ВІСНИК НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
"ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"
"Фізико-математичні науки"
№ 540, 2005, с. 85–88

JOURNAL OF LVIV POLYTECHNIC
NATIONAL UNIVERSITY
"Physical and mathematical sciences"
№ 540, 2005, p. 85–88

ТОЧНИЙ РОЗВ'ЯЗОК ОДНОВИМІРНОЇ ЗАДАЧІ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ҐРАТКОВОГО І ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗІВ

В. Горбатюк[a], *, М. Міцов[b]

[a] *Національний університет "Львівська політехніка"*
вул. С.Бандери 12, 79013, Львів, Україна
[b] *Українською мовою*

(Отримано 20 квітня 2005 р.)

Знайдено точний розв'язок одновимірної моделі ґраткового газу, який взаємодіє з електронами. Всі електрони знаходяться на одному рівні. Враховується "хаббардівське" відштовхування між електронами. Така модель якісно описує найголовніші риси інтеркаляції в шаруватих кристалах. Обчислено вільну енергію, концентрації, кореляційні функції.

Ключові слова: модель Ізінга, ґратковий газ, взаємодія з електронами

PACS: 42.70. Hj, 81.40 Ef

УДК: 548.5; 535.34; 621.378.324

Вступ

Явище інтеркаляції, наприклад, іонів літію в шаруватих кристалах можна описувати моделлю ґраткового газу [1]. Така модель, як відомо, еквівалентна моделі Ізінга з магнітним полем. При цьому вплив ґратки на іони інтеркалянта моделюється взаємодією між іонами, тобто частками ґраткового газу. Досить несподівано, але навіть одновимірна модель ґраткового газу якісно правильно відображає найголовніші риси інтеркаляції. Тому має сенс розширити таку модель, розглянувши взаємодію іонів інтеркалянта з електронною підсистемою. Цю взаємодію беремо в найпростішому "контактному" вигляді. Тобто іон взаємодіє з електронами лише тоді, коли вони знаходяться в одній комірці. Врахуємо також кулонівське "хаббардіське" відштовхування електронів з протилежними спінами на одному вузлі. Якщо вважати, що всі електрони знаходяться на одному виродженому енергетичному рівні, то така модель допускає точний розв'язок. Зважаючи на важливість, зокрема методологічну, одновимірної моделі Ізінга, фізично мотивоване точно розв'язуване її узагальнення є змістовним. Таку модель розглянуто в [4] за допомогою методу трансфер-матриці, яка в цьому випадку має розмір 8×8. У цій роботі модель трактується як псевдоспін-електронна з можливим застосуванням до описання високотемпературної надпровідності. За допомогою обчислення одновузлової статистичної суми по електронних змінних в [5] вивчення псевдоспін-електронної моделі зводиться до розгляду моделі Ізінга з магнітним полем в довільній просторовій розмірності. Запропонований метод є значно простішим від методу тренсфер-матриці і його можна використати в складніших ситуаціях. Гамільтоніан описаної одновимірної моделі має вигляд

$$H = \sum_{l=1}^{N} \Big\{ (d-\mu)m_l - \lambda m_l m_{l+1} + U n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} + \\ +(E-\nu)(n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow}) - \eta(n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow})m_l \Big\}. \tag{1}$$

Тут m_l, $n_{l\uparrow}$, $n_{l\downarrow}$ – числа заповнення відповідно часток ґраткового газу і, електронів; d – енергія впровадження; E – енергія електронів; U – параметр "хаббардівського" відштовхування; η – параметр взаємодії; μ – хімічний потенціал іонів; ν – хімічний потенціал електронів. У цій моделі є вісім можливих станів на кожному вузлі.

