ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ О.І. АХІЄЗЕРА НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР «ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ» НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР «ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ» НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису

Сотніков Андрій Геннадійович

УДК 537.876, 538.9

ДИСЕРТАЦІЯ

ПЕРШОПРИНЦИПНІ ТА СЕРЕДНЬОПОЛЬОВІ ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ОПИСУ БЛИЗЬКОКРИТИЧНИХ ЯВИЩ У КВАНТОВИХ ГАЗАХ

01.04.02 – Теоретична фізика Фізико-математичні науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук. Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело А.Г. Сотніков

Науковий консультант — **Слюсаренко Юрій Вікторович**, доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України

Харків – 2020

АНОТАЦІЯ

Сотніков А. Г. Першопринципні та середньопольові теоретичні підходи до опису близькокритичних явищ у квантових газах. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Інститут теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, – Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, Харків, 2020.

У дисертаційній роботі представлені результати досліджень близькокритичних явищ та фазових переходів у квантових газах за допомогою першопринципних та середньополевих теоретичних підходів. Теорію близькокритичних явищ розвинуто та узагальнено на випадки, що реалізуються в сучасних експериментах з ультрахолодними газами атомів лужних і лужноземельних металів й елементів групи лантану у спеціальних оптичних та магніто-оптичних пастках, а також в експериментах з дослідження фізичних властивостей кристалів оксидів кобальту в зовнішніх полях.

Зокрема, досліджено термодинамічні характеристики ідеальних газів в режимі квантового виродження на всьому інтервалі температур, у тому числі таких, де розкладання в рамках теорії збурень є непридатними. Доведено, що явні залежності хімічних потенціалів від температури в режимах квантового виродження можуть бути ефективно апроксимовані скінченними поліноміальними рядами. Визначено мінімально необхідну кількість членів в таких поліноміальних наближеннях для ідеальних газів зі статистиками Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака.

Досліджено ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону ультрахо-

лодними бозе-газами атомів лужних металів. Принципова можливість таких ефектів показана на прикладі проходження електромагнітного імпульсу з нормальним (гаусовим) розподілом спектральної густини інтенсивності через розріджений газ атомів лужних металів, що знаходиться в стані Бозе-Ейнштейнівського конденсату. Вивчено випадок, який базується на використанні рівнів зеєманівського розщеплення надтонкої структури атомів натрію в зовнішньому однорідному сталому магнітному полі та виборі відповідної заселеності зеєманівських підрівнів основного стану цих атомів. Визначено умови, в яких при проходженні через конденсат оптичного сигналу можна виділяти в ньому компоненти строго визначених частот із залишками інших гармонік незначної інтенсивності. Показано також, що якщо отриманий в результаті такої фільтрації сигнал повторно пропустити крізь атомну хмару з конденсатом, але вже при іншій напруженості магнітного поля, оптичний сигнал можна практично повністю очистити від шумів.

Показано принципову можливість прискорення релятивістських частинок ультрахолодними газами атомів лужних металів у стані бозе-конденсації. Встановлено умови змін енергії, що пов'язані з явищем Вавілова-Черенкова, для таких частинок в атомарних газах. Вивчено можливість визначення спектральних характеристик атомів лужних металів на основі детектування черенковського випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом.

Узагальнено теоретичний підхід динамічної теорії середнього поля на випадки опису взаємодіючих фермі-газів з різними амплітудами тунелювання, густиною частинок, високими спіновими симетріями та за наявності обмінної взаємодії між частинками по типу зв'язку Гунда. За наявності дисбалансу амплітуд тунелювання вивчено температурні залежності переходу в упорядкований стан від амплітуди міжатомної взаємодії та параметра дисбалансу у двота тривимірних просторових геометріях ґратки. Нижче критичної температури Нееля суміші з різними амплітудами тунелювання також мають просторову модуляцію типу хвилі густини заряду, яка забезпечує безпосередню ознаку для спостереження впорядкованого стану. Обраховано ентропію для широкого спектру параметрів системи. Визначено режими, в яких двокомпонентні суміші, що мають дисбаланс амплітуд тунелювання, мають чіткі переваги перед збалансованими з метою отримання та виявлення квантового магнетизму в оптичних ґратках.

Отримано фазові діаграми магнітних фаз та представлено ефективні спінові моделі у границях сильного зв'язку для ультрахолодних газів ферміатомів в оптичних ґратках. Показано, що такі суміші можуть мати впорядкування типу антиферомагнетика з легкою віссю, феримагнетика, хвилі густини заряду та нахиленого антиферомагнетика, або бути невпорядкованими залежно від параметрів системи. Детально вивчено відповідні фазові діаграми та досліджено стійкість різних фаз відносно термальних флуктуацій. Проведено кількісний аналіз для газу, захопленого в гармонічну пастку, як в межах наближення локальної густини, так і з використанням узагальнення динамічної теорії середнього поля для координатного простору.

Вивчено вплив просторової анізотропії амплітуд тунелювання на квантові фази ультрахолодних ферміонів в оптичних ґратках. Зокрема, з використанням динамічної теорії середнього поля досліджено область кросоверу між ізотропною квадратною та ізотропною кубічною геометріями ґратки. Аналізується фазовий перехід від антиферомагнітного до парамагнітного стану та спостерігається значна зміна критичної температури. Досліджено також локалізаційні властивості системи, такі як стисливість та подвійна заселеність вузлів. Зроблено висновок, що обчислені профілі густини атомів можуть бути використані для виявлення фазових переходів, керованих анізотропією.

Досліджено магнітні фази трикомпонентних сумішей ультрахолодних ферміонів з відштовхуючою взаємодією в оптичних ґратках з простою кубічною або квадратною геометрією. При помірній силі взаємодії визначено послідовність термічно-індукованих переходів між впорядкованими станами з двома та трьома підґратками за допомогою проведеного узагальнення теорії динамічного середнього поля. З відповідного теоретичного аналізу зроблено висновок, що впорядкування дальньої дії у трикомпонентних сумішах відбувається за аналогічних температур до тих, що відповідають фазовим переходам у двокомпонентних сумішах. Проведено узагальнення домішкового розв'язувача типу точної діагоналізації для багатокомпонентних сумішей та успішно застосовано в рамках теорії динамічного середнього поля. Розроблений підхід вперше дозволив отримати детальну фазову діаграму з відповідними лініями переходів до магнітно-впорядкованих фаз при заповненні однією частинкою на вузол (заповнення зони на 1/3) у простій кубічній ґратці. На основі розробленого теоретичного підходу досягнуто необхідну точність для вивчення залежності ентропії поблизу магнітно-впорядкованих фаз, що дозволило зробити важливі прогнози для поточних та майбутніх експериментів, спрямованих на вивчення фаз дальнього порядку в ультрахолодних атомних сумішах.

Проведено аналіз рівноважних фаз та відповідних областей співіснування при ненульовій температурі для моделі Габбарда з SU(4)-симетричною взаємодією між частинками. Визначено еволюцію спостережуваних величин у низькотемпературних фазах при зниженні симетрії гамільтоніана до двозонної моделі Габбарда. Зниження симетрії проведено за рахунок різних амплітуд взаємодії між компонентами, або введенням доданку типу спин-фліп (зв'язок Гунда). За рахунок обчислення ентропії для різних симетрій моделі, визначено оптимальні режими наближення до досліджуваних фаз в експериментах з ультрахолодними лужними та лужноземельними атомами в оптичних ґратках.

Теоретично передбачено явище конденсації спін-триплетних екситонів у кристалах оксидів кобальту та пояснена гістерезисна поведінка таких сполук у зовнішньому сильному магнітному полі. Отримано та проаналізовано низькотемпературні фазові діаграми групи кристалів на основі оксидів кобальту з домішками елементів групи лантана, кальцію, стронцію та фтору. Досліджено дисперсійні характеристики екситонних збуджень в таких системах та показано, що результати розвинутих теоретичних підходів добре узгоджуються з проведеними експериментами з резонансного непружного рентгенівського розсіяння.

Серед основних результатів і таких, що мають наукову новизну, в стислому вигляді можуть бути виділені наступні. Розроблено теоретичний підхід, що дозволив отримати аналітичні вирази для залежностей хімічних потенціалів ідеальних квантових газів від температури, що можуть застосовуватись з достатньою точністю на всьому інтервалі температур. Досліджено ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону газами атомів лужних металів у стані конденсації. Передбачено ефект прискорення релятивістських частинок та показано можливість визначення спектральних характеристик атомів лужних металів на основі детектування черенковского випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом. Узагальнено динамічну теорію середнього поля та показано, що двокомпонентні фермі-гази з різними амплітудами тунелювання компонент мають переваги з точки зору досягнення магнітно-впорядкованих фаз. Досліджено низькотемпературні фази газів атомів, що мають як різні амплітуди тунелювання, так й різну густину компонент в оптичних ґратках. Встановлено критичні температури переходів між три- та двопідгратковими антиферомагнітно-впорядкованими станами в SU(3)-симетричній моделі Габбарда. Теоретично вивчено ефекти впливу спінових симетрій на феромагнітне впорядкування в дво- та триорбітальній моделі Габбарда. Запропоновано теорію бозе-конденсації спін-триплетних екситонів в кристалах оксидів кобальту в зовнішньому сталому магнітному полі. Теоретично досліджено низькотемпературні фазові діаграми оксидів кобальту з домішками кальцію, стронцію, фтору та елементів групи лантану. Обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень, що добре узгоджуються з наявними експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Практичне і наукове значення отриманих результатів полягає в тому, що результати досліджень доповнюють і розширюють наявні уявлення про квантові гази як у відсутності так і за наявності зовнішніх полів, у тому числі таких, що утворюють просторово-періодичні ґраткові структури. Зокрема, результати з обрахованих характеристик черенковського випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом можуть бути використані для більш точного визначення спектральних характеристик атомів лужних металів. Результати, що відносяться до ультрахолодних атомів у зовнішніх полях лазерів можуть бути використані при розробці та побудові високоточних оптичних приладів та розробці універсальних квантових симуляторів. Останні можуть бути застосовані для точного вивчення більш складних твердотільних систем задля посилення таких ефектів як високотемпературна надпровідність, колосальний магнетоопір, орбітальне та магнітне впорядкування тощо. Результати з близькокритичних явищ у кобальтитах можуть бути використані у спінтрониці та магнітних пристроях, що потребують високої стійкості по відношенню до термічних флуктуацій та зовнішніх полів. Таким чином, дослідження, проведені в дисертації, є актуальними та мають як фундаментальне, так і прикладне значення.

Ключові слова: квантовий газ, ультрахолодні атоми, оптичні ґратки, фазові переходи, електромагнітне збурення, функції Гріна, модель Габбарда, спіново-хвильовий підхід, теорія середнього поля, магнітне впорядкування, спінові симетрії, кристали оксидів кобальту, багатоелектронні стани, екситонний конденсат, дисперсія збуджень.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Slyusarenko Yu. V., Sotnikov A. G. Feasibility of using Bose-Einstein condensates for filtering optical pulses. *Low Temp. Phys.* 2010. Vol. 36. P. 671–676. Квартиль Q3 (2010).

2. Sotnikov A. Magnetic field dependence and the possibility to filter ultraslow light pulses in atomic gases with Bose–Einstein condensates. *Phys. Scr.* 2010. Vol. T140, P. 014061. Квартиль Q2 (2010).

3. Slyusarenko Y. and Sotnikov A. Propagation of relativistic charged particles in ultracold atomic gases with Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 2011. Vol. 83, P. 023601. Квартиль Q1 (2011).

4. Sotnikov A.G. On some peculiarities of propagation of weak electromagnetic pulses in Bose-Einstein condensates of alkali-metal atoms. *Opt. and Spectr.* 2011. Vol. 111, P. 675–682. Квартиль Q3 (2011).

5. Sotnikov A., Cocks D., and Hofstetter W. Advantages of mass-imbalanced ultracold fermionic mixtures for approaching quantum magnetism in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109, P. 065301. Квартиль Q1 (2012).

6. Sotnikov A., Snoek M., and Hofstetter W. Magnetic phases of mass- and population-imbalanced ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2013. Vol. 87, P. 053602. Квартиль Q1 (2013).

7. Sotnikov A. and Hofstetter W. Magnetic ordering of three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2014. Vol. 89, P. 063601. Квартиль Q1 (2014).

8. Sotnikov A. Critical entropies and magnetic-phase-diagram analysis of ultracold three-component fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2015. Vol. 92, P. 023633. Квартиль Q1 (2015).

9. Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple

lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2015. Vol. 92, P. 043623. Квартиль Q1 (2015).

10. Sotnikov A. Perspectives of optical lattices with state-dependent tunneling in approaching quantum magnetism in the presence of the external harmonic trapping potential. *Phys. Lett. A* 2016. Vol. 380, P. 1184. Квартиль Q2 (2016).

11. Cichy A. and Sotnikov A. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. A* 2016. Vol. 93, P. 053624. Квартиль Q1 (2016).

12. Слюсаренко Ю.В., Сотніков А.Г. Унікальні ефекти відгуку ультрахолодних газів атомів лужних металів у стані з Бозе-Ейнштейнівським конденсатом на збудження електромагнітним полем. *Вісн. Нац. Акад. Наук Укр.* 2016. Т. 7, С. 19–26.

13. Sotnikov A. and Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. Sci. Rep. 2016. Vol. 6, P. 30510. Квартиль Q1 (2016).

