

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-15-12U

І.В. Стасюк, Р.Я. Стеців

ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ  
ОДНОВИМІРНИХ ІОННИХ ПРОВІДНИКІВ.  
ІМПЕДАНС, ДІАГРАМИ НАЙКВІСТА

УДК: 538.931; 538.911

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

**Динамічна провідність одновимірних іонних провідників. Імпеданс, діаграми Найквіста**

І.В. Стасюк, Р.Я. Стеців

**Анотація.** Для одновимірного іонного провідника з періодичними граничними умовами методом точної діагоналізації розраховано залежність динамічної провідності від величини взаємодії між частинками і величини модулюючого поля. Розгляд базується на ґратковій моделі жорстких бозонів (статистика Паулі). Встановлено зміни коефіцієнтів провідності при переході одновимірної системи від зарядовпорядкованої фази (CDW) до фази типу суперфлюїду (SF), яка може бути аналогом суперіонної фази. Розраховано імпеданс, побудовані діаграми Найквіста.

**Dynamic conductivity of one-dimensional ion conductors. Impedance, Nyquist diagrams**

I.V. Stasyuk, R.Ya. Stetsiv

**Abstract.** Dependence of dynamic conductivity value on interactions between particles and value of modulating field is obtained using exact diagonalization method for the finite one-dimensional ion conductor in periodic boundary conditions. The consideration is based on the hardcore boson lattice model (the Pauli statistics). The changes in the conductivity coefficients with transition of one-dimensional system from the charge-density-wave phase (CDW) to the superfluid one (SF), which can be an analogue of the superionic phase, are obtained. The impedance is calculated, Nyquist diagrams are constructed.

Подається в Журнал фізичних досліджень  
Submitted to Journal of Physical Studies

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк  
Роман Ярославович Стеців

ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ ОДНОВИМІРНИХ ІОННИХ ПРОВІДНИКІВ.  
ІМПЕДАНС, ДІАГРАМИ НАЙКВІСТА.

Роботу отримано 30 грудня 2015 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

## 1. Вступ

В попередній нашій роботі [1] використовуючи метод точної діагоналізації для скінченних одновимірних іонних провідників з періодичними граничними умовами було розраховано в рамках підходу жорстких бозонів одночастинкові спектральні густини і встановлено області існування різних фаз системи в залежності від величини міжчастинкової взаємодії та модулюючого поля. Дана робота присвячена дослідженню динамічної провідності. Дослідженню іонної провідності у моделях такого типу присвячено ряд робіт (див. наприклад [2–5]). В багатьох з них основна увага концентрується на вивченні Друде-компоненти ( $\omega = 0$ ). Наша увага зосереджена на розрахунку частотної залежності динамічної провідності.

## 2. Гамільтоніан задачі і метод точної діагоналізації

Іонний провідник розглядаємо як ланцюжок важких нерухомих іонних груп і легких іонів, що переміщуються вздовж такого ланцюжка, заселяючи певні позиції. Підсистема легких іонів описується наступним гамільтоніаном:

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

де оператори народження і знищення частинок ( $c_i^+$  і  $c_i$ ) підлягають статистиці Паулі. Це відповідає наближенню жорстких бозонів.

Модель враховує переміщення іонів між сусідніми позиціями (параметр перенесення  $t$ ) і взаємодію між іонами, що заселяють сусідні позиції (параметр взаємодії  $V > 0$ ), а також модулююче поле (параметр  $A$ ). Поле  $A$  робить систему двопідгратковою і в певній мірі імітує далекоюсяжну взаємодію між частинками, яка сприяє модуляції у просторовому розподілі легких іонів у т.зв. впорядкованій фазі (існування такої фази при низьких температурах є характерною рисою суперіонних провідників).