Якщо ввести позначення

$$\beta = \frac{1}{kT},\ v = \tilde{\eta} = \beta\eta,\ u = \tilde{U} = \beta U, \text{ і т.д.,} \\ \tau = \tilde{\nu} - \tilde{E},\ w = \tilde{\mu} - \tilde{d},\ K = \frac{\tilde{\lambda}}{4}, \tag{2}$$

то статистична сума Z є такою:

$$Z = \mathrm{Sp} \Bigg\{ \exp \sum_{l=1}^{N} \Big[w m_l + 4K m_l m_{l+1} + \\ +(\tau + v m_l)(n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow}) - U n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} \Big] \Bigg\}. \tag{3}$$

Щоб обчислити статсуму потрібно спочатку підсумувати по числах заповнення електронів. Для цього подамо Z у вигляді

$$Z = \sum_{(m_j)} \mathrm{e}^{-\beta H_0} W, \quad -\beta H_0 = \sum_{l=1}^{N} (w m_l + 4K m_l m_{l+1}), \\ W = \sum_{(n_{j\sigma})} \exp \left\{ \sum_{l=1}^{N} \left[(\tau + v m_l)(n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow}) - u n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} \right] \right\}. \tag{4}$$

У формулах для Z і W підсумовується по всіх можливих конфігураціях іонної і, відповідно, еле-

*Автор-респондент

ктронної підсистем. Формула для W має мультиплікативний по l вигляд, тому легко підсумувати по $n_{j\sigma}$. Якщо зробимо позначення

$$b = e^{\tau}, \quad c = e^{v}, \quad \alpha = e^{-u}, \tag{5}$$

то матимемо

$$\begin{aligned} W &= \prod_{l=1}^{N} \left(1 + 2bc^{m_l} + \alpha b^2 c^{2m_l}\right) = \\ &= \exp\left\{\sum_{l=1}^{N} \ln\left(1 + 2bc^{m_l} + \alpha b^2 c^{2m_l}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{6}$$

Оскільки числа m_l дорівнюють нулю або одиниці, то існує

$$\ln\left(1 + 2bc^{m_l} + \alpha b^2 c^{2m_l}\right) = ln\psi + \xi m_l, \quad \text{де}$$
$$\psi = 1 + 2b + \alpha b^2,\ \varphi = 1 + 2bc + \alpha b^2 c^2,\ \xi = \ln\frac{\varphi}{\psi}. \tag{7}$$

Тепер W набуде вигляду

$$W = \exp\sum_{l=1}^{N}(\ln\psi + \xi m_l) = \psi^N \exp\left(\xi\sum_{l=1}^{N} m_l\right). \tag{8}$$

Підставивши цей вираз для W в формулу (4), отримаємо

$$Z = \psi^N \sum_{m_j} \exp\left\{\sum_{l=1}^{N}\left[(\xi + w)m_l + 4Km_l m_{l+1}\right]\right\}. \tag{9}$$

Тепер стало очевидним, що задача звелась до обчислення статсуми одновимірної моделі Ізінга з "магнітним полем", яке залежить від параметрів електронної підсистеми. Скористаємось результатами з одновимірної моделі Ізінга, які є, наприклад, в [2]. Для зручності перейдемо від змінних m_l ($m_l = 0$ або 1) до змінних σ_l ($\sigma_l = \pm 1$). Вільна енергія на вузол f для нашої моделі має вигляд

$$f = \frac{d - \lambda - \mu}{2} - kT\left(\frac{1}{2}\ln\varphi + \frac{1}{2}\ln\psi + \ln\Lambda\right), \tag{10}$$

$$\Lambda = \operatorname{ch} h + (\operatorname{sh}^2 h + q^{-4})^{\frac{1}{2}},\ h = \frac{1}{2}(\xi + 4K + w),\ q = e^K. \tag{11}$$

Концентрації граткового газу x і електронів y визначаються так:

$$x = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\langle m_l\rangle,\ y = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\langle n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow}\rangle,\ 0 \leqslant x \leqslant 1,$$
$$0 \leqslant y \leqslant 2,\ x = -\frac{\partial f}{\partial\mu},\ y = -\frac{\partial f}{\partial\nu}. \tag{12}$$

Тут кутовими дужками позначені термодинамічні середні. З (10) і (11) обчисленням похідних за формулою (12) отримуємо концентрації x і y:

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\operatorname{sh} h\left(\operatorname{sh}^2 h + q^{-4}\right)^{-\frac{1}{2}}, \\ y &= 2x\frac{bc + \alpha b^2 c^2}{\varphi} + 2(1 - x)\frac{b + \alpha b^2}{\psi}. \end{aligned} \tag{13}$$