14. Sotnikov A.G., Sereda K.V., and Slyusarenko Y.V. Chemical potentials and thermodynamic characteristics of the ideal Bose and Fermi gases in the region of quantum degeneracy. *Low Temp. Phys.* 2017. Vol. 43. P. 144–151. Квартиль Q3 (2017).

15. Golubeva A., Sotnikov A., Cichy A., Kuneš J., and Hofstetter W. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *Phys. Rev. B* 2017. Vol. 95. P. 125108. Квартиль Q1 (2017).

16. Sotnikov A. and Kuneš J. Competing phases in the model of Pr-based cobaltites. *Phys. Rev. B* 2017. Vol. 96. P. 245102. Квартиль Q1 (2017).

17. Fernández Afonso J., Sotnikov A., and J. Kuneš. Theoretical investigation of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. *J. Phys.: Condens. Matter* 2018. Vol. 30, P. 135603. Квартиль Q1 (2018).

18. Sotnikov A., Cichy A., and Kuneš J. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *Phys. Rev. B* 2018.

Vol. 97, Р. 235157. Квартиль Q1 (2018).

19. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y., Singh A., Huang D.-J., Tomiyasu K., Du C.-H., Kuneš J., de Groot F. M. F. Excitonic dispersion of the intermediate-spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic X-ray scattering. *Phys. Rev. B* 2018. Vol. 98, P. 035149. Квартиль Q1 (2018).

20. Fernández Afonso J., Sotnikov A., Hariki A., and J. Kuneš. Pressureinduced spin-state ordering in Sr₂CoO₃F. *Phys. Rev. B* 2019. Vol. 99, P. 205118. Квартиль Q1 (2018).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

21. Slyusarenko Yu. V. and Sotnikov A. G. Effects in the linear response of atomic Bose-Einstein condensates to an external electromagnetic perturbation. 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics: Book of abstracts (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.

22. Sotnikov A. and Hofstetter W. Quantum phase transitions of ultracold atoms in optical lattices: dynamical mean field theory studies. *3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics*: Book of abstracts (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 168–169.

23. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 35 (Stuttgart, Germany, March 12–16, 2012). Stuttgart, 2012. P. 1.

24. Sotnikov A. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures.
6th International Workshop "Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence":
Book of abstracts (Lyon, France, June 5–8, 2012). Lyon, 2012. P. 90.

25. Slyusarenko Yu. V. and Sotnikov A. G. Perspectives of Bose-Einstein condensates for filtering of light pulses and acceleration of relativistic charged particles. 4th Conference "Statistical Physics: Modern Trends and Applications":

Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2012). Lviv, 2012. P. 188.

26. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 29 (Hannover, Germany, March 18–22, 2013). Hannover, 2013. P. 2.

27. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *International Conference "The New Generation of Strongly Correlated Electron Systems*": Book of abstracts (Sestri Levante, Italy, July 1–5, 2013). Sestri Levante, 2013. P. 22.

28. Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 34 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 2.

29. Sotnikov A. and Hofstetter W. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 50 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 1.

30. Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Real-Space Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric fermionic Hubbard model and its extensions. Magnetic orderings and Hund's coupling. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section Q 15 (Heidelberg, Germany, March 23–27, 2015). Heidelberg, 2015. P. 4.

31. Sotnikov A.G. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *VI International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics"*: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 2–5, 2015). Kharkiv, 2015. P. 46.

32. Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the Two-Band Hubbard Model. Magnetic orderings and Hund's coupling. *The International Workshop FINESS-2015: Finite-Temperature Non-Equilibrium* Superfluid Systems: Book of abstracts (Sopot, Poland, September 14–18, 2015). Sopot, 2015. P. 44.

33. Cichy A., Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical Mean-Field Approach. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.

34. Golubeva A., Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric Fermi-Hubbard model and its extensions. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.

35. Sotnikov A. and Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. DPG Spring Meeting of the Section SKM: Book of abstracts, section MA 68 (Dresden, Germany, March 19–24, 2017). Dresden, 2017. P. 1.

36. Sotnikov A. Field-induced exciton condensation in d⁶ perovskites. NGSCES 8th International Conference: Book of abstracts (Barcelona, Spain, September 4–8, 2017). Barcelona, 2017. P. 64.

37. Sotnikov A. Influence of continuous symmetries on magnetic ordering in the Hubbard model with multiple spin and orbital components. *FOR1807 Winter School* "Numerical Methods in Strongly Correlated Quantum Systems": Book of abstracts (Marburg, Germany, February 19–23, 2018). Marburg, 2018. P. 33.

38. Cichy A. and Sotnikov A. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 5 (Erlangen, Germany, March 4–9, 2018). Erlangen, 2018. P. 1.

39. Fernández Afonso J., Sotnikov A., and Kuneš J. Theoretical investigation of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11– 16, 2018). Berlin, 2018. P. 146

40. Sotnikov A., and Kuneš J. Competing phases in the model of Pr-based

cobaltites. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 199.

41. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y., Singh A., Huang D.-J., Tomiyasu K., Du C.-H., Kuneš J., de Groot F. M. F. Excitonic dispersion of the intermediate-spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic X-ray scattering. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 205.

42. Cichy A. and Sotnikov A. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *42th International Conference of Theoretical Physics: correlations and coherence on different scales, CCDS 2018*: Book of abstracts (Ustroń, Poland, September 9–14, 2018). Ustroń, 2018. P. 105.

43. Zambrano Y., Sotnikov A., and Cichy A. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section SAMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 18.

44. Cichy A., Sotnikov A., and Zambrano Y. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section SAMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 42–43.

45. Fernández Afonso J., Sotnikov A., Hariki A., and Kuneš J. Pressureinduced spin-state ordering in Sr₂CoO₃F. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 6.

46. Cichy A. and Sotnikov A. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting*

of the Section SKM: Book of abstracts, Magnetism Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 37.

47. Raspopova D.M. and Sotnikov A.G. Slowing of electromagnetic pulses in the proximity of phase transition to Bose-Einstein condensate in ultracold atomic gases. X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019. P. 153.

48. Sotnikov A.G. Orbital ordering of ultracold fermionic mixtures in optical lattices. X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019.
P. 157.

49. Sotnikov A. and Kuneš J. Ferromagnetism of LaCoO₃. 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2019). Lviv, 2019. P. 68.

50. Cichy A., Sotnikov A., and Zambrano Y. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *XIX National Conference on Superconductivity*: Book of abstracts (Bronisławów, Poland, October 6–11, 2019). Bronisławów, 2019. P. 42.

ABSTRACT

Sotnikov A. G. First-principle and mean-field theoretical approaches to the description of near-critical phenomena in quantum gases. – Qualification scientific paper, manuscript.

Thesis for a Doctoral Degree in Physics and Mathematics: Speciality 01.04.02 "Theoretical physics" (104 – Physics and Astronomy). – A.I. Akhiezer Institute for Theoretical Physics of the National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology" NAS of Ukraine, – National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology" NAS of Ukraine, Kharkiv, 2020.

The Doctoral Thesis presents the results of the research on near-critical phenomena in quantum gases by means of the first-principle and mean-field theoretical approaches. The theory of near-critical phenomena is developed and generalized for the cases, which are currently realized in experiments with ultracold gases of alkali and alkaline-earth-like atoms in special optical and magneto-optical traps and also in experiments with cobalt oxides in external fields, where the physical properties of the corresponding crystals are studied.

In particular, thermodynamic characteristics of ideal gases in the regime of quantum degeneracy are studied on the whole temperature range including those intervals, where the perturbation-theory expansions become inaccurate. It is shown that the explicit dependencies of the chemical potentials on the temperature in the regime of quantum degeneracy can be effectively approximated by finite polynomial series. The minimal sufficient number of terms in the polynomial approximations for ideal Bose and Fermi gases is determined.

Effects of filtering of optical pulses by ultracold gases of alkali atoms in the state with a Bose-Einstein condensate are studied. A principal possibility is shown for the case of a propagation of electromagnetic pulse with a normal (Gaussian) distribution of spectral intensity through a dilute gas of alkali-metal atoms with a Bose-Einstein condensate. The Zeeman-splitted levels of the hyperfine structure of sodium atoms in an external magnetic field and their specific occupancy are used for the quantitative theoretical analysis. The conditions, in which only specific components of the optical pulse are filtered out leaving only small noise, are determined. It is also shown that the signal can be almost completely separated from the noise by an additional propagation through the atomic vapor with a condensate, but with another intensity of an external magnetic field.

A principal possibility of acceleration of relativistic charged particles in ultracold gases of alkali atoms in the state with a Bose-Einstein condensate are shown. For such particles, conditions for the energy change related to the Vavilov-Cherenkov effect in atomic gases with a condensate are determined. A possibility of determining spectral characteristics of alkali atoms by means of Cherenkov radiation in these gases is studied.

The dynamical mean-field theoretical approach is generalized for the cases of interacting fermions with different tunneling amplitudes, particle densities, high spin symmetries and the presence of the Hund-type exchange terms. In the presence of hopping imbalance, the temperature dependencies of the transition into the ordered state as a function of the interaction strength and the imbalance parameter in two and three spatial dimensions are studied. Below the critical temperature for Néel order, mass-imbalanced mixtures also exhibit a charge-density wave, which provides a directly observable signature of the ordered state. For the trapped system, the results obtained by real-space dynamical mean-field theory are compared to those from a local-density approximation. The entropy for a wide range of parameters is estimated. The regimes, in which mass-imbalanced mixtures have clear advantages over balanced ones for the purpose of obtaining and detecting quantum magnetism, are determined.

For ultracold gases of fermionic atoms in optical lattices, the magnetic phase diagrams are obtained and effective spin models in the strong-coupling limits are derived. It is shown that these mixtures can have easy-axis antiferromagnetic, ferrimagnetic, charge-density wave, and canted-antiferromagnetic order or be unordered depending on parameters of the system. The resulting phase diagram is studied in detail and investigate the stability of the different phases with respect to thermal fluctuations. A quantitative analysis for a gas confined in a harmonic trap, both within the local density approximation and using a full real-space generalization of dynamical mean-field theory, is performed.

The effects of anisotropic hopping amplitudes on quantum phases of ultracold fermions in optical lattices are studied. In particular, using dynamical mean-field theory the dimensional crossover between the isotropic square and the isotropic cubic lattice is investigated. The phase transition from the antiferromagnetic to the paramagnetic state is analyzed and a significant change in the critical temperature is observed. The localization properties of the system, such as the compressibility and double occupancy, are also investigated. It is concluded that the calculated density profiles can be used to detect the anisotropy-driven transitions.

The finite-temperature magnetic phases of three-component mixtures of ultracold fermions with repulsive interactions in optical lattices with simple cubic or square geometry are studied by means of dynamical mean-field theory. At moderate interaction strength, a sequence of thermal phase transitions into two- and threesublattice ordered states by means of the unrestricted real-space generalization of dynamical mean-field theory is determined. From the corresponding theoretical analysis it is concluded that long-range ordering in three-component mixtures should be observable at comparable temperatures as in two-component mixtures. The generalization of the exact diagonalization solver for multicomponent mixtures is developed and employed in the framework of the dynamical mean-field theory. The developed approach allowed to obtain a finite-temperature phase diagram with the corresponding transition lines to magnetically ordered phases at filling one particle per site (1/3 band filling) in simple cubic lattice geometry. Based on the developed theoretical approach, the necessary accuracy is attained to study the entropy dependence in the vicinity of magnetically ordered phases that allowed to make important predictions for ongoing and future experiments aiming to approach and study long-range-order phases in ultracold atomic mixtures.

The equilibrium many-body phases and their coexistence regions at nonzero temperature for the Hubbard model with SU(4)-symmetric interactions are studied. The evolution of observables in low-temperature phases while lowering the symmetry of the Hamiltonian towards the two-band Hubbard model is determined. The symmetry lowering is achieved by varying interflavor interactions or by introducing the spin-flip term (Hund's coupling). By calculating the entropy for different symmetries of the model, the optimal regimes for approaching the studied phases in experiments with ultracold alkali and alkaline-earth-like atoms in optical lattices are determined.

The Bose-Einstein condensation phenomenon of spin-triplet excitons in cobalt oxide crystals is predicted and hysteresis behavior in external strong magnetic field is explained. Low-temperature phase diagrams of the cobalt-oxide crystals doped by lanthanum-group elements, calcium, strontium, and fluorine are studied. Dispersive characteristics of the excitations in these systems are analyzed and it is shown that the results of the developed theoretical approaches agree well with the experiments performed with the resonant inelastic X-ray scattering.

