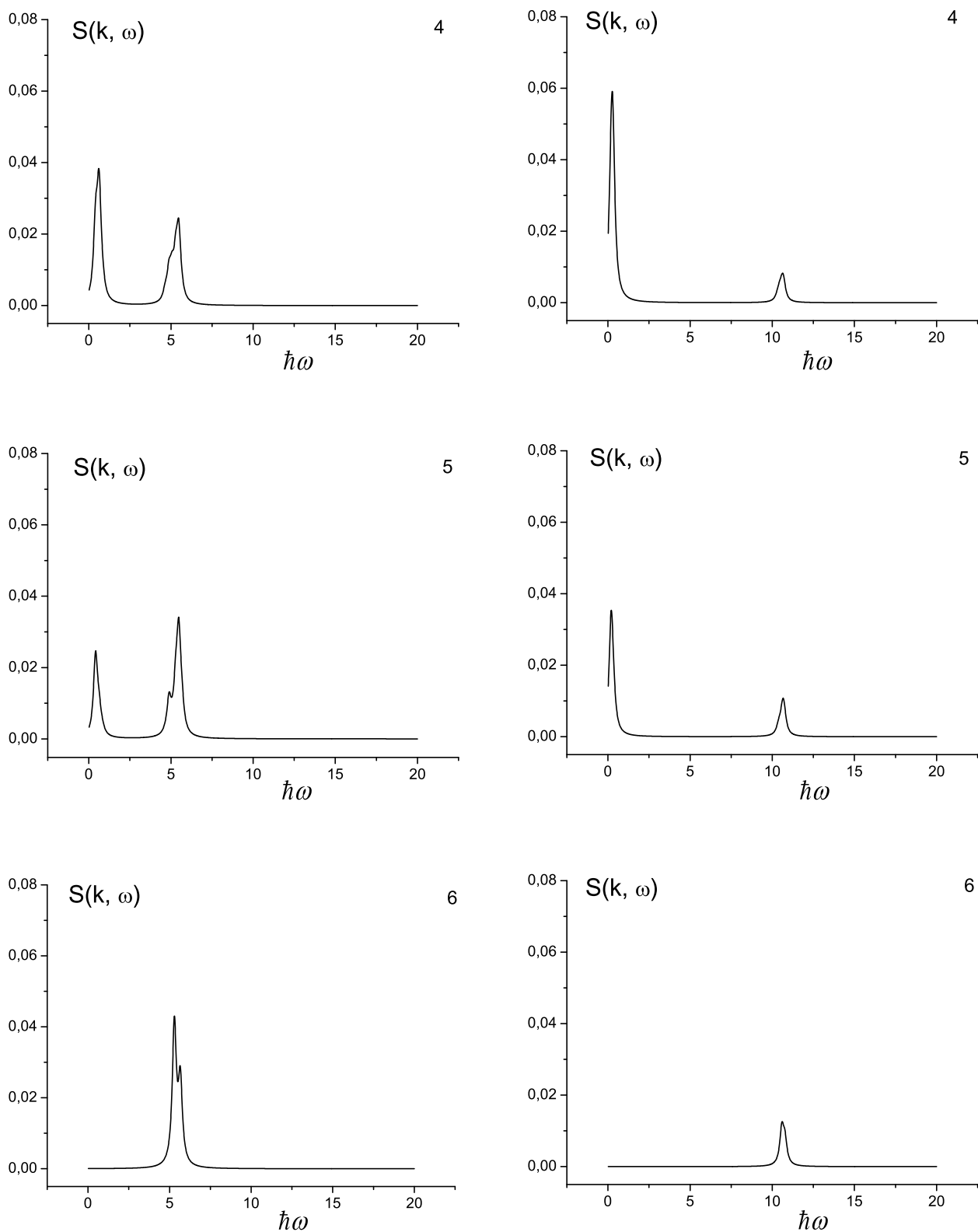
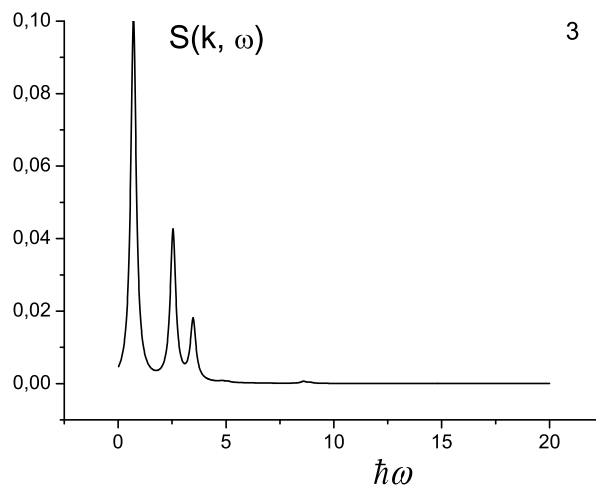
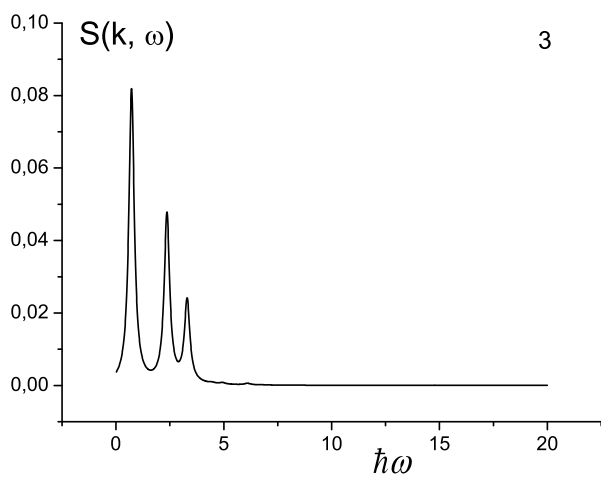
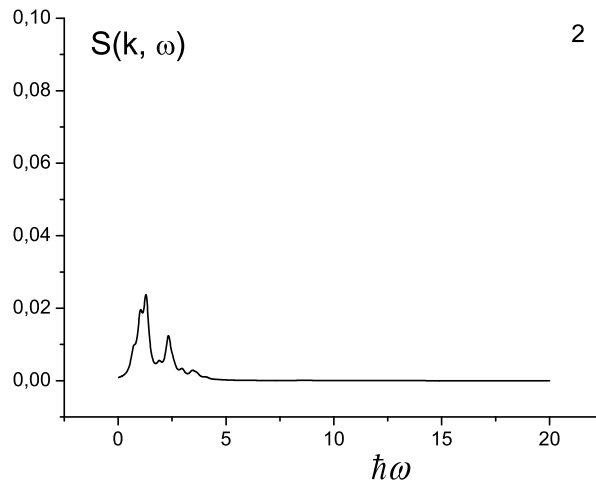