Перша з цих формул дає залежність концентрації граткового газу x від хімічних потенціалів μ і ν. Адже μ входить в h через w, а ν входить в h через b, від якого залежить $\xi = \ln\varphi - \ln\psi$. Друга формула (13) дає залежність концентрації електронів y від x і ν. Якщо в цю формулу підставити x з першої, то отримаємо залежність y від μ і ν. З першої формули (13) алгебраїчними викладеннями можна знайти залежність хімічного потенціалу ґраткового газу μ від x і ν. Вона має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \mu = d - 2\lambda + kT\Big\{ &\ln\psi - \ln\varphi - \ln x - \ln(1 - x) + \\ &+ 2\ln\left[2x - 1 + \sqrt{1 + 4x(1 - x)(q^4 - 1)}\right] - \ln 4\Big\}. \end{aligned} \tag{14}$$

Якщо параметр взаємодії між частками ґраткового газу λ прийняти таким, що дорівнює нулю ($q = 1$), то (14) дасть таку залежність:

$$\mu = d + kT\ln\frac{x(1 + 2b + \alpha b^2)}{(1 - x)(1 + 2bc + \alpha b^2 c^2)}. \tag{15}$$

Коли до того ж прийняти таким, що дорівнює нулю параметр взаємодії між підсистемами η (що означає $c = 1$), то отримаємо хімічний потенціал вільного ґраткового газу

$$\mu = d + kT\ln\frac{x}{1 - x}. \tag{16}$$

Якщо в другій формулі (13) знехтувати взаємодією між підсистемами ($c = 1$), то отримаємо квадратне рівняння відносно b:

$$b^2\alpha(2 - y) + 2b(1 - y) - 1 = 0, \quad b = \exp(\tilde{\nu} - \tilde{E}). \tag{17}$$

Розв'язавши це рівняння, знайдемо ν як функцію від y:

$$\begin{aligned} \nu = E + U + kT\Big\{&\ln\left[y - 1 + \sqrt{(y-1)^2 + \alpha y(2 - y)}\right] - \\ &- \ln(2 - y)\Big\}, \quad 0 \leqslant y \leqslant 2. \end{aligned} \tag{18}$$

Це хімічний потенціал електронів моделі Хаббарда в так званій атомній границі, тобто, коли не враховуються перескоки електронів з вузла на вузол. Якщо в цій формулі прийняти таким, що дорівнює одиниці параметр α, що відповідає нехтуванням кулонівським відштовхуванням електронів з протилежними спінами на одному вузлі, то одержимо хімічний потенціал вільного електронного газу

$$\nu = E + kT\ln\frac{y}{2 - y}. \tag{19}$$

Друга формула (13) дає, у принципі, можливість отримати залежність хімічного потенціалу електронів ν від x і y. І, якщо його підставити в (14), то отримаємо також залежність хімічного потенціалу ґраткового газу μ від концентрацій x і y. Але для цього потрібно розв'язати алгебраїчне рівняння четвертого степеня відносно b. Це призводить до громіздких формул. Натомість введенням величин w і γ

$$w = -1 + \sqrt{1 - \alpha}, \qquad \gamma = -1 - \sqrt{1 - \alpha}, \tag{20}$$

другу формулу (13) можна подати в простому вигляді

$$2-y=\frac{1-x}{1-wb}+\frac{1-x}{1-\gamma b}+\frac{x}{1-wcb}+\frac{x}{1-\gamma cb}. \quad (21)$$

Якщо виконується умова $|wb|<1$ і $|\gamma b|<1$, то тоді (21) дає

$$y=\sum_{k=1}^{\infty}a_k b^k, \quad a_k=-(w^k+\gamma^k)(1-x+xc^k). \quad (22)$$

З цієї формули оберненням ряду за формулою Лагранжа [3] можна знайти наближено залежність b від y.