Among the main results and those, which have a significant scientific novelty, the following ones can be additionally mentioned. The theoretical approach, which allowed to obtain analytic expressions for the dependencies of the chemical potentials on the temperature for ideal quantum gases in the whole temperature range, is developed. The filtering effects for the optical pulses propagating in the gases of alkali-metal atoms with a condensate are studied. The acceleration of relativistic particles in these systems is predicted and the determination of spectral characteristics of alkali atoms by means of Cherenkov radiation is proposed. The dynamical mean-field theory is generalized and it is shown that the two-component Fermi gases with different hopping amplitudes have advantages from the point of view of approaching magnetically-ordered phases. The low-temperature phases of the gases with different hopping amplitudes and densities of components in optical lattices are studied. The critical temperatures between three- and twosublattice antiferromagnetically-ordered states in the SU(3)-symmetric Hubbard model are determined. The effects of spin symmetries on the ferromagnetic ordering in the two- and three-orbital Hubbard model are theoretically studied. The theory of the field-induced Bose-Einstein condensation of spin-triplet excitons in cobalt oxides is proposed. Low-temperature phase diagrams of cobalt-oxide crystals doped with calcium, strontium, fluorine, and lanthanum-group elements are derived. Dispersion characteristics of the spinful excitations, which agree well with the existing experimental data on the inelastic X-ray scattering in lanthanum cobalt oxide, are obtained

Practical and scientific significance refers to the fact that the results supplement and expand the existing knowledge on quantum gases both in the absence and in the presence of external fields, including those that form spatiallydependent lattice structures. In particular, the results on the obtained characteristics of the Cherenkov radiation in dilute gases with a Bose-Einstein condensate can be used for a more precise determination of the spectral characteristics of alkalimetal atoms. The results, which refer to the ultracold gases in the external laser fields, can be used in the development of the high-precision optical devices and universal quantum simulators. The latter can be applied for the exact studies of the more complex solid-state compounds in order to enhance the critical behavior of such effects as high-temperature superconductivity, colossal magnetoresistance, orbital and magnetic ordering, etc. The results on the near-critical phenomena in cobalt oxides can be used in spintronics and magnetic devices, which require high stability against thermal fluctuations and external fields. Therefore, the research conducted in the Doctoral Thesis is relevant and has both the fundamental and applied significance.

Keywords: quantum gas, ultracold atoms, phase transitions, optical lattices, electromagnetic perturbation, Green's functions, Hubbard model, spin-wave

approach, mean-field theory, magnetic ordering, spin symmetries, cobalt oxides, many-electron states, exciton condensate, dispersion of excitations.

3MICT

3MICT	21
ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА АБРЕВІАТУР	24
ВСТУП	26
РОЗДІЛ 1 ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ ТЕОРЕТИЧНИХ ПІДХОДІВ	
ДО ОПИСУ ЯВИЩ У КВАНТОВИХ ГАЗАХ	36
1.1. Термодинамічні властивості ідеальних бозе- та фермі-газів у від-	
сутності зовнішніх полів	36
1.2. Лінійна теорія відгуку ідеальних бозе-газів на зовнішнє електро-	
магнітне збурення	53
1.3. Опис рівноважних станів взаємодіючих квантових газів у	
просторово-періодичних потенціалах ґраток	69
1.3.1. Оптичні ґратки та модель Габбарда	69
1.3.2. Спіново-хвильовий підхід	73
1.3.3. Розкладання в границі сильного зв'язку	75
1.3.4. Середньопольовий підхід	81
1.3.5. Динамічна теорія середнього поля	83
Висновки до розділу 1	93
РОЗДІЛ 2 БЛИЗЬКОКРИТИЧНІ ЯВИЩА В УЛЬТРАХОЛОДНИХ	
БОЗЕ-ГАЗАХ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ З ЗОВНІШНІМ ЕЛЕКТРОМА-	
ГНІТНИМ ПОЛЕМ	96
2.1. Ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону в бозе-	
конденсатах атомів лужних металів	96
2.2. Проходження релятивістської зарядженої частинки крізь атомар-	
ний БЕК	108
2.3. Відсутність особливостей в явищі уповільнення світла в околі	
фазового переходу до стану з БЕК	119

Висновки до розділу 2
РОЗДІЛ 3 МАГНІТНЕ ВПОРЯДКУВАННЯ ДВОКОМПОНЕН-
ТНИХ ФЕРМІ-ГАЗІВ В ОПТИЧНИХ ҐРАТКАХ
3.1. Переваги ультрахолодних сумішей фермі-атомів з різними масами
для досягнення магнітного впорядкування в оптичних ґратках $$. $$. 124
3.2. Вплив різної густини атомів на магнітні фази двокомпонентних
газових сумішей в оптичних ґратках
3.3. Перспективи оптичних ґраток зі станово-залежним тунелюванням
на магнітні фази в присутності зовнішнього утримуючого потенціалу151
3.4. Вплив ефектів анізотропії оптичних ґраток на многочастинкові
властивості фермі-газів
Висновки до розділу З
РОЗДІЛ 4 НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНІ ФАЗИ БАГАТОКОМПОНЕН-
ТНИХ ФЕРМІ-ГАЗІВ В ОПТИЧНИХ ҐРАТКАХ
4.1. Магнітне впорядкування трикомпонентних атомних сумішей в
оптичних ґратках
4.2. Термодинамічні властивості трикомпонентних атомних сумішей в
оптичних ґратках в околі фазових переходів
4.3. Порушення симетрії SU(4) та сильнокорельовані фази у чотири-
компонентній моделі Габбарда
4.4. Феромагнетизм в дво- та три-орбітальній моделі Габбарда 215
Висновки до розділу 4
РОЗДІЛ 5 ЕКСИТОННІ ВЛАСТИВОСТІ ОКСИДІВ КОБАЛЬТУ В
ОКОЛІ КРОСОВЕРУ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ СПІНОВИХ СТА-
HIB
5.1. Бозе-конденсація екситонів у LaCoO ₃ , індукована зовнішнім магні-
тним полем
5.2. Низькотемпературні фази в моделі кобальтитів із празеодимом 238
5.3. Екситонний магнетизм у LaSrCoO ₄

5.4. Впорядкування багатоелектронних спінових станів у Sr_2CoO_3F ,
зумовлене зовнішнім тиском
5.5. Дисперсія екситонів у LaCoO ₃ : теорія та експерименти
Висновки до розділу 5
ВИСНОВКИ
Подяки
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ
ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ
ДИСЕРТАЦІЇ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА АБРЕВІАТУР

БЕК	Бозе-Ейнштейнівський конденсат або конденсація
БЕ (BE)	Бозе-Ейнштейна (Bose-Einstein)
ФД (FD)	Фермі-Дірака (Fermi-Dirac)
EIП	Електромагнітно-індукована прозорість
ДТСП	Динамічна теорія середнього поля
AIM	Anderson impurity model (домішкова модель Андерсона)
DFT	Density functional theory (теорія функціоналу електронної густини)
LDA	Local density approximation (наближення локальної густини)
$\Pi M (PM)$	Парамагнітний (paramagnetic)
$A\Phi M (AFM)$	Антиферомагнітний (antiferromagnetic)
$\Phi M (FM)$	Феромагнітний (ferromagnetic)
DOS	Density of states (густина станів)
ΧГЗ	Хвиля густини заряду
ХГК	Хвиля густини кольору
ABK	Антиферомагнетик з виділеним кольором
H.c.	Hermitian conjugate (ермітово спряжений оператор)
SU	Special unitary (спеціальна унітарна група перетворень)
U	Unitary (унітарна група перетворень)
LS	Low spin (низький спін)
IS	Intermediate spin (проміжнийий спін)
HS	High spin (високий спін)
EK (EC)	Екситонний конденсат (excitonic condensate)
VCC (SSO)	Упорядкування спінових станів (spin-state ordering)
ПЕК	Полярний екситонний конденсат
ΦMEK	Феромагнітний екситонний конденсат

PCCO	$(\Pr_{1-y}\operatorname{Ln}_y)_x\operatorname{Ca}_{1-x}\operatorname{CoO}_3(\operatorname{Ln}=Y, \operatorname{Sm}, \operatorname{Gd})$
RIXS	Resonant inelastic x-ray scattering
	(резонансне непружне рентгенівське розсіювання)
$k_{\rm B}$	Константа Больцмана (як правило, обирається $k_{\rm B}=1)$
\hbar	Стала Планка
С	Швидкість світла у вакуумі
$\mu_{ m B}$	Магнетон Бора
Т	Температура
G	Функція Гріна
${\cal G}$	Функція Вейса
Σ	Самоенергія

вступ

Обґрунтування вибору теми дослідження. Вже більше сторіччя світове наукове співтовариство спирається на відкриті закони квантового світу з метою здобуття нових знань та їх використання для технічного прогресу людства. Слід зазначити, що широкий загал, який цікавився науковими аспектами розвитку суспільства, досить тривалий час мусив усвідомлювати власне самі відкриті закони мікросвіту та звикати до них, оскільки навіть їх формулювання було незвичним, деякою мірою дивовижним. Хоча б тому, що такі формулювання вимагали залучення понять ймовірності, яка закладена в основу квантової механіки, на відміну від звичних детерміністських фізичних законів-попередників. Зусилля науковців за ці роки увінчалися неабиякими успіхами. Зокрема, на даний час вважається, що у випадку, коли об'єктом досліджень є окрема частинка (будь то елементарна частинка, ядро, атом чи молекула), більшість квантових процесів у конкретних системах з наданими параметрами може бути змодельовано, розраховано та передбачено, принаймні з використанням сучасних обчислювальних методів. Але, як слід зазначити, що такі дослідження, попри їх показовість, цікавими могли бути, скоріше за все, для вчених, що працювали у відповідних областях фізики, хімії, техніки, чи тісно з ними пов'язаними.

Зовсім по іншому виглядає ситуація у випадку, коли мова заходить про прояв квантових ефектів у системах багатьох частинок. З одного боку, квантова система багатьох частинок стає набагато складнішою або навіть неймовірно складною для послідовного теоретичного опису з перших принципів. З іншого боку, такі ускладнення супроводжуються та компенсуються тими обставинами, що саме поле досліджень стає набагато ширшим та цікавішим, з'являються колективні квантові ефекти, що роблять систему унікальною за властивостями, які не спостерігаються ніде інде у природі. Яскравими прикладами такого прояву квантових властивостей речовини на макрорівні є явища магнетизму, надплинності, надпровідності, колосального магнетоопору тощо. Не дивлячись на багатолітню історію як теоретичних, так і експериментальних досліджень подібних явищ, багато їх аспектів чи механізмів досі залишаються недостатньо зрозумілими й слугують предметом запеклих наукових дискусій по всьому світу – узяти, як приклад, хоча б явище високотемпературної надпровідності. Причина такого стану речей саме у зазначеній складності таких систем для послідовного опису на мікроскопічному рівні.

Неабиякою вдачею у згаданому сенсі є той факт, що серед вражаючого переліку квантових систем існують і такі, що можуть демонструвати яскраві квантові властивості на макрорівні, залишаючись, однак, достатньо простими для опису й передбачення у них тих самих явищ, що виникають і в більш складних системах. Тим самим, такі середовища можуть слугувати певними моделями, так званими універсальними квантовими симуляторами [1], для вивчення властивостей більш складних середовищ. Мова йде про новітні на даний час системи – ультрахолодні квантові гази, які можуть послужити зручним плацдармом як для здобуття нових знань про речовину за надзвичайних умов, так і для технологій та завдань майбутнього.

Хоча й ультрахолодні гази є певною мірою спрощеною системою з точки зору побудови першопринципних теорій, вони залишаються нетривіальними системами для всебічного опису та послідовного розв'язку навіть модельних гамільтоніанів. Саме пошук розв'язків для систем близьких до сучасних експериментів призводить до необхідності застосування середньополевих підходів, які розвинуто в дисертаційній роботі. Теоретичні передбачення, таким чином, служать певним орієнтиром та системою відліку для нових експериментів з моделювання новітніх квантових станів матерії та посилення близькокритичних характеристик вже існуючих матеріалів.

Для досягнення поставленої мети з теоретичного опису близькокритичних явищ у квантових газах було сформульовано наступні завдання: • узагальнити теоретичний опис термодинамічних характеристик ідеальних бозе- і фермі-газів на випадок температур, що відповідають режиму квантового виродження, але де відомі аналітичні наближення стають неточними;

• застосувати першопринципну теорію лінійного відгуку ідеальних газів на зовнішнє електромагнітне збурення, яку побудовано в кандидатській дисертації автора [2], задля опису ефектів фільтрації оптичних сигналів та обміну енергії релятивістських частинок з газами у стані бозе-конденсації;

• теоретично описати явище магнітного впорядкування в незбалансованих двокомпонентних фермі-газах атомів в оптичних ґратках та отримати ефективні спінові гамільтоніани у границі сильного зв'язку;

• узагальнити динамічну теорію середнього поля та відповідні домішкові розв'язувачі на випадок багатокомпонентних ферміонних сумішей з високими спіновими симетріями;

• побудувати теорію бозе-конденсації спін-триплетних екситонів в кристалах оксидів кобальту;

• розвинути теоретичний підхід до опису ефективних спінових моделей та низькотемпературних фаз газу електронів в кобальтитах із домішками елементів групи лантану, кальцію, стронцію та фтору;

• дослідити дисперсійні характеристики збуджень та порівняти їх з наявними експериментальним даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Об'єктом дослідження є ефекти, що виникають в околі низькотемпературних фазових переходів між різними багаточастинковими станами квантових газів, а також при відгуку таких систем на збудження зовнішніми електромагнітними полями.

Предметом дослідження є ультрахолодні гази атомів лужних і лужноземельних металів й елементів групи лантану, оптичні ґратки, вироджені гази електронів у кристалах оксидів кобальту. Метод дослідження. Для вирішення поставлених у дисертації задач були використані наступні методи теоретичної фізики: метод вторинного квантування, теорія лінійного відгуку, формалізм функцій Гріна, теорія збурень, спіновохвильовий підхід, теорія середнього поля, динамічна теорія середнього поля, метод точної чисельної діагоналізації.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше здобуто наступні результати:

1. Наведено аналітичні вирази для залежностей хімічних потенціалів ідеальних квантових газів від температури, що можуть застосовуватись із достатньою точністю на всьому інтервалі температур.