Енергетичний спектр одновимірного іонного провідника Паулі ми розраховуємо методом точної діагоналізації. Розглянемо скінченний ланцюжок з періодичними граничними умовами. Для ланцюжка з  $N$  позиціями у основній області вводимо багаточастинкові стани

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

Матриця гамільтоніану на базі цих станів є матрицею порядку  $2^N \times 2^N$ . Ця матриця діагоналізується числовим способом. Це відповідає перетворенню:

$$U^{-1}HU = \tilde{H} = \sum_p \lambda_p \tilde{X}^{pp}, \quad (3)$$

де  $\lambda_p$  — власні значення гамільтоніана,  $\tilde{X}^{pp}$  — оператори Хаббарда. Таке ж перетворення застосовуємо до операторів народження і знищення частинок у позиції  $i$  на ланцюжку

$$U^{-1}c_iU = \sum_{pq} A_{pq}^i \tilde{X}^{pq}, \quad U^{-1}c_i^+U = \sum_{rs} A_{rs}^{i*} \tilde{X}^{sr}. \quad (4)$$

Через певні комбінації цих операторів представляються оператори густини струму і провідності.

### 3. Динамічна провідність

Динамічна провідність одновимірного іонного провідника розраховується нами згідно з теорією Кубо [6]

$$\sigma(\omega, T) = \frac{1}{Na} \int_{-\infty}^0 dt \exp[i(\omega - i\varepsilon)t] \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{j}(t - i\hbar\lambda) \hat{j}(0) \rangle, \quad (5)$$

де  $\hat{j}$  — оператор густини струму. Статична провідність ( $\omega = 0$ ) (так звана Друде-компонента) в даній роботі не розглядається. Цьому випадку буде присвячено окреме дослідження. Тут представлено розрахунок частотної залежності динамічної провідності, тому ми можемо обмежитися наступним виразом для оператора густини струму (див. наприклад [2, 3])

$$\hat{j}(0) = \frac{i}{\hbar} tqa \sum_i (c_i^+ c_{i+1} - c_{i+1}^+ c_i), \quad (6)$$

тут  $q$  — заряд іона,  $a$  — стала ґратки. На новому базисі оператор густини струму має вигляд

$$\hat{j}(0) = \frac{i}{\hbar} tqa \sum_{i=1}^N \sum_{kl} \sum_m (A_{km}^{i*} A_{kl}^{i+1} - A_{km}^{(i+1)*} A_{kl}^i) \tilde{X}^{ml}, \quad (7)$$

$$j(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}. \quad (8)$$

Згідно з формулою Кубо (5) отримано наступний вираз для іонної провідності

$$\sigma(\omega) = \frac{i}{Na} \left( \frac{t}{\hbar} qa \right)^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{kl} \sum_{mn} (A_{km}^{i*} A_{kl}^{i+1} - A_{km}^{(i+1)*} A_{kl}^i) \times \\ \times (A_{nl}^{j*} A_{nm}^{j+1} - A_{nl}^{(j+1)*} A_{nm}^j) \frac{1}{Z} \frac{1}{\lambda_l - \lambda_m} \frac{e^{-\beta\lambda_m} - e^{-\beta\lambda_l}}{\omega - (\lambda_m - \lambda_l) + i\varepsilon}. \quad (9)$$

Дійсна частина динамічної провідності має дискретну структуру, містять ряд  $\delta$ -піків у зв'язку з скінченним розміром ланцюжка. Якщо збільшувати розмір ланцюжка ( $N$ ), дельта-піки будуть розташовуватися густіше, формуючи зонну структуру, яка отримується при  $N = \infty$ . При числових розрахунках ми обмежилися випадком  $N = 10$ . Введено також малий параметр  $\Delta$  для розширення  $\delta$ -піків згідно розподілу Лоренца

$$\delta(\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\omega^2 + \Delta^2}. \quad (10)$$

Всі енергетичні параметри, включаючи  $kT$  представлені у відношенні до параметра  $t$ , який трактується як енергетична одиниця. Для зручності введено величину  $\mu' = \mu - V$ .