Одновимірна модель Ізінга в [2] досліджується методом трасфер-матриці. Цей метод дає можливість просто і елегантно знайти кореляційну функцію. У нашій моделі він безпосередньо не застосовний через наявність електронної підсистеми. Але невеликі алгебраїчні перетворення дають можливість звести обчислення всіх кореляційних функцій цієї моделі до обчислення кореляційних функцій моделі Ізінга. Щоб уникнути громіздких формул, суть такого зведення ми продемонструємо, обчисливши ще одним способом середнє $\langle n_{j\uparrow}\rangle=\frac{y}{2}$. Обчислення кореляційних функцій робиться аналогічно. За означенням середнього маємо

$$\langle n_{j\uparrow}\rangle=Z^{-1}\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}n_{j\uparrow}\right)=Z^{-1}\sum_{(m_l)}e^{-\beta H_0}\sum_{(n_{l\sigma})}n_{j\uparrow}\prod_{l=1}^{N}\exp\left[(vm_l+\tau)(n_{l\uparrow}+n_{l\downarrow})-un_{l\uparrow}n_{l\downarrow}\right]. \quad (23)$$

Це можемо записати у вигляді

$$\langle n_{j\uparrow}\rangle=Z^{-1}\sum_{(m_l)}e^{-\beta H_0}D_j,$$
$$D_j=\frac{bc^{m_j}+\alpha b^2c^{2m_j}}{1+2bc^{m_j}+\alpha b^2c^{2m_j}}D, \quad (24)$$

$$D=\prod_{l=1}^{N}\left(1+2bc^{m_l}+\alpha b^2c^{2m_l}\right)=\psi^N\exp\left(\xi\sum_{l=1}^{N}m_l\right) \quad (25)$$

Існує елементарна тотожність

$$\frac{bc^{m_j}+\alpha b^2c^{2m_j}}{1+2bc^{m_j}+\alpha b^2c^{2m_j}}=Q+m_j(R-Q),$$
$$Q=\frac{b+\alpha b^2}{\psi}, \quad R=\frac{bc+\alpha b^2c^2}{\varphi}. \quad (26)$$

Отже, D_j набуває форми

$$D_j=\left[Q+m_j(R-Q)\right]D, \quad (27)$$

що дає можливість для середнього $\langle n_{j\uparrow}$ отримати

$$\langle n_{j\uparrow}\rangle=Z^{-1}\sum_{(m_l)}\mathrm{e}^{-\beta H_0}\left[Q+m_j(R-Q)\right]D= \\ =Q+\langle m_j\rangle(R-Q). \quad (28)$$

Якщо взяти до уваги, що $\langle n_{j\uparrow}\rangle=y/2$ і $\langle m_j\rangle=x$, то бачимо збіг (28) з другою формулою (13).

Цілком аналогічним прийомом можна обчислити будь-яку кореляційну функцію. Наприклад, зв'язок між $\langle n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}\rangle=\langle n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}\rangle=\langle n_{i\uparrow}n_{j\downarrow}\rangle$ і $\langle m_j\rangle$ такий:

$$\langle n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}\rangle=Q^2+2xQ(R-Q)+\langle m_im_j\rangle(R-Q)^2. \quad (29)$$

Щоб скористатись формулою для кореляційної функції моделі Ізінга, яка є в [2], треба від змінних m_l перейти до змінних σ_l. Як і в [2] введемо кут $0<\theta<\frac{\pi}{2}$ співвідношенням

$$\mathrm{ctg}\,2\theta=e^{2K}\mathrm{sh}\,h, \quad h=\frac{1}{2}\left(\tilde{\lambda}+\tilde{\mu}-\tilde{d}+\ln\frac{\varphi}{\psi}\right). \quad (30)$$

Також зробимо позначення для власних значень трасфер-матриці

$$\Lambda_1=q\mathrm{ch}\,h+q(\mathrm{sh}^2h+q^{-4})^{\frac{1}{2}},$$
$$\Lambda_2=q\mathrm{ch}\,h-q(\mathrm{sh}^2h+q^{-4})^{\frac{1}{2}}. \quad (31)$$

Тоді середні від чисел заповнення матриці матимуть вигляд

$$\langle m_j\rangle=x=\frac{1+\cos 2\theta}{2},$$
$$\langle n_{j\uparrow}\rangle=\frac{y}{2}=Q+\langle m_j\rangle(R-Q)=Q+\frac{1+\cos 2\theta}{2}(R-Q) \quad (32)$$

Кореляційні функції будуть такими:

$$\langle m_im_j\rangle-\langle m_i\rangle\langle m_j\rangle=\frac{1}{4}\left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}\right)^{j-i}\sin^2 2\theta, \quad (33)$$

$$\langle n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}\rangle-\langle n_{i\uparrow}\rangle\langle n_{j\uparrow}\rangle=\frac{1}{4}(R-Q)^2\left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}\right)^{j-i}\sin^2 2\theta. \quad (34)$$