2. Виявлено ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону газами атомів лужних металів у стані конденсації.

3. Передбачено ефект прискорення релятивістських частинок конденсатом та показано можливість визначення спектральних характеристик атомів лужних металів на основі детектування черенковського випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом.

4. Показано, що двокомпонентні фермі-гази з різними амплітудами тунелювання компонент мають переваги з точки зору досягнення у системі магнітно-впорядкованих фаз.

5. Здобуто низькотемпературні фази газів атомів, що мають як різні амплітуди тунелювання, так і різну густину компонент в оптичних ґратках.

6. Встановлено критичні температури переходів між три- та двопідґратковими антиферомагнітно-впорядкованими станами в SU(3)-симетричній моделі Габбарда.

7. Виявлено ефекти впливу спінових симетрій на феромагнітне впорядкування у дво- та триорбітальній моделі Габбарда.

8. Запропоновано механізм бозе-конденсації спін-триплетних екситонів у кристалах оксидів кобальту в зовнішньому сталому магнітному полі.

9. Теоретично обраховано низькотемпературні фазові діаграми оксидів кобальту з домішками кальцію, стронцію, фтору та елементів групи лантану.

10. Обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень, що добре узгоджуються з наявними експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Практичне і наукове значення отриманих результатів полягає в тому, що результати досліджень доповнюють і розширюють наявні уявлення про квантові гази і, зокрема, близькокритичні ефекти в таких системах. Результати, що стосуються обрахованих характеристик черенковского випромінювання в розріджених газах із бозе-конденсатом можуть бути використані для більш точного визначення спектральних характеристик атомів лужних металів. Результати, що відносяться до ультрахолодних атомів у зовнішніх полях можуть бути використані при розробці та побудові високоточних оптичних приладів та розробці універсальних квантових симуляторів. Останні можуть бути застосовані для точного вивчення більш складних твердотільних систем з метою посилення таких ефектів, як високотемпературна надпровідність, колосальний магнетоопір, орбітальне та магнітне впорядкування тощо. Результати з близькокритичних явищ у кобальтитах можуть бути застосовані в спінтрониці та магнітних пристроях, що потребують високої стійкості по відношенню до термічних флуктуацій та зовнішніх полів.

Особистий внесок здобувача. Результати дисертації опубліковані у статтях [3–22] і тезах доповідей наукових конференцій [23–52]. Здобувач брав участь у постановці задач, вирішених у дисертації, формулюванні основних ідей та методів дослідження, проведенні найбільш складних аналітичних і чисельних розрахунків, а також виконував контроль та перевірку результатів, отриманих іншими співавторами.

У статті [3] здобувачем було запропоновано використання поліноміального наближення для пераметризації хімічного потенціалу ідеальних квантових газів, що надало можливість вивчення термодинамічних характеристик квантових газів на всьому інтервалі температур. У роботах [4–7], із використанням числових методів було проаналізовано характеристики фільтрації сигналів оптичного діапазону в бозе-конденсаті атомів лужних металів та встановлено залежності характеристик фільтрації від зовнішнього сталого магнітного поля. У статті [8] здобувачем показано, що при прольоті релятивістської зарядженої частинки крізь атомну хмару з бозе-конденсатом може бути спостережено зворотний ефект Черенкова, тобто та обставина, що частинка може прискорюватись ультрахолодним газом. У роботах [9,10] наведено магнітно-впорядковані фази та відповідні фазові переходи в двокомпонентних незбалансованих сумішах фермі-атомів в оптичних ґратках. У статтях [11,12] обчислено вплив просторової анізотропії оптичної ґратки та утримуючого гармонічного потенціалу пастки на термодинамічні характеристики газів. У статтях [13, 14] здобувачем розроблено теоретичний підхід та проведено числовий аналіз фазових переходів в SU(3)-симетричній моделі Габбарда. У роботах [15–17] теоретично обраховано границі магнітно-впорядкованих фаз з чотирма та шістьма типами ферміонів в ґратці, вплив неперервних симетрій, зв'язку Гунда та кількості орбітальних станів на критичні температури та ентропії квантових газів. У статті [18] на прикладі двоорбітальної моделі Габбарда здобувачем запропоновано теорію бозеконденсації ексітонів у кристалах оксидів кобальту, що індукована зовнішнім магнітним полем. У статті [19] дисертантом теоретично розраховано низькотемпературні фази у кристалах оксидів кобальту з домішками празеодима. У статті [22] здобувачем виведено ефективну теоретичну модель для сполуки Sr₂CoO₃F та встановлено фазові переходи у системі під зовнішнім тиском. У роботах [20, 21] здобувачем обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень для порівняння з експериментальними даними.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на семінарі інституту теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ, загальнофізичних семінарах фізико-технічного факультету Харківського національного университету ім. В.Н. Каразіна, семінарах фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Вєркіна, семінарах за запрошенням у закордонних наукових установах:

– інститут теоретичної фізики, університет Гете, Франкфурт-на-Майні, Німеччина (2010 та 2014 рр.);

– фізичний факультет університету Стратклайда, Ґлазґо, Великобританія (2012 р.);

– інститут лазерної фізики, університет Гамбурґа, Німеччина (2014 р.);

– інститут фізики, університет Майнца ім. Йоганна Ґутенберґа, Німеччина (2014 р.);

– інститут фізики чеської академії наук, Прага, Чехія (2015 р.);

– фізичний факультет університету ім. Адама Міцкевіча, Познань, Польща (2018 р.);

– фізичний факультет університету Масарика, Брно, Чехія (2019 р.), а також на наступних міжнародних наукових конференціях та школах:

• 13th International Conference on Quantum Optics and Quantum Information (Kyiv, Ukraine, 28 May – 1 June, 2010),

• International Workshop and Summer school "Quo Vadis BEC?" (Dresden, Germany, 2–20 August, 2010),

• DPG Physics School "Quantum Gases in Dilute Atomic Vapour" (Bad Honnef, Germany, 28 March – 1 April, 2011),

• International Workshop "Strong Correlations in Multiflavor Ultracold Quantum Gases" (Hamburg, Germany, 23–24 June, 2011),

• International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics (Kharkiv, Ukraine, 29 August – 2 September, 2011),

• International Workshop "Modeling Materials With Cold Gases Through Simulations" (Zurich, Switzerland, 9–11 November, 2011),

• DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Stuttgart, Germany, 12–16 March, 2012),

• 6th International Workshop "Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence" (Lyon, France, June 5–8, 2012),

• 4th Conference "Statistical Physics: Modern Trends and Applications" (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2012),

• DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Hannover, Germany, March 18–22, 2013),

• International Conference "The New Generation of Strongly Correlated Electron Systems" (Sestri Levante, Italy, July 1–5, 2013),

• DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Berlin, Germany, March 17–21, 2014),

• DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Heidelberg, Germany, March 23–27, 2015),

• VI International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics" (Kharkiv, Ukraine, June 2–5, 2015),

• The International Workshop FINESS-2015: Finite-Temperature Non-Equilibrium Superfluid Systems (Sopot, Poland, September 14–18, 2015),

• DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016),

• DPG Spring Meeting of the Section SKM (Dresden, Germany, March 19–24, 2017),

NGSCES 8th International Conference (Barcelona, Spain, September 4–8, 2017),

• FOR1807 Winter School "Numerical Methods in Strongly Correlated Quantum Systems" (Marburg, Germany, February 19–23, 2018),

• DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Erlangen, Germany, March 4–9, 2018),

DPG Spring Meeting of the Section SKM (Berlin, Germany, March 11–16, 2018),

• 42th International Conference of Theoretical Physics: correlations and coherence on different scales, CCDS 2018 (Ustroń, Poland, September 9–14, 2018),

• DPG Spring Meeting of the Section SAMOP (Rostock, Germany, March 10–15, 2019),

DPG Spring Meeting of the Section SKM (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019),

• X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019 (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019),

• 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2019),

• XIX National Conference on Superconductivity (Bronisławów, Poland, October 6–11, 2019).

Зв'язок праці з науковими програмами, планами, темами. Дисертацію виконано в Інституті теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України. Вона є складовою частиною наступних проектів:

• базова програма «Відомчий запит НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки та техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Теоретичні дослідження у статистичній фізиці конденсованих середовищ зі спонтанно порушеною симетрією і газоподібних систем і теоретико-групових методів в теорії поля» (номер державної реєстрації 080906UP0010, термін виконання 2006–2010 рр., виконавець);

 цільова програма наукових досліджень Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України «Фундаментальні проблеми у фізиці елементарних частинок, ядерній фізиці та ядерній енергетиці» за темою «Статистична механіка процесів і явищ, пов'язаних із взаємодією частинок і випромінювання з конденсованим середовищем», грант НАН України для молодих вчених № 55/51–2009 (номер державної реєстрації 0109U006375, термін виконання 2009– 2010 рр., керівник);

• базова програма «Відомчий запит НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки та техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Розвиток методів статистичної фізики і квантової теорії поля для дослідження проблем конденсованих і газоподібних середовищ і динаміки полів і суперсиметричних подовжених об'єктів» (номер державної реєстрації 0111U009549, термін виконання 2011–2015 pp., виконавець);

• базова програма «Відомчий запит НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки та техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Дослідження класичних і квантових симетрій в теоретико-польових і струнних моделях і проблем статистичної механіки конденсованих середовищ» (номер державної реєстрації 0116U007065, термін виконання 2016–2020 рр., виконавець).

У 2018–2020 pp. робота над дисертацією проводилася в докторантурі Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут».

Публікації. Результати дисертації опубліковані у 50 наукових працях: у 20 статтях у фахових вітчизняних і міжнародних періодичних виданнях та у 30 тезах доповідей на вітчизняних і міжнародних наукових конференціях.

Структура і обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел із 353 найменувань на 38 сторінках та одного додатку. Робота містить 82 рисунка, 1 з яких займає всю сторінку, і 2 таблиці. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 328 сторінок, обсяг основної частини складає 261 сторінку.

РОЗДІЛ 1

ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ ТЕОРЕТИЧНИХ ПІДХОДІВ ДО ОПИСУ ЯВИЩ У КВАНТОВИХ ГАЗАХ

1.1. Термодинамічні властивості ідеальних бозе- та фермі-газів у відсутності зовнішніх полів

Особливості обраного напряму досліджень. Прояв квантових ефектів на макроскопічному рівні у XXI сторіччі сприймається вже в значній мірі буденно, хоча при детальному аналізі численні явища, без сумніву, продовжують визивати захват. До числа такого роду проявів у повній мірі можна віднести ефекти та явища у квантових рідинах і газах. Само по собі поняття «квантові гази», що означає квантові системи багатьох тотожних частинок у газовому агрегатному стані, в яких ефектом перекриття хвильових функцій окремих частинок не можна знехтувати, стало вже звичним за майже сторічну історію досліджень. Основним поштовхом до розвитку квантових газів виявились революційні роботи Бозе та Ейнштейна [53, 54], а також Фермі та Дірака [55, 56], у честь яких як наслідок було названо два основні різновиди статистичних розподілів частинок з урахуванням їх квантової природи.

Здавалося б, що за такий тривалий період такі прості системи, як квантовий ідеальний одноатомний газ за відсутності будь-яких неоднорідностей або зовнішніх полів, повинні були занадто детально досліджені з теоретичної точки зору. Однак, при аналізі наявної літератури, що навіть вважається в даний час навчальною та рекомендованою на курсах статистичної фізики (див., наприклад, [57–59], виникають питання, на які хотілося б мати більш певні відповіді.

Справді, аналітичні методи опису ефектів і явищ в ідеальних квантових газах істотно засновано на деяких додаткових еврістичних припущеннях
про особливості в поведінці їх вігнеровскіх функцій розподілу при низьких температурах. Особливості, пов'язані із залежністю статистики газів від спіну складених з них частинок, вже закладені в самому вигляді рівноважних функцій розподілу бозонів і ферміонів. З цієї причини, здавалося б, ніяких додаткових припущень і не потрібно. Потреба в таких припущеннях виникає через необхідність спрощень в аналітичних обчисленнях при описі фізичних явищ в квантових газах. Залучені припущення пов'язані з введенням деяких «реперних» температурних точок, пов'язаних з особливостями поведінки хімічних потенціалів (а отже, і функцій розподілу) газів бозонів і ферміонів при зниженні температури.

Для ідеального газу бозе-атомів такими точками в температурної залежності хімічного потенціалу (і функції розподілу!) є точка фазового переходу до стану з бозе конденсатом. Залучаються припущення, що дозволяють прийти до висновку, що в точці переходу хімічний потенціал повинен звертатися в нуль і залишатися рівним нулю при подальшому зниженні температури аж до абсолютного нуля. При цьому у функції розподілу бозонів в точці переходу з'являється складова, яка характеризує зародження компоненти газу з макроскопічно великою кількістю частинок (бозе-ейнштейнівської конденсатом, БЕК) в одному квантово-механічному стані, який визначається найнижчим енергетичним рівнем системи. Математично бозе-конденсатна складова в функції розподілу описується узагальненою функцією — дельта-функцією Дірака з аргументом, що характеризує найнижчий енергетичний стан газу бозонів. За нульової температури всі частинки газу повинні перебувати в стані бозеконденсату. Таким чином, і вся функція розподілу бозе-газу в цих умовах стає дельта-образною з тим же аргументом.