Отримана частотна залежність дійсної частини динамічної провідності  $\text{Re } \sigma(\omega)$  одновимірного іонного ланцюжка при  $T = 0$  пред-

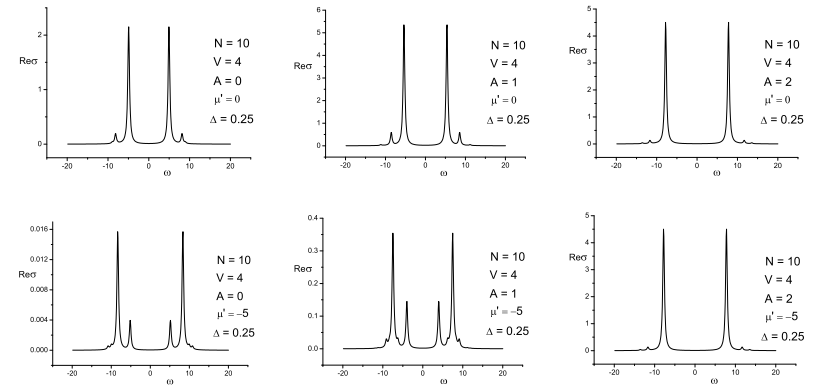


Рис. 1. Залежність дійсної частини динамічної провідності одновимірного іонного провідника від частоти при різних значеннях модулюючого поля  $A$  в CDW-фазі ( $\mu' = 0$ ) і в SF-фазі ( $\mu' = -5$ ).  $V = 4$ ,  $t = 1$ .

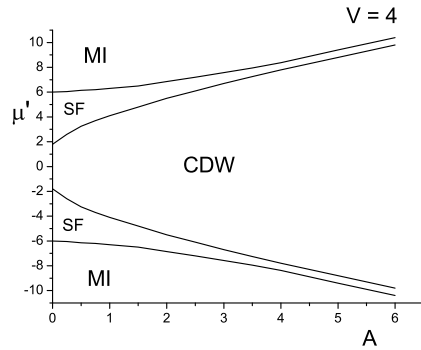


Рис. 2. Діаграма стану одновимірного іонного провідника при  $T = 0$  в залежності від величини модулюючого поля  $A$ .  $V = 4$ ,  $t = 1$ .

ставлена на рисунку 1. Тут, як приклад, наведені результати для випадку  $V = 4$ . Для наочності на рисунку 2 приведена отримана нами раніше [1] діаграма стану для  $V = 4$  в залежності від величини модулюючого поля. Отримано два максимуми провідності (якщо розглядати лише додатні частоти  $\omega$ ). Як видно з діаграми 2 при  $\mu' = 0$  одновимірний ланцюжок є діелектриком в зарядовомодульованому стані (CDW), тоді як при  $\mu' = -5$  знаходимося в області фази типу суперфлюїду (SF). При відсутності модулюючого поля ( $A = 0$ ) отримано два максимуми провідності на частотах  $\omega_1 = 4.92$ ,  $\omega_2 = 8.12$ . При включенні модулюючого поля величина провідності зростає, маючи найбільші значення при величинах поля  $A \approx 1$ . При подальшому зростанні модулюючого поля провідність монотонно спадає і її два максимуми зміщуються в область більших частот, при цьому один з піків при  $A > 2$  практично зникає. При переході в фазу суперфлюїду отримуємо максимуми провідності приблизно в цій же частотній області, лише дещо зміщені, проте їх ваги суттєво змінилися. Якщо в CDW-фазі значно більшим був максимум при нижчих частотах, то в SF-фазі — навпаки, і висота піків в SF-фазі при  $A = 0$  на два порядки менша. При включенні модулюючого поля в SF-фазі ( $\mu' = -5$ ) величина провідності суттєво зростає, як і у випадку CDW-фази. При  $A = 2$  ми вже переходимо з SF-фази в CDW-фазу (див. рисунок 2) і маємо розподіл максимумів провідності характерний для CDW-фази. На рисунках 3, 4 представлена частотна залежність дійсної частини динамічної провідності та імпедансу  $Z(\omega) = 1/\sigma(\omega)$ , наведено тангенс кута втрат  $\text{tg } \delta = \text{Im } Z(\omega)/\text{Re } Z(\omega)$ , побудовані діаграми Найквіста. Як видно з рисунків, кожному ма-