Власні значення Λ_1 і Λ_2, а також $\sin 2\theta$ можна знайти як функції від x. Величини R і Q із (26) за допомогою w і γ з (20) можна подати у вигляді

$$R=1-\frac{1/2}{1-wcb}-\frac{1/2}{1-\gamma cb},$$
$$Q=1-\frac{1/2}{1-wb}-\frac{1/2}{1-\gamma b}. \quad (35)$$

Це дає можливість кореляційні функції (33) і (34) записати як функції від x і ν:

$$\langle m_i m_j\rangle - \langle m_i\rangle\langle m_j\rangle = x(1-x)\left\{\frac{2\left[q^4x(1-x)+(x-\frac{1}{2})^2\right]^{\frac{1}{2}}-1}{2\left[q^4x(1-x)+(x-\frac{1}{2})^2\right]^{\frac{1}{2}}+1}\right\}^{j-i}, \tag{36}$$

$$\langle n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}\rangle-\langle n_{i\uparrow}\rangle\langle n_{j\uparrow}\rangle=\left|\frac{x(1-x)}{4}\left(\frac{1}{1-wb}+\frac{1}{1-\gamma b}-\frac{1}{1-wcb}-\frac{1}{1-\gamma cb}\right)^2\right|\left[\frac{2\left[q^4x(1-x)+(x-\frac{1}{2})^2\right]^{\frac{1}{2}}-1}{2\left[q^4x(1-x)+(x-\frac{1}{2})^2\right]^{\frac{1}{2}}+1}\right]^{j-i}. \tag{37}$$

Оскільки $\Lambda_2 > \Lambda_1$, то із (33) і (34), або із (36) і (37), видно, що кореляційні функції експоненціально спадають з відстанню. Кореляційна довжина L в одиницях міжвузельної відстані є такою:

$$L = \left[\ln\left(\frac{\Lambda_1}{\Lambda_2}\right)\right]^{-1}. \tag{38}$$

Висновки

Нашим основним результатом є демонстрація того, що одновимірну модель Ізінга з магнітним полем можна фізично змістовно розширити із збереженням можливості знайти точний розв'язок. Ця можливість ґрунтується на використанні проекційних властивостей чисел заповнення і, звичайно, є наслідком відносної простоти моделі. Точний розв'язок можна знайти при деяких інших модельних допущеннях про електронну підсистему. Наприклад, можна врахувати гібридизацію між двома електронними рівнями.

Література

[1] Kinnon W.R., Haering R.R. Physical mechanism of intercalation // Modern Aspects of Electrochemistry. – 1983, № 15. – P. 235–394.

[2] Фаренюк О.Я., Швайка А.М. Одномірна псевдоспін-електронна модель з прямою взаємодією // Препринт Інституту фізики конденсованих систем. – Львів, 1999. ICMP-99-21-U. – 13 с.

[3] Дубленич Ю.І. Фазові переходи та розшарування фаз у псевдоспін-електронній моделі з прямою взаємодією псевдоспінів без поперечного поля та перенесення електронів // Препринт Інституту фізики конденсованих систем. – Львів, 2001. ICMP-01-01-U. – 7 с.

[4] Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир. 1985. – 486 с.

[5] Гурвиц А., Курант Р. Теория функций. – М.: Наука. 1968. – 618 с.

THE EXACT SOLUTION OF LINEAR MODEL OF INTERACTING LATTICE AND ELECTRON GASES

V. Gorbatyuk[a], *, M. Micov[b]

[a] *Lviv Polytechnic National University*
12, S. Bandery Str., Lviv, 79013, Ukraine
[b] *Hefra-lab*
Lamacska-2Г-Bratislava – Slovakia

The exact solution of linear (one-dimensional) model of lattice gas, which interact with electrons are founded. All electrons are on same level. A Hubbard repulsion between electrons are taken into account. Such model describe the most important features of intercalation process in layered crystals, qualitatively. A free energy, concentartion, correlation functions are calculated.

Keywords: Ising model, lattice gas, interaction with electrons

PACS: 42.70. Hj, 81.40 Ef

UDK: 548.5; 535.34; 621.378.324

*Corresponding author