Для ідеального газу фермі-атомів особливою точкою на шкалі температур є лише абсолютний нуль. Однак, з метою введення фізично значущого масштабу енергій, зручною характеристикою для температури виродження в енергетичних одиницях є енергія Фермі – енергія найвищого заселення одночастинкового стану системи (або, що еквівалентно, мінімальна енергія по додаванню однієї додаткової частинки до газу із заданою густиною) при нульовій температурі. Вважається, що при зниженні температури і наближенні її значення до енергії Фермі повинні проявлятися квантові властивості газу ферміонів. За нульової температури фермієвська функція розподілу повинна мати вигляд «сходинки» — узагальненої функції, яка носить назву одиничної функції Гевісайда. Аргумент цієї функції визначається таким чином, щоб енергія будь-якої фермічастинки газу при нульовій температурі не перевищувала енергію Фермі.

Аналітичні розрахунки, пов'язані з описом явищ в ідеальних бозе- і фермі-газах, можливі і проводяться тільки в рамках теорії збурень. Теорія збурень будується на фоні основного стану, яким вважаються зазначені вище стани з мінімальною енергією. Саме для можливості формулювання теорії збурень і залучаються викладені вище міркування, засновані на зв'язку спина частинок і статистики систем, структурними одиницями яких ці частинки є. Відзначимо, що висновки, зроблені на основі цих міркувань, нетривіальні і неочевидні. Описана поведінка в області «квантовості» бозе- і фермі-газів їх вігнеровскіх функцій розподілу безпосередньо, в явному вигляді цих функцій, не проглядається, і з цієї причини є саме евристичним, що потребують підтвердження отриманим результатом. Хоча, як уже підкреслювалося вище, було зрозуміло, що така поведінка, якщо присутня, має бути обов'язково закладена в явному вигляді фермі- і бозе-функцій розподілу. Такий стан справ повинен мати місце хоча б тому, що всі властивості, що стосуються зв'язку спіну частинок і статистики систем багатьох частинок, використано при отриманні виразів для функцій розподілу. Однак було також ясно, що знайти прямі ознаки трансформації «звичного» виду фермі- і бозе-функцій розподілу при зниженні температури до виду, який містить перераховані вище ознаки, можна тільки поза рамками традиційно використовуваних теорій обурення, із залученням чисельних методів.

Поза рамками теорії збурень знаходиться прояснення і більш фізичного

аспекту опису поведінки квантових газів при зниженні температури. Йдеться про саме поняття «квантовості» фермі- або бозе-газу. Вище вже зазначалося, що гази потрібно вважати квантовими поблизу характерних температур: температури бозе-конденсації для бозе-газів і температури виродження для фермігазів. Але наскільки «поблизу»? При якій температурі класичний газ «стає» квантовим з точки зору спостерігача, у якого є можливості вимірювати макроскопічні характеристики газу з заданою точністю? Один з варіантів якісного відповіді на таке питання можна знайти в Нобелівській лекції В. Кеттерле [60]. Там пропонується оцінка даної температури з умови, щоб теплова хвиля де Бройля частинок була близька до середньої відстані між частинками газу. Тоді за сталої густини газу і послідовному зниженні температури хвильові функції частинок з вказаною довжиною хвилі зазнають дедалі більшого перекриття. Остання обставина призводить до поведінки, пов'язаної з квантовими ефектами обмінної взаємодії, внаслідок чого гази стають «все більш і більш» квантовими. Вочевидь, такий аналіз є досить вдалою ілюстрацією основоположних фізичних механізмів, проте не претендує на точні кількісні оцінки.

Викладені вище аргументи, що ілюструють причини незадоволеності обґрунтуванням використовуваних аналітичних методів опису рівноважних станів квантових газів, які можна вважати ідеальними, є мотивацією до цього підрозділу. Далі приводяться розрахунки (в основному із залученням чисельних методів), що дозволяють прояснити і поліпшити розуміння викладених вище аспектів опису рівноважних квантових бозе- і фермі-газів. Основні зусилля спрямовані на встановлення кількісних оцінок фізичних характеристик досліджуваних систем. Для встановлення границь застосовності теорій збурень, традиційно використовуваних при аналітичному описі квантових газів, близьких до ідеальних, нами вирішене більш глобальне завдання визначення їх хімічних потенціалів на всьому інтервалі температур. Рішення даного завдання є важливим з точки зору можливості застосувань в ряді досліджень в області ультрахолодних квантових газів. Зокрема, отримані результати будуть використані при вивченні взаємодії квантових газів в області виродження з електромагнітними хвилями.

Визначення залежності хімічного потенціалу від температури. Будемо розглядати ідеальні одноатомні гази, які описуються добре відомими розподілами середнього числа частинок по квантовим станам з енергією ε

$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/T} \pm 1},$$
(1.1)

де знаки «—» та «+» вказують на статистики Бозе-Ейнштейна (BE) і Фермі-Дірака (FD), відповідно, а хімічні потенціали μ частинок газу в загальному випадку є функціями температури T, яка для простоти опису тут і надалі записана в енергетичних одиницях ($k_B = 1$).

Таким чином, рівняння для визначення хімічного потенціалу як функції температури може бути отримано з формули для повного числа N частинок газу, що визначається інтегруванням (1.1) по фазовому простору,

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{e^{(\varepsilon - \mu)/T} \pm 1},$$
 (1.2)

де g – кратність виродження енергетичних станів частинок газу по іншим (внутрішнім) ступенями свободи, V – об'єм системи в координатному просторі. У подальшому аналізі ми обмежимося стандартною залежністю енергії від імпульсу, яка відповідає закону дисперсії для нерелятивістського одноатомного ідеального газу, $\varepsilon(p) = p^2/2m$, де m – маса частинок. Відзначимо однак, що всі нижченаведені розрахунки можна без особливих складнощів узагальнити і на випадок газів частинок з іншими законами дисперсії, в тому числі на ультрахолодні гази атомів або молекул в зовнішніх гармонічних потенціалах, обумовлених наявністю утримуючих магнітооптичних пасток у відповідних експериментах.

Для зручності проведення чисельних розрахунків і їх порівняння з ана-

літичними формулами введемо характерні масштаби енергій, що дозволяють зняти фізичні розмірності з основних величин. Для бозе-газу із заданою густиною n = N/V величиною розмірності енергії, що має наочний фізичний зміст, є температура бозе-конденсації (температура в енергетичних одиницях, при якій хімічний потенціал стає рівним енергії нижчого енергетичного стану, що відповідає умові $\mu_{\rm BE} = 0$ в даному випадку),

$$T_0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{4\pi^2 \hbar^3 n}{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)g} \right)^{2/3}.$$
 (1.3)

Для газу ферміонів такою величиною є енергія (або температура) Фермі – енергія найвищого заселеного стану системи при нульовій температурі ($\mu_{\rm FD} = \varepsilon_{\rm F}$ при T = 0),

$$T_{\rm F} = \frac{1}{2m} \left(\frac{6\pi^2 \hbar^3 n}{g} \right)^{2/3}.$$
 (1.4)

Переходячи тепер до безрозмірних величин, інтеграл в правій частині (1.2) можна представити у вигляді:

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{-\nu/t} e^x \pm 1} = a_{\pm} t^{-3/2},$$
(1.5)

де $t = T/T_0$, $\nu = \mu/T_0$, та $a_- = \Gamma(3/2)\zeta(3/2)$ у випадку бозе-газу; для фермігазу $t = T/T_{\rm F}, \, \nu = \mu/T_{\rm F}$, та $a_+ = 2/3$.

Таким чином, визначення хімічного потенціалу як функції температури при фіксованій густині частинок зводиться до вирішення параметричного рівняння (1.5) в інтегральної формі для функції $\nu(t)$ в залежності від безрозмірного параметра t. При цьому необхідно переконатися у відповідності отриманих результатів умовам $\nu_{\rm BE}(t \leq 1) = 0$ для бозонів і $\nu_{\rm FD}(0) = 1$ для ферміонів. Як вже зазначалося вище, дані умови з'являються як необхідні для визначення основного стану системи з метою розвитку теорії збурень для опису термодинаміки квантових газів. Відзначимо, що якщо скористатися інтегральним поданням полілогарифмічної функції

$$\operatorname{Li}_{s}(z) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^{k}}{k^{s}} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{s-1} dx}{z^{-1} e^{x} - 1},$$
(1.6)

рівняння (1.5) може бути приведене до виду:

$$\Gamma(3/2) \operatorname{Li}_{3/2}[\mp \exp(\nu/t)] = \mp a_{\pm} t^{-3/2}, \qquad (1.7)$$

що є альтернативною формою запису (1.5) у вигляді алгебраїчного рівняння, що містить нескінченний ряд. У контексті цієї роботи даний запис є менш зручним з точки зору чисельного визначення хімічних потенціалів, однак може бути ефективно використаний в ряді наближень у порівнянні з більш відомою інтегральною формою запису (в тому числі, при отриманні загальних виразів для термодинамічних характеристик газів).

Інтеграл в лівій частині рівняння (1.5) може бути оцінений в так званому «класичному наближенні» [57], що при використанні безрозмірних змінних призводить до наступних виразів в нульовому і першому порядках теорії збурень по малому параметру $e^{\nu/t} \ll 1$:

$$\nu^{(0)} = t \ln(b_{\pm} t^{-3/2}),$$

$$\nu^{(1)} = \nu^{(0)} + t \ln[1 \pm b_{\pm}(2t)^{-3/2}],$$
(1.8)

де $b_{\pm} = a_{\pm}/\Gamma(3/2)$. Вочевидь, дане розкладання може бути коректно використане тільки в області високих температур, $t \gg 1$, де хімічні потенціали і бозонів, і ферміонів негативні. В області ж $t \sim 1$ (характерній для прояву ефектів квантового виродження), теорія збурень стає непридатною. Однак в цій області інтеграли, що входять в (1.5), можуть бути оцінені кількісно з необхідною точністю. Ця обставина дає можливість визначити залежності хімічних потенціалів



Рис. 1.1. Залежності хімічних потенціалів ідеальних газів від температури для бозонів (ліворуч) і ферміонів (праворуч). Пунктирними лініями позначені приблизні аналітичні рішення.

від температури методом послідовних наближень із залученням добре відомих алгоритмів пошуку коренів рівнянь. Результати даних обчислень представлені на рис. 1.1

Слід відзначити, що на представлених залежностях для ідеального газу ферміонів додатково наведено низькотемпературне наближення, яке може бути отримане відповідно до [57] з формули (1.5) за умови $\nu/t \gg 1$,

$$\nu_l^{(1)} = 1 - \frac{\pi^2}{12} t^2. \tag{1.9}$$

Важливо також, що крім точки T = 0, де хімічний потенціал фермі-газу точно визначений і дорівнює енергії Фермі ($\nu_{\rm FD}(t=0) = 1$ в безрозмірних змінних), є ще одна точка, положення якої може бути визначене точно. Це температура, при якій хімічний потенціал фермі-газу дорівнює нулю. Помічаючи що $\int_0^\infty \sqrt{z} dz/(e^z+1) = (1-1/\sqrt{2})\Gamma(3/2)\zeta(3/2)$, відповідно до рівняння (1.5) можна записати

$$t(\nu_{\rm FD} = 0) = \left[\frac{4/(1 - 1/\sqrt{2})}{3\sqrt{\pi}\zeta(3/2)}\right]^{2/3} \approx 0.989, \qquad (1.10)$$

що з високою точністю узгоджується з результатом чисельних розрахунків, представлених на рис. 1.1 і помітно відхиляється від результатів розрахунків на основі аналітичних наближень (1.8) та (1.9).

Таким чином видно, що отримані за допомогою чисельних методів залежності хімічних потенціалів від температури дозволяють більш детально дослідити ряд термодинамічних характеристик ідеальних газів в широкому діапазоні температур без залучення додаткових наближень. Дана обставина дає також можливість безпосередньо продемонструвати деформації залежностей функцій розподілу по енергіях частинок на інтервалі температур, де ці функції зазнають найбільш суттєві якісні та кількісні зміни. На рис. 1.2 представлені залежності для середніх чисел заповнення енергетичних станів (функції розподілу) ідеальних бозе- і фермі-газів при послідовному зниженні температури в області прояву ефектів квантового виродження газів.

Поліноміальне наближення для хімічних потенціалів. З викладеного вище аналізу, в області квантового виродження $(t \sim 1)$ хімічні потенціали, визначені точно за допомогою чисельних методів, істотно відрізняються від наближених значень, отриманих в рамках високотемпературних наближень, як у випадку бозе- так і фермі- газів. У зв'язку з цим виникає питання більш точного встановлення меж застосовності високотемпературних наближень. Крім того, з точки зору застосування отриманих тут результатів при подальших дослідженнях з'являється необхідність розвитку альтернативних наближень, які були б більш точними в даній області, проте зберігали простоту опису.

Так як хімічні потенціали бозонів і ферміонів в зазначених областях є досить гладкими функціями температури, обгрунтованим наближенням можна вважати моделювання згаданих залежностей поліномами. Відзначимо, що в якості альтернативи можна використовувати апроксиманти Паде [61], або інші наближення для пов'язаних фізичних величин, наприклад, для фугітівності $\mathcal{F} \propto \exp(\mu/T)$. Однак, як ми побачимо далі, використання традиційних кінцевих степеневих рядів забезпечує необхідну простоту, достатню компактність і



Рис. 1.2. Зміни функцій розподілу ідеальних газів, що описуються статистиками Бозе-Ейнштейна (ліворуч) і Фермі-Дірака (праворуч), з пониженням температури. У випадку бозе-газу нижче температури БЕК ($T \leq T_0$) середня заселеність стану з $\varepsilon = 0$ стає нескінченною в термодинамічній границі та умовно позначена стрілкою. Величина кроку вздовж горизонтальних осей (ширина смуг) обрана рівною 1/40.