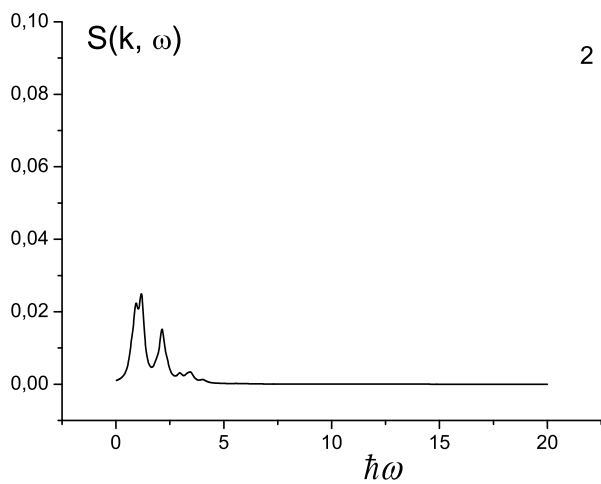
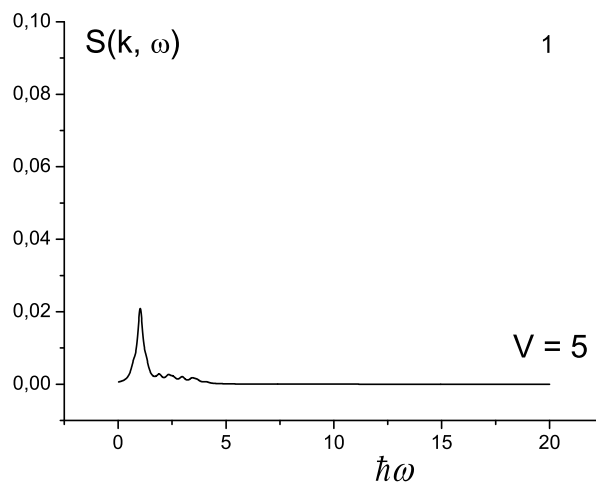
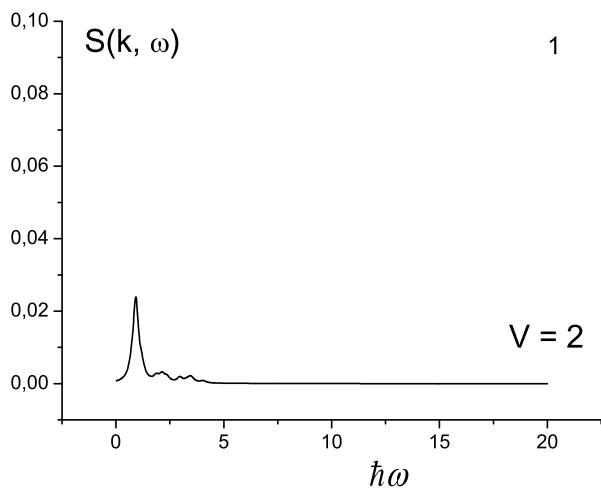