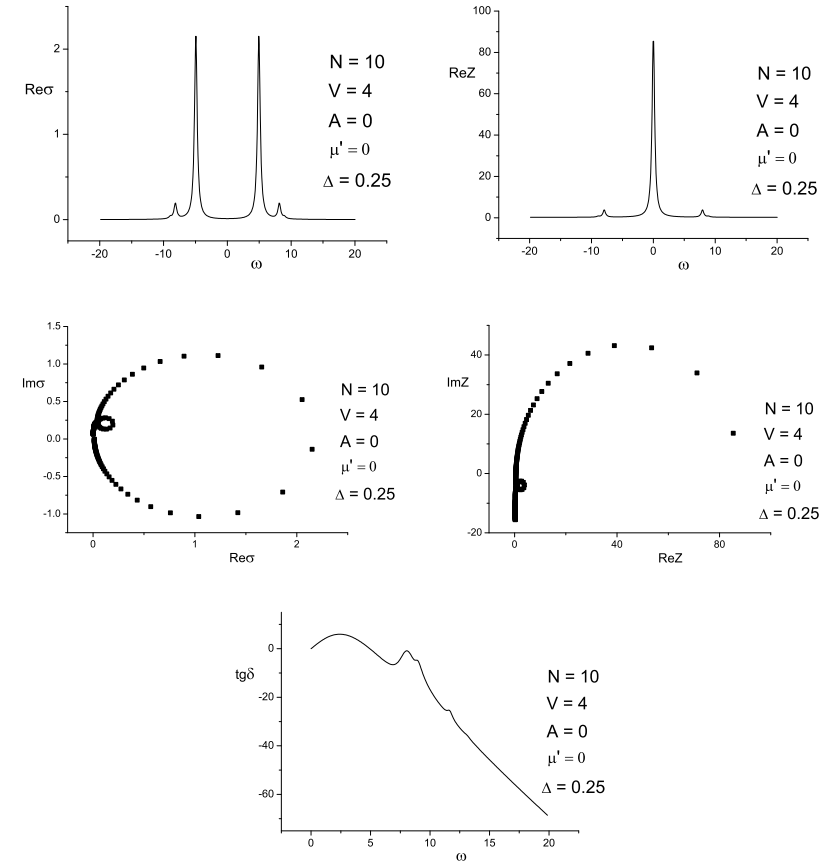


Рис. 3. Частотні залежності дійсних частин динамічної провідності, імпедансу та тангенса кута втрат; діаграми Найквіста в CDW-фазі ( $\mu' = 0$ ).  $V = 4$ ,  $A = 0$ .

ксимуму провідності чи імпедансу на діаграмах відповідають еліпси чи півеліпси.

#### 4. Висновки

Ми очікували, що при переході з CDW-фази до фази типу суперфлюїду максимуми динамічної провідності одновимірного іонного