точність опису.

З огляду на викладену вище аргументацію і отримані результати, в разі статистики Бозе-Ейнштейна безрозмірний хімічний потенціал можна записати у вигляді:

$$\nu_{\rm BE}(t) \approx \begin{cases} 0, & t \le 1; \\ \sum_{k=1}^{r} a_k (t-1)^k, & 1 \le t \le t^*; \\ \nu^{(1)}(t), & t \ge t^*. \end{cases}$$
(1.11)

Для ідеального газу ферміонів безрозмірний хімічний потенціал може бути промодельований виразом

$$\nu_{\rm FD}(t) \approx \begin{cases} 1 + \sum_{k=1}^{r} a_k t^k, & 0 \le t \le t^*; \\ \nu^{(1)}(t), & t \ge t^*. \end{cases}$$
(1.12)

В останніх формулах введена в розгляд величина t^* , що визначає температуру, вище якої можна користуватися «квазікласичним» наближенням, що враховує тільки лінійні квантові поправки, задані формулою (1.8).

Надалі основним завданням є визначення найбільш оптимального набору параметрів (найменш необхідна їх кількість з метою відтворення значень із заданою точністю) для опису хімічних потенціалів газів. Безпосередні розрахунки параметрів вимагають фіксування меж необхідної точності. З метою такого фіксування виберемо похибку у вимірюванні густини частинок на рівні $\Delta n/n = 1\%$, що є типовим значенням в умовах сучасних експериментів для ультрахолодних газів.

В межах заданої точності чисельно обраховано усі параметри (див. таблицю 1.1), що входять в аналітичні вирази (1.11) та (1.12). Також пораховані значення величини t^* і температури t^{**} , що характеризує границю, вище якої вплив ефектів обмінної взаємодії стає дуже незначним для заданої точності

Параметр	$\Delta n/n$	r	a_1	a_2	a_3	a_4	t^*	t^{**}
Бозе-газ	< 0.01	4	-0.016	-1.064	0.299	-0.043	3.68	20.7
Фермі-газ	< 0.01	4	0.016	-0.957	-0.293	0.209	1.36	8.82

Таблиця 1.1. Чисельні значення параметрів, що входять у поліноміальні наближення (1.11) та (1.12) для зазначеної похибки вимірювань $\Delta n/n$.

вимірювань, внаслідок чого може бути використано класичне наближення $\nu = \nu^{(0)}$, див. (1.8).

Вплив обмінної взаємодії на рівняння стану і термодинамічні характеристики ідеальних газів. Отримані залежності для хімічних потенціалів дозволяють більш точно описати ряд властивостей і фізичних ефектів в області квантового виродження газів. Покажемо це перш за все на найбільш яскравому і простому прикладі – рівнянні стану ідеальних газів. Відповідно до [57,59], а також вводячи змінну $z = \pm \exp[\nu(t)/t]$ (тут і надалі дуальні знаки «+» і «-» відносяться до статистик Бозе-Ейнштейна і Фермі-Дірака, відповідно), можна записати рівняння стану у вигляді

$$P = n'T \cdot \text{Li}_{5/2}(z) / \text{Li}_{3/2}(z), \qquad (1.13)$$

де функції Li_s(z) даються визначенням (1.6), а густина $n' \equiv n_{\varepsilon>0}$ збігається з густиною всіх частинок газу *n* в усіх випадках за винятком бозе-газу з виділеним конденсатом при $T < T_0$. В останньому випадку необхідно враховувати, що $n' = n - n_0 = n \cdot (T/T_0)^{3/2}$. Таким чином видно, що залежності хімічних потенціалів $\nu(t)$ від температури повністю визначають рівняння стану ідеальних газів при фіксованій густині *n* частинок газу.

Відзначимо, що в разі бозе-газу нижче температури БЕК ($T < T_0$) відхилення від класичного рівняння Менделєєва-Клапейрона $P_{\rm cl} = nT$ може



Рис. 1.3. Залежності тиску (верхній ряд) і теплоємності $(C_V \propto (\partial P/\partial T)_n,$ нижній ряд) ідеальних квантових газів від температури. Пунктирними лініями позначені залежності для класичного ідеального газу.

бути проаналізовано і аналітично: так як $\nu_{\rm BE}(t \le 1) = 0$, то

$$P_{\rm BE}(t \le 1) = nT \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} t^{3/2} \approx 0.5135 \cdot t^{3/2} nT.$$
(1.14)

У разі ж фермі-газу добре відомий вираз для так званого тиску Фермі – тиску ідеального фермі-газу при нульовій температурі, $P_0 = \frac{2}{5}n\varepsilon_{\rm F}$, а також низькотемпературне розкладання при $t \ll 1$ (див., наприклад, [57])

$$P_{l,\text{FD}}^{(1)} = P_0 \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} t^2 \right). \tag{1.15}$$

З рис. 1.3 видно, що чисельні розрахунки повністю відтворюють асимптотичну поведінку тиску газів поблизу зазначених меж. Однак в нашому розпорядженні є тепер уточнені вирази для хімічних потенціалів як функцій температури, внаслідок чого є можливість досліджувати рівняння стану на всьому інтервалі температур. Це дозволяє спостерігати яскравий прояв впливу обмінної взаємодії – фермі-статистика призводить до збільшення тиску, тобто характеризує ефективне відштовхування (*anti-bunching*), обумовлене принципом заборони Паулі; бозе-статистика, навпаки, проявляється в ефективному тяжінні (*bunching*) між тотожними частинками, що призводить до зниження тиску в порівнянні з класичним газом.

Як відомо, термодинамічні потенціали (і, зокрема, внутрішня енергія $E = \frac{3}{2}PV$) ідеальних квантових газів є безперервними функціями температури без будь-яких точок особливостей. У той же час вплив відмінності статистик вже відображається на перших похідних від термодинамічних потенціалів. Для демонстрації цієї обставини на рис. 1.3 ми представили також залежності теплоємностей $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_n = \frac{3}{2}V \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_n$ від температури. З порівняння даних графіків видно, що для бозе-газу з'являється особлива точка при $T = T_0$, де теплоємність скінчена і неперервна, однак її похідна $\partial C_V / \partial T$ (і, отже, dpyza похідна від термодинамічної потенціалу E) претерпевает разрыв) зазнає розрив, що сигналізує про наявність фазового переходу dpyzozo роду в такій системі. В ідеальному газі ферміонів, навпаки, відсутні будь-які фазові переходи при ненульових температурах, що і підтверджується відсутністю будь- яких особливостей на представлених графіках.

Відзначимо, що для загального виразу для теплоємності квантових газів можна отримати компактну форму запису для обох квантових статистик на всьому інтервалі температур, якщо використовувати рекурентні співвідношення для інтегралів $\text{Li}_s(z)$, $\partial \text{Li}_s(z)/\partial z = \text{Li}_{s-1}(z)/z$ (див. також [59]) і узагальнити отримані результати,

$$C_V = \left[\frac{15}{4} \frac{\text{Li}_{5/2}(z)}{\text{Li}_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{\text{Li}_{3/2}(z)}{\text{Li}_{1/2}(z)}\right] n'V.$$
(1.16)

Легко побачити тепер, що в разі бозе-газу нижче температури конденсації останній вираз може бути істотно спрощено. Справді, в зв'язку з нескінченністю інтеграла Li_{1/2}(1) = ∞ другий член в дужках не дає вкладу в теплоємність, а перший доданок не залежить від температури, так як звертається у відношення дзета-функцій, що і призводить до результату $C_{V,\text{BE}}(t \leq 1) = \frac{15}{4}Nt^{3/2}\zeta(5/2)/\zeta(3/2)$. Цей результат може бути отриманий також прямим диференціюванням виразу (1.14) і узгоджується з залежностями, представленими на рис. 1.3. Для газу ферміонів можна помітити, що в низькотемпературній границі теплоємність зростає лінійно з температурою, $C_{V,\text{FD}}(t \rightarrow 0) \rightarrow \pi^2 t/2$. Крім цього, легко переконатися, що за високих температур lim_{$z\rightarrow0$}[Li_s(z)/Li_{s-1}(z)] = 1, а, отже, теплоємність наближується до класичного значення 3N/2, що підтверджується також результатами, представленими на згаданих графіках.

На останок проаналізуємо поведінку стисливості та ентропії квантових газів в областях їх квантового виродження. Використовуючи співвідношення $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T$, а також формулу (1.7) зі згаданим рекурентним співвідношенням при диференціюванні полілогарифмів, можна отримати загальний вираз для ізотермічної стисливості

$$\kappa_T = \frac{1}{nT} \frac{\text{Li}_{1/2}(z)}{\text{Li}_{3/2}(z)}.$$
(1.17)

З цієї формули, а також з представлених на рис. 1.4 залежностей можна побачити, що для бозе-газу при $T \leq T_0$ ізотермічна стисливість стає нескінченною (іншими словами, має місце розбіжність в точці фазового переходу). Зауважимо, що ця обставина є наслідком відсутності залежності тиску газу від об'єму в фазі з БЕК, див. формулу (1.14). Для ідеального газу ферміонів, як і слід було очікувати, відсутні будь-які точки особливостей на всьому інтервалі температур, а в низькотемпературній границі $T \to 0$ стисливість є скінченою, $\kappa_T \to \frac{3}{2nT_{\rm F}}(1 - \pi^2 t^2/12)$. За високих температур відношення полілогарифмів наближується до одиниці, і ми отримуємо відомий вислів для стисливості класичного ідеального газу $\kappa_T = 1/nT = 1/P$.

З рівняння стану (1.13), а також зі співвідношення $E + PV - TS = \mu N$



Рис. 1.4. Залежності ізотермічної стисливості (верхній ряд), ентропії (середній ряд) та величини $\gamma = C_P/C_V = \kappa_T/\kappa_S$ (нижній ряд) ідеальних квантових газів від температури. Пунктирними лініями позначені залежності для класичного ідеального газу.

легко отримати загальний вираз, що визначає залежність ентропії газів від температури,

$$\frac{S}{N} = \frac{5}{2} \frac{n'}{n} \frac{\text{Li}_{5/2}(z)}{\text{Li}_{3/2}(z)} - \frac{\mu}{T}.$$
(1.18)

За високих температур відповідно до нульового наближення (1.8) для хімічного потенціалу μ дана формула переходить в класичний вираз $\frac{S_{cl}}{N} = \frac{5}{2} + \ln \left[\frac{g}{n} \left(\frac{2\pi mT}{h^2} \right)^{3/2} \right]$. При зниженні температури, що також можна помітити з рис. 1.4, внесок квантових поправок в ентропію стає все більш значним. У підсумку, в граничному випадку нульових температур ентропії газів монотонно зменшуються до нуля: $\frac{S}{N} = \frac{5}{2} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} t^{3/2}$ при $T \leq T_0$ та $\frac{S}{N} = \frac{\pi^2}{2} t$ при $T \ll T_F$ для бозе- і фермі-газів, відповідно. Даний результат повністю узгоджується (на відміну від класичного наближення) з третім законом термодинаміки.

Загальні залежності для ентропії від температури у вигляді (1.18) дозволяють проаналізувати рівняння адіабати ідеальних газів. Дійсно, розглядаючи адіабатичний процес (S/N = const), а також використовуючи той факт, що права частина рівняння (1.18) є функцією, що залежить тільки від співвідношення μ/T (або тільки від змінної t в фазі з БЕК), відповідно до формули (1.5) можна отримати рівняння t = const для такого процесу. Переходячи далі до змінних P і V за допомогою рівняння стану (1.13), отримаємо рівняння адіабати у «звичному» вигляді.

$$PV^{5/3} = \text{const.} \tag{1.19}$$

Як і слід було очікувати, це рівняння не залежить від типу квантової статистики, а також наявності або відсутності фази з БЕК в системі (що є логічним, з огляду на альтернативне визначення показника адіабати k через через кількість ступенів свободи частинок i, k = (i + 2)/i).

Підкреслимо, однак, що в загальному випадку показник адіабати для одноатомних ідеальних газів (k = 5/3) не можна ототожнювати з величиною $\gamma = C_P/C_V = \kappa_T/\kappa_S$. Справді, для цієї величини, використовуючи співвідношення $\gamma = (\partial z/\partial T)_P/(\partial z/\partial T)_n$ та рівняння (1.13), можна отримати такий вираз (див. також [59]):

$$\gamma = \frac{5}{3} \frac{\text{Li}_{5/2}(z) \,\text{Li}_{1/2}(z)}{[\text{Li}_{3/2}(z)]^2}.$$
(1.20)

З цього рівняння, а також з представлених на рис. 1.4 температурних залежностей видно, що «звична» асоціація γ з показником адіабати справедлива лише за високих температур (іншими словами, для класичного газу). Урахування ж квантової статистики частинок призводить до того, що для ідеального бозегазу завжди справедлива нерівність $\gamma > 5/3$, причому $\gamma(T \leq T_0) = \infty$, що також пов'язано з нескінченною теплоємністю C_P (на відміну від C_V) нижче точки фазового переходу. Для ідеального газу ферміонів, навпаки, завжди справедливе співвідношення $\gamma < 5/3$, причому в границі низьких температур $\gamma_l^{(1)} = 1 + \pi^2 t^2/3$.