Рис. 9. Залежність динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ від хвильового вектора й частоти за $V = 0$ в SF-фазі ($\rho = 0.25$). Зліва $A = 2$, праворуч $A = 5$. Рисункам 1; 2; 3; 4; 5; 6 відповідає хвильовий вектор $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$
 Fig. 9. Dependence of dynamic structure factor $S(k, \omega)$ on the wave vector and frequency for $V = 0$ in SF phase ($\rho = 0.25$).
 On the left: $A = 2$, on the right: $A = 5$. Figures 1; 2; 3; 4; 5; 6 corresponds to wave-vector $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$



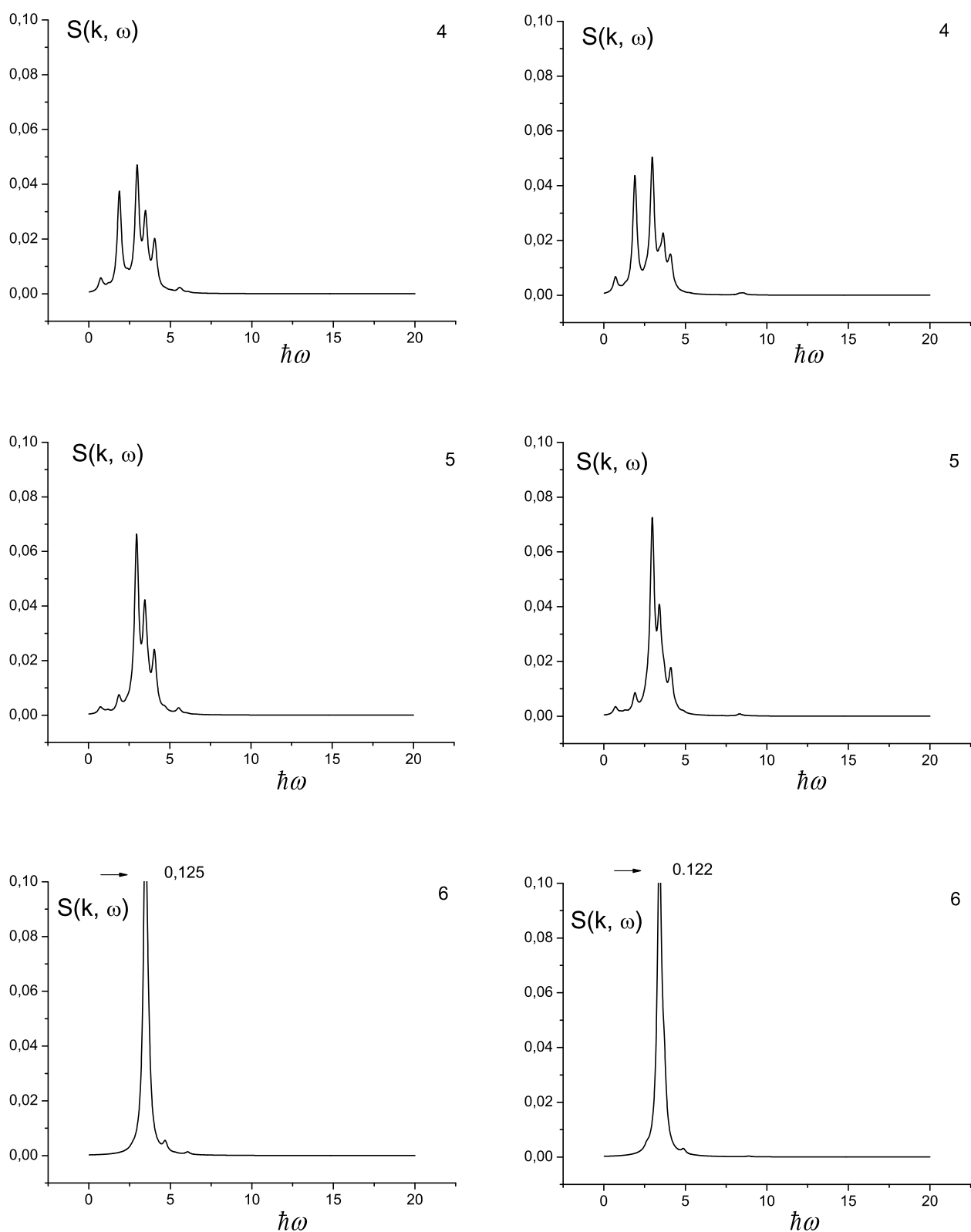


Рис. 10. Залежність динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ від хвильового вектора й частоти за $A = 0$ в SF-фазі ($\rho = 0.25$). Зліва $V = 2$, праворуч $V = 5$. Рисункам 1; 2; 3; 4; 5; 6 відповідає хвильовий вектор $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$
 Fig. 10. Dependence of dynamic structure factor $S(k, \omega)$ on the wave vector and frequency for $A = 0$ in SF phase ($\rho = 0.25$).
 On the left: $V = 2$, on the right: $V = 5$. Figs 1; 2; 3; 4; 5; 6 corresponds to wave-vector $k = 0.1; 0.25; 0.5; 0.75; 0.9; 1(\pi/a)$

VI. ВИСНОВКИ

У межах 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 модульоване поле A , що сприяє модуляції в просторовому розподілі йонів. У цій праці досліджено одночастинкову кореляцію, розраховано структурний і динамічний структурний фактори за температури $T = 0$. Ми отримали пік характеристики одночастинкової кореляції $n'(k)$ за $k = 0$ і $k = \pi/a$ в SF-фазі, що сигналізує про далекоюсяжну одночастинкову кореляцію. Поле A значно сильніше розширює ділянку CDW-фази (у 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 далекоюсяжної 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, якщо $k = \pi/a$, за половинного заповнення йонних позицій (густина $\rho = 0.5$), як і максимуми динамічного структурного фактора в ділянці частот, що за енергією відповідають ширині забороненої зони, підтверджують наявність упорядкованої модульованої (CDW) фази за $\rho = 0.5$. Наявність максимумів динамічного структурного фактора $S(k, \omega)$ у ділянці низьких частот за $\rho = 0.25$ підтверджує можливість існування фази типу суперфлюїду (SF). Ми показали, що вплив міжчастинкової взаємодії V на спектри $S(k, \omega)$ значно слабший, ніж вплив поля A .