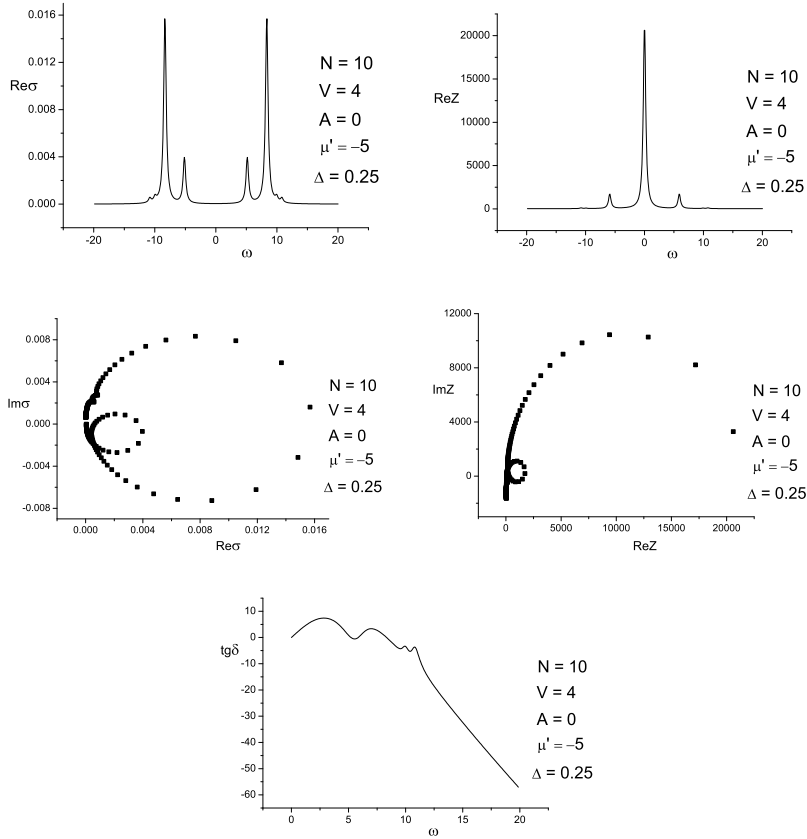


Рис. 4. Частотні залежності дійсних частин динамічної провідності, імпедансу та тангенса кута втрат; діаграми Найквіста в SF-фазі ( $\mu' = -5$ ).  $V = 4, A = 0$ .

ланцюжка змістяться в область нижчих частот. Аналіз отриманого енергетичного спектру вказує на те, що дійсно в SF-фазі є можливі значно більше низькоенергетичні переходи ніж в CDW-фазі, проте очевидно правила відбору, які задаються матрицями  $A_{pq}^i$  приводять до того, що такі переходи не дають внеску у провідність. Подібні результати отримано також іншими авторами (див. наприклад [2]). Як показано в [7, 8], функція  $\text{Re } \sigma(\omega)$  у SF-фазі спадає за степеневим законом при прямуванні  $\omega \rightarrow 0$ .

Як видно картина частотної залежності провідності  $\text{Re } \sigma(\omega)$  при переході від CDW-фази до SF-фази якісно не міняється. Суттєво змінюються лише ваги максимумів і крім того в SF-фазі величина провідності на порядок при  $A = 1$ , чи два при  $A = 0$  менша.

## Література

1. R.Ya. Stetsiv, I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, Ukr. J. Phys. **59**, 515 (2014).
2. T.D. Kuhner, S.R. White, H. Monien, Phys. Rev. B **61**, 12474 (2000).
3. D.J. Scalapino, S.R. White, S.C. Zhang, Phys. Rev. Letters **68**, 2830 (1992).
4. S. Mukerjee, V. Oganesyan, and D. Huse, Phys. Rev. B **73**, 035113 (2006).
5. F. Heidrich-Meisner, A. Honeck, D.C. Cabra, and W. Brenig, Phys. Rev. B **68**, 134436 (2003).
6. R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn **12**, 570 (1957).
7. T. Giamarchi, Phys. Rev. B **46**, 342 (1992).
8. T. Giamarchi and A.J. Millis, Phys. Rev. B **46**, 9325 (1992).

# CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

**AIMS AND SCOPE:** The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. **Condensed Matter Physics** is published quarterly.

**ABSTRACTED/INDEXED IN:** Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii.

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

## CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine  
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine  
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua    <http://www.icmp.lviv.ua>