1.2. Лінійна теорія відгуку ідеальних бозе-газів на зовнішнє електромагнітне збурення

Метод вторинного квантування за присутності зв'язаних станів частинок. Атоми лужних металів є досить вивченими об'єктами, зручними як з точки зору теоретичного опису, так і з точки зору відомих експериментальних даних про них. Саме завдяки цій обставині вдалося розробити нові експериментальні методики захоплення і лазерного охолодження парів лужних металів до температур, характерних для режиму бозе-ейнштейнівської конденсації (див., наприклад, [62, 63]). Як відомо, внутрішні електронні оболонки таких атомів є повністю замкнутими, тому електрони цих оболонок практично не беруть участь в ефектах взаємодії атомів з зовнішніми полями, якщо характерна енергія взаємодії атома з зовнішнім полем багато менше енергії іонізації даного атома. У зв'язку з цим атоми лужних металів (з якими і проводяться експерименти з отримання атомарного БЕК) з хорошою точністю можуть бути розглянуті як зв'язані стани (бозони) протилежно заряджених ферміонів двох різних сортів. А саме, ферміоном одного сорту в таких зв'язаних станах можна вважати атомне ядро з електронами внутрішніх оболонок (так званий, «атомний остів»), а ферміоном іншого сорту – зовнішній (валентний) електрон. З цим і пов'язана можливість опису атомів лужних металів як воднеподібних атомів.

Для систем багатьох частинок, що складаються з двох сортів протилежно

заряджених ферміонів і їх зв'язаних станів, розроблено наближене формулювання методу вторинного квантування [64]. Коректна побудова такого формулювання можлива в разі малості середньої кінетичної енергії всіх часток, що складають систему, в порівнянні з енергією зв'язаних станів частинок. Оскільки представлені тут дослідження пов'язані з вивченням окремих явищ і ефектів в парах лужних металів при наднизьких температурах, згадане формулювання методу вторинного квантування при наявності зв'язаних станів частинок є зручним з точки зору досягнення поставлених в дисертації мети і завдань. Нижче наводяться основні положення методу вторинного квантування для системи, що складається з двох сортів протилежно заряджених ферміонів при наявності їх зв'язаних станів – воднеподібних атомів. Одним з основних завдань формулювання такого методу є коректне введення операторів народження і знищення для зв'язаного стану двох ферміонів (атома) як цілісного об'єкта зі збереженням інформації про його квантові стани.

При цьому, в [64] в якості вихідних використовувалися наступні припущення. Нехай є система багатьох частинок, що складається з протилежно заряджених ферміонів двох різних сортів з масами m_1, m_2 і зарядами e_1, e_2 . Такі ферміони можуть утворювати зв'язаний стан – воднеподібний атом. Оператори знищення $\hat{\psi}_1$ і $\hat{\psi}_2$ цих ферміонів в точці **х** визначаються звичайним чином (див., наприклад, [65]):

$$\hat{\psi}_1(\mathbf{x})|0
angle=\hat{\psi}_2(\mathbf{x})|0
angle=0,$$

де $|0\rangle$ – вектор вакуумного стану. Тоді вектори станів

$$|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m\rangle = \hat{\psi}_1^{\dagger}(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}_1^{\dagger}(\mathbf{x}_n) \hat{\psi}_2^{\dagger}(\mathbf{y}_1) \cdots \hat{\psi}_2^{\dagger}(\mathbf{y}_m) |0\rangle, \qquad (1.21)$$

(n, m = 0, 1, 2, ...) утворюють базис в просторі H квантовомеханічною системи багатьох частинок. У цих станах частинки знаходяться в певних точках $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n; \mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_m \in R$ координатного простору. Вектори станів (1.21) задовольняють добре відомим умовам ортонормування і повноти.

Зв'язані стани ферміонів описуються хвильовою функцією

$$\varphi_{\alpha}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}) = \varphi_{\alpha}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}), \quad \mathbf{X} = \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad (1.22)$$

де **х** – координата, *α* – набір квантових чисел зв'язаного стану (атома). Слід підкреслити, що тут і нижче передбачається, що зв'язані стани можуть бути утворені фермионами тільки двох різних сортів. Відповідний вектор стану має вигляд:

$$|\alpha, \mathbf{x}\rangle = \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \varphi_\alpha(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}) \hat{\psi}_1^{\dagger}(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_2^{\dagger}(\mathbf{x}_2) |0\rangle.$$

Тому оператор

$$\hat{\varphi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \varphi_{\alpha}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}) \hat{\psi}_1^{\dagger}(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_2^{\dagger}(\mathbf{x}_2)$$
(1.23)

можна вважати оператором народження зв'язаного стану (атома),

$$\hat{\varphi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})|0\rangle = |\alpha, \mathbf{x}\rangle, \quad \hat{\varphi}_{\alpha}(\mathbf{x})|0\rangle = 0.$$

Якщо атом має певний імпульс, то його вектор стану записується у вигляді:

$$|\alpha,\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \varphi_\alpha(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) e^{i\mathbf{p}\mathbf{X}} \hat{\psi}_1^{\dagger}(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_2^{\dagger}(\mathbf{x}_2) |0\rangle,$$

де \mathcal{V} – об'єм системи. Відповідний оператор народження атома в стані з імпульсом **р** визначається виразом:

$$|\alpha, \mathbf{p}\rangle = \hat{\varphi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{p})|0\rangle, \quad \hat{\varphi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\varphi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}}.$$

Враховуючи, що $\int d\mathbf{y}_1 \varphi_{\alpha}^* (\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2) \varphi_{\beta} (\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2) = \delta_{\alpha\beta}$, та використовуючи

комутаційні співвідношення для операторів народження і знищення ферміонів, $\{\hat{\psi}_i(\mathbf{x}), \hat{\psi}_j^{\dagger}(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta_{ij}$, де δ_{ij} – символ Кронекера (i, j = 1, 2), легко прийти до наступних комутаційних співвідношень для операторів $\hat{\varphi}_{\alpha}(\mathbf{x})$ та $\hat{\varphi}_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{x}')$:

$$[\hat{\varphi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{x}')] = \delta_{\alpha\alpha'}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \hat{\xi}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad [\hat{\varphi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}_{\alpha'}(\mathbf{x}')] = 0, \quad (1.24)$$

де

$$\begin{split} \hat{\xi}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x},\mathbf{x}') &= \int d\mathbf{y} d\mathbf{y}' \varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{y}) \varphi_{\alpha'}(\mathbf{y}') \times \\ &\times \left\{ \hat{\psi}_{1}^{\dagger}(\mathbf{x}+\tilde{m}_{2}\mathbf{y}) \hat{\psi}_{1}(\mathbf{x}'+\tilde{m}_{2}\mathbf{y}') \delta\left[\mathbf{y}-\mathbf{y}'-\tilde{m}_{1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right] + \\ &+ \hat{\psi}_{2}^{\dagger}(\mathbf{x}'-\tilde{m}_{1}\mathbf{y}') \hat{\psi}_{2}(\mathbf{x}-\tilde{m}_{1}\mathbf{y}) \delta\left[\mathbf{y}-\mathbf{y}'+\tilde{m}_{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right] \right\}, \end{split}$$

 $\tilde{m}_i = m_i/m, \ m = m_1 + m_2$ – маса атому. Легко переконатися, що $\hat{\xi}_{\alpha\alpha'}|0
angle = 0.$ Вектори

$$|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_l\rangle = \prod_{i=1}^n \hat{\psi}_1^{\dagger}(\mathbf{x}_i) \prod_{j=1}^m \hat{\psi}_2^{\dagger}(\mathbf{y}_j) \prod_{k=1}^l \hat{\varphi}_{\alpha_k}^{\dagger}(\mathbf{z}_k) |0\rangle \quad (1.25)$$

мають наочний фізичний зміст при виконанні наступних умов:

$$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \gtrsim a,\tag{1.26}$$

де $\mathbf{r}_i \in {\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i\}}, a \gg r_0, r_0$ – радіус зв'язаного стану, а значення параметра aобговорюється нижче. Саме при виконанні умов (1.26) можна перейти до допоміжного простору Гілберта з відповідною заміною $\hat{\varphi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{z}) \rightarrow \hat{\eta}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{z})$, де оператори народження $\hat{\eta}^{\dagger}_{\alpha}$ та знищення $\hat{\eta}_{\alpha}$ атомів вже відповідають стандартним бозевським комутаційним співвідношенням, але уся інформація про внутрішні ступені вільності атомів зберігається (див. детальніше у [64]).

Наведене формулювання метода вторинного квантування є наближеним й

може застосовуватися лише в тому випадку, коли для величини *a* (див. (1.26)) є справедливим співвідношення

$$r_0 \ll a \ll \lambda_{\rm dB},\tag{1.27}$$

де $\lambda_{\rm dB} = \hbar/\sqrt{2m\varepsilon}$ – довжина хвилі де-Бройля (ε – середня кінетична енергія частинок). Як можна помітити, умови (1.27) для параметра *a* можуть бути легко задоволені в разі розгляду розріджених парів атомів лужних металів при температурах, близьких до режиму БЕК. Дійсно, характерні значення для радіуса атомів лужних металів порядку декількох ангстрем, $r_0 \sim 10^{-8}$ см, в той час як теплова довжина хвилі де-Бройля атомів (при температурі переходу до стану з БЕК, $T \sim 100$ нК, див. [66,67]) порядку міжчастинкової відстані, яка для досліджуваних парів має значення порядку декількох мікрон, $\lambda_{\rm dB} \sim 10^{-4}$ см. Таким чином, розроблене в роботі [64] наближене формулювання методу вторинного квантування може бути застосованим в рамках мікроскопічної теорії відгуку газів атомів лужних металів в стані БЕК на збурення зовнішнім електромагнітним полем [2].

Формалізм функцій Гріна для ідеальних газів бозе-атомів. При вивченні відгуку ідеального газу бозе-атомів на збудження зовнішнім електромагнітним полем будемо слідувати методиці, викладеної в [68]. Нехай система з гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int}$ в початковий момент часу знаходиться в стані статистичної рівноваги, який описується рівноважним розподілом Гіббза,

$$w = \exp\left[\Omega - \beta \left(\hat{\mathcal{H}} - \mu_1 \hat{N}_1 - \mu_2 \hat{N}_2\right)\right], \qquad (1.28)$$

де $\beta = 1/T$ – зворотня температура, \hat{N}_1 і \hat{N}_2 – оператори повного числа ферміонів в системі першого і другого сорту (враховуючи їх наявність у

зв'язаних станах), відповідно, а μ_1 і μ_2 – їх хімічні потенціали,

$$\hat{N}_1 = \int d\mathbf{x} \hat{\rho}_1(\mathbf{x}), \quad \hat{N}_2 = \int d\mathbf{x} \hat{\rho}_2(\mathbf{x}).$$
(1.29)

Термодинамічні параметри β , μ_1 і μ_2 знаходяться з співвідношень

$$\operatorname{Tr} w \hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}, \quad \operatorname{Tr} w \hat{N}_1 = N_1, \quad \operatorname{Tr} w \hat{N}_2 = N_2, \tag{1.30}$$

а залежність термодинамічної потенціалу Ω від термодинамічних параметрів визначається рівнянням Tr w = 1.

В деякий момент часу τ_0 включається зовнішнє поле, і до гамільтоніану системи додається оператор $\hat{V}(t)$, що описує взаємодію системи з полем,

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}} + \hat{V}(t). \tag{1.31}$$

Наступна задача полягає у знаходженні статистичного оператора $\rho(t)$ при $t > \tau_0$. Враховуючи, що $\rho(t)$ задовольняє рівнянню Ліувілля, $i\frac{\partial\rho}{\partial t} = [\hat{\mathcal{H}}(t), \rho]$, для статистичного оператора $\tilde{\rho}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\rho e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}$, можна отримати наступне рівняння еволюції [68]:

$$i\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} = [\tilde{\hat{V}}(t), \tilde{\rho}(t)], \quad \tilde{\hat{V}}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{V}(t)e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}.$$
(1.32)

Так як при $t \to -\infty$ зовнішнє поле було відсутнім, і система перебувала в стані статистичної рівноваги, то $\rho(-\infty) = w$, а оскільки $[w, \hat{\mathcal{H}}] = 0$, то і $\tilde{\rho}(-\infty) = w$. Це співвідношення розглядається як початкова умова при вирішенні рівняння (1.32). Завдяки цій обставині можна прийти до інтегрального рівняння

$$\tilde{\rho}(t) = w - i \int_{-\infty}^{t} dt' [\tilde{\hat{V}}(t'), \tilde{\rho}(t')], \qquad (1.33)$$

зручного для розвитку теорії збурень по слабкій взаємодії. У припущенні

малості взаємодії системи із зовнішнім полем рішення рівняння (1.33) слід шукати у вигляді:

$$\tilde{\rho}(t) = w + \tilde{\rho}_1(t). \tag{1.34}$$

Вважаючи гамильтониан взаємодії $\hat{V}(t)$ лінійним по зовнішньому полю,

$$\hat{V}(t) = \int d\mathbf{x} F_i(\mathbf{x}, t) \hat{\xi}_i(\mathbf{x}), \qquad (1.35)$$

та спираючись на (1.33)–(1.35), можна отримати такий вираз для лінійної поправки $\tilde{\rho}_1(t)$:

$$\tilde{\rho}_1(t) = -i \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{x}' F_i(\mathbf{x}', t') [\tilde{\hat{\xi}}_i(\mathbf{x}', t'), w].$$
(1.36)