-
- [1] D. Müller, D. Z. Anderson, R. J. Grow, P. D. D. Schwindt, E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **83**, 5194 (1999); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.5194>.
- [2] J. H. Thywissen, R. M. Westervelt, M. Prentiss, Phys. Rev. Lett. **83**, 3762 (1999); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.3762>.
- [3] N. H. Dekker *et al.*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1124 (2000); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1124>.
- [4] M. Key *et al.*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1371 (2000); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1371>.
- [5] K. Bongs *et al.*, Phys. Rev. A **63**, 031602(R) (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.63.031602>.
- [6] F. Schreck *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.080403>.
- [7] A. Görlitz *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.130402>.
- [8] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, 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, 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, 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. Stud. **17**, 4702 (2013); <https://doi.org/10.30970/jps.17.4702>.
- [13] R. Ya. Stetsiv, O. Vorobyov, Phys. Chem. Solid State **15**, 244 (2014).
- [14] R. Ya. Stetsiv, O. Ya. Farenjuk, J. Phys. Stud. **25**, 2702 (2021); <https://doi.org/10.30970/jps.25.2702>.
- [15] I. V. Stasyuk, R. Ya. Stetsiv, Condens. Matter Phys. **19**, 43704 (2016); <https://doi.org/10.5488/CMP.19.43704>.
- [16] D. Pines, P. Nozieres, *The Theory of Quantum Liquids* (Perseus Books, Cambridge, 1999).
- [17] S. Sachdev, Science **288**, 475 (2000); <https://doi.org/10.1126/science.288.5465.475>.
- [18] R. Roth, K. Burnett, J. Phys. B **37**, 3893 (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. Stud. **13**, 2701 (2009); <https://doi.org/10.30970/jps.13.2701>.
- [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. Lett. **84**, 1599 (2000); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1599>.
- [29] K. Bernardet *et al.*, 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, A. Dorneich, Phys. Rev. Lett. **88**, 167208 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.167208>.
- [32] B. Paredes *et al.*, Nature **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 статистичній твердих тіл* (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2013).
- [35] P. Pippan, H. G. Evertz, 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); <https://doi.org/10.15407/ujpe59.05.0515>.
- [37] R. Ya. Stetsiv, Condens. Matter Phys. **24**, 23704 (2021); <https://doi.org/10.5488/CMP.24.23704>.
- [38] W. Münch, K. D. Kreuer, U. Traub, J. Maier, Solid State Ion. **77**, 10 (1995); [https://doi.org/10.1016/0167-2738\(95\)00045-8](https://doi.org/10.1016/0167-2738(95)00045-8).
- [39] R. Hassan, E. S. Campbell, J. Chem. Phys. **97**, 4362 (1992); <https://doi.org/10.1063/1.463902>.
- [40] M. Eckert, G. Zundel, J. Phys. Chem. **92**, 7016 (1988); <https://doi.org/10.1021/j100335a035>.

STRUCTURE FACTOR AND DYNAMIC STRUCTURE FACTOR OF ONE-DIMENSIONAL ION CONDUCTORS

R. Ya. Stetsiv¹, O. Ya. Farenjuk^{1,2}

¹*Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 1, Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine*
e-mail: stetsiv@icmp.lviv.ua

²*Ukrainian Catholic University, 17, Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine*
e-mail: indrekis@icmp.lviv.ua

Using the exact diagonalization technique, 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. The model incorporates short-range repulsive interactions between neighboring ions (V parameter), their transfer (t parameter), and the modulating field A , which leads to spatial modulation of the ion distribution. In this research, we investigate the single-particle correlation and calculate the structure and dynamic structure factors at temperature $T = 0$. The peak in the characteristics of the single-particle correlation $n'(k)$ at wave vectors $k = 0$ and $k = \pi/a$ was obtained in the superfluid (SF) phase, which points to long-range single-particle correlation. The A field influences the expansion of the region of the CDW phase (in μ' coordinates) and suppresses the SF phase much more than the short-range interaction between particles V . This could explain our result that an increase in the value of the A field leads to a more significant reduction of the long-range correlation between particles $n'(k = \pi/a)$ than a corresponding increase in the interaction between particles V . In the case of the structure factor, the opposite effect is observed: an increase in the field A leads to a more significant increase in $S(k = \pi/a)$ compared to the corresponding change in the interaction between particles V . The presence of an ordered modulated (CDW) phase at $\rho = 0.5$ is confirmed by the obtained maxima of the structure factor at $k = \pi/a$ for the half-filled ion positions (density $\rho = 0.5$), and by the maxima of the dynamic structure factor in the frequencies range corresponding to the energy of the band gap. The presence of maxima of the dynamic structure factor $S(k, \omega)$ in the region of low frequencies at $\rho = 0.25$ confirms the potential existence of a superfluid (SF) phase in the ion conductor. We showed that the influence of the interparticle interaction V on the spectra $S(k, \omega)$ is significantly weaker compared to the influence of the field A .

Key words: ion conductor, hard-core boson model, structure factor, dynamic structure factor.