У формулах (1.35) і (1.36) $F_i(\mathbf{x}, t)$ – величини, що визначають зовнішнє поле, а $\hat{\xi}_i(\mathbf{x})$ – квазілокальні оператори, що відносяться до даної системи. Оператор $\tilde{\xi}_i(\mathbf{x}, t)$ в (1.36) є квазілокальним оператором $\hat{\xi}_i(\mathbf{x})$ в гейзенбергівській картині,

$$\tilde{\hat{\xi}}_i(\mathbf{x},t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{\xi}_i(\mathbf{x})e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}.$$
(1.37)

У відповідності до формул (1.34)–(1.37) середнє значення довільного квазілокального оператора $\hat{a}(\mathbf{x})$ визначається виразом:

$$\operatorname{Tr} \rho(t)\hat{a}(\mathbf{x}) = \operatorname{Tr} w\hat{a}(\mathbf{x}) + i \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{x}' F_i(\mathbf{x}', t') \operatorname{Tr} w[\tilde{\hat{\xi}}_i(\mathbf{x}', t'), \tilde{\hat{a}}(\mathbf{x}, t)]. \quad (1.38)$$

Якщо ввести в розгляд для квазілокальних операторів $\hat{a}(\mathbf{x})$ і $\hat{b}(\mathbf{x})$ двочасову функцію Гріна,

$$G_{ab}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i\theta(t - t') \operatorname{Tr} w[\tilde{\hat{a}}(\mathbf{x}, t), \hat{b}(\mathbf{x}', t')], \qquad (1.39)$$

де $\theta(t)$ – функція Гевісайда, $\theta(t) = 1$ при t > 0 і $\theta(t) = 0$ при t < 0, і врахувати, що для трансляційно-інваріантних квазілокальних операторів $\hat{a}(\mathbf{x})$ і $\hat{b}(\mathbf{x})$ функція Гріна $G_{ab}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ буде залежати тільки від різностей t - t' і $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$,

$$G_{ab}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G_{ab}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t'), \qquad (1.40)$$

вираз (1.38) можна записати у наступному вигляді:

$$\operatorname{Tr} \rho(t)\hat{a}(\mathbf{x}) = \operatorname{Tr} w\hat{a}(0) + a^{F}(\mathbf{x}, t),$$
$$a^{F}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\mathbf{x}' G_{a\xi_{i}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') F_{i}(\mathbf{x}', t').$$
(1.41)

Для фур'є-образів величин a^F і F_i ,

$$a^{F}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{4}} \int d\mathbf{k} d\omega e^{-i(t\omega - \mathbf{k}\mathbf{x})} a^{F}(\mathbf{k},\omega),$$
$$F_{i}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{4}} \int d\mathbf{k} d\omega e^{-i(t\omega - \mathbf{k}\mathbf{x})} F_{i}(\mathbf{k},\omega),$$

можна отримати

$$a^{F}(\mathbf{k},\omega) = G_{a\xi_{i}}(\mathbf{k},\omega)F_{i}(\mathbf{k},\omega), \qquad (1.42)$$

де

$$G_{a\xi_i}(\mathbf{k},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{x} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})} G_{a\xi_i}(\mathbf{x},t).$$
(1.43)

Слід зазначити, що в термінах фур'є-образів введених величин може бути визначено і кількість енергії, передану полем речовині. Якщо припустити, що поле діє лише протягом певного часового проміжку, загальна кількість енергії Q, отримана речовиною від поля, дається виразом (див. також [68]):

$$Q = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int d\mathbf{k} \omega F_i(-\mathbf{k}, -\omega) G_{\xi_i \xi_j}(\mathbf{k}, \omega) F_j(\mathbf{k}, \omega).$$
(1.44)

Тепер перейдемо до вивчення відгуку більш конкретної системи, що складається з воднеподібних атомів, на збуджуючий вплив зовнішнім слабким електромагнітним полем. Щоб використовувати безпосередньо методику функцій Гріна, викладену вище (див. (1.28) –(1.44)), гамільтоніан системи зручно представити у вигляді

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}} + \hat{V}^{(e)}(t), \quad \hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}, \qquad (1.45)$$

де $\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_{\rm ph} + \hat{\mathcal{H}}_{\rm p}$ – гамільтоніан вільних частинок, фотонів і атомів, а гамільтоніан \hat{V} визначається виразом $\hat{V} = -\frac{1}{c} \int d\mathbf{x} \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}, t)$ (див. також [2]). Тут гамильтониан $\hat{V}^{(\rm e)}(t)$ описує взаємодію системи із зовнішнім електромагнітним полем,

$$\hat{V}^{(e)}(t) = -\frac{1}{c} \int d\mathbf{x} \hat{\mathbf{A}}^{(e)}(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x} \varphi^{(e)}(\mathbf{x}, t) \hat{\sigma}(\mathbf{x}).$$
(1.46)

Легко бачити, що розбиття гамильтониана системи $\hat{\mathcal{H}}(t)$ на складові $\hat{\mathcal{H}}$ і $\hat{V}^{(e)}(t)$ знаходиться у відповідності з виразом (1.31), який лежить в основі методики функцій Гріна.

Щоб отримати рівняння Максвелла для електромагнітного поля в речовині, необхідно усереднити їх зі статистичними оператором системи, в якому міститься інформація як про речовину, так і про електромагнітне поле. Для цього потрібно визначити середні значення полів $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ і $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$, що діють в речовині,

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \operatorname{Tr} \rho(t) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x},t), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x},t) = \operatorname{Tr} \rho(t) \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{x},t), \quad (1.47)$$

а також середні значення індукованих струмів і зарядів,

$$\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{x},t) = \operatorname{Tr} \rho(t) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x},t), \quad \tilde{\sigma}(\mathbf{x},t) = \operatorname{Tr} \rho(t) \hat{\sigma}(\mathbf{x}).$$
 (1.48)

У відповідності до формул (1.47) і (1.48) приходимо до рівнянь Максвелла-Лоренца для середніх полів в речовині,

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \mathbf{E}, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0,$$
$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{B} - 4\pi (\tilde{\mathbf{J}} + \mathbf{J}^{(e)}), \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi (\tilde{\sigma} + \sigma^{(e)}). \quad (1.49)$$

де $\sigma^{(e)}$ и $\mathbf{J}^{(e)}$ – густини сторонніх зарядів і струмів, відповідно.

Подальше завдання полягає в знаходженні індукованих зовнішнім полем щільності заряду $\tilde{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ і струму $\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{x}, t)$. При обчисленні цих величин в припущенні слабкого впливу на систему зовнішнього електромагнітного поля необхідно скористатися загальними рівняннями (1.41)–(1.43), розглядаючи в них в якості $F_i(\mathbf{x}, t)$ потенціали $\mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{x}, t)$ і $\varphi^{(e)}(\mathbf{x}, t)$, а в якості квазілокального оператора $\hat{a}(\mathbf{x})$ – оператори $\hat{\sigma}(\mathbf{x})$ і $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x}, t)$. В результаті можна прийти до виразів:

$$\widetilde{\sigma}(\mathbf{x},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\mathbf{x}' \Big[G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') \varphi^{(e)}(\mathbf{x}', t') - \overline{G}_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') \frac{1}{c} A_i^{(e)}(\mathbf{x}', t') \Big], \qquad (1.50)$$

$$\widetilde{J}_{k}(\mathbf{x},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\mathbf{x}' \Big[G_{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',t-t')\varphi^{(e)}(\mathbf{x}',t') - G_{kl}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',t-t')\frac{1}{c}A_{l}^{(e)}(\mathbf{x}',t') \Big], \qquad (1.51)$$

Функції Гріна, що входять в (1.50) і (1.51), визначаються відповідно до

формул (1.39) і (1.40) наступним чином:

$$G(\mathbf{x},t) = -i\theta(t) \operatorname{Tr} w[\hat{\sigma}(\mathbf{x},t),\hat{\sigma}(0)], \quad G_k(\mathbf{x},t) = -i\theta(t) \operatorname{Tr} w[\hat{j}_k(\mathbf{x},t),\hat{\sigma}(0)],$$

$$\overline{G}_k(\mathbf{x},t) = -i\theta(t) \operatorname{Tr} w[\hat{\sigma}(\mathbf{x},t),\hat{j}_k(0)], \quad G_{kl}(\mathbf{x},t) = -i\theta(t) \operatorname{Tr} w[\hat{j}_k(\mathbf{x},t),\hat{j}_l(0)].$$
(1.52)

При нехтуванні взаємодією між частинками досліджувана система являє собою *ідеальний газ воднеподібних атомів*. Для такої системи введені функції Гріна можуть бути обчислені точно. З урахуванням цієї обставини гейзенбергівська картина операторів густин і струмів, що входять у вирази (1.52), визначається формулами:

$$\hat{\sigma}_{0}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \sum_{\alpha,\beta} e^{-i\mathbf{x}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} e^{it[\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p})-\varepsilon_{\beta}(\mathbf{p}')]} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \hat{\eta}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) \hat{\eta}_{\beta}(\mathbf{p}'),$$

$$\hat{\mathbf{j}}_{0}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \sum_{\alpha,\beta} e^{-i\mathbf{x}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} e^{it[\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p})-\varepsilon_{\beta}(\mathbf{p}')]} \times$$

$$\times \left[\frac{(\mathbf{p}+\mathbf{p}')}{2m} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + \mathbf{I}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \right] \hat{\eta}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) \hat{\eta}_{\beta}(\mathbf{p}'),$$
(1.53)

в яких величини $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ і $\mathbf{I}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ даються виразами

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{y}\varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{y})\varphi_{\beta}(\mathbf{y}) \left[e_{1}\exp\left(i\tilde{m}_{2}\mathbf{k}\mathbf{y}\right) + e_{2}\exp\left(-i\tilde{m}_{1}\mathbf{k}\mathbf{y}\right)\right],$$

$$\mathbf{I}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2}\int d\mathbf{y} \left[\varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{y})\frac{\partial\varphi_{\beta}(\mathbf{y})}{\partial\mathbf{y}} - \frac{\partial\varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{y})}{\partial\mathbf{y}}\varphi_{\beta}(\mathbf{y})\right] \times \left[\frac{e_{1}}{m_{1}}\exp\left(i\tilde{m}_{2}\mathbf{k}\mathbf{y}\right) - \frac{e_{2}}{m_{2}}\exp\left(-i\tilde{m}_{1}\mathbf{k}\mathbf{y}\right)\right].$$
 (1.54)

Підставляючи оператори (1.53) в формули (1.52), можна прийти до наступних виразів для фур'є-компонент скалярних функцій Гріна (див. (1.43)):

$$G(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha,\beta} \sigma_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) \sigma_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) \frac{f_{\alpha}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - f_{\beta}(\mathbf{p})}{\omega + \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - \varepsilon_{\beta}(\mathbf{p}) + i0}.$$
 (1.55)

Аналогічні вирази для векторних функцій Гріна мають вигляд:

$$G_{l}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha,\beta} \left[\frac{(2\mathbf{p} - \mathbf{k})}{2m} \sigma_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) + \mathbf{I}_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) \right]_{l} \times \frac{\sigma_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) \left[f_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - f_{\beta}(\mathbf{p}) \right]}{\omega + \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - \varepsilon_{\beta}(\mathbf{p}) + i0}.$$
(1.56)

I, нарешті, тензорні функції Гріна для досліджуваної системи даються виразами:

$$G_{lj}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha,\beta} \left[\frac{(2\mathbf{p} - \mathbf{k})}{2m} \sigma_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) + \mathbf{I}_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) \right]_{l} \times \left[\frac{(2\mathbf{p} - \mathbf{k})}{2m} \sigma_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) + \mathbf{I}_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) \right]_{j} \frac{f_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - f_{\beta}(\mathbf{p})}{\omega + \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - \varepsilon_{\beta}(\mathbf{p}) + i0}.$$
(1.57)

У виразах (1.55)–(1.57) представлена функція розподілу $f_{\alpha}(\mathbf{p})$ воднеподібних атомів в стані з набором квантових чисел α ,

$$f_{\alpha}(\mathbf{p}) = \{ \exp[(\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p}) - \mu_{\alpha})/T] - 1 \}^{-1}, \qquad (1.58)$$

у відповідності до формул (див. (1.33))

$$\operatorname{Tr} w \hat{\eta}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) \hat{\eta}_{\beta}(\mathbf{p}') = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} f_{\alpha}(\mathbf{p}).$$
(1.59)

Енергія атомів $\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p})$ в формулах (1.55)–(1.58) дається виразом $\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\alpha} + p^2/2m$, де m – маса атома, а величини $\delta_{\alpha\beta}$ і $\delta_{\mathbf{pp}'}$ в (1.59) є символами Кронекера.

Температурні залежності функцій Гріна для газів з БЕК. Як було показано вище, лінійний відгук ідеального газу воднеподібних атомів на збурення зовнішнім електромагнітним полем може бути послідовно вивчено в рамках методу функцій Гріна. Для того, щоб виходячи з отриманих вище формул прийти до виразів для функцій Гріна ідеального газу при наявності БЕК, скористаємося співвідношенням для розподілу густини атомів в квантовому стані α по імпульсам **р** при температурі нижче критичної, $0 \leq T \leq T_0$, див. формулу (1.3) та [68],

$$\nu_{\alpha}(\mathbf{p}) = \nu_{\alpha}^{(c)} \delta(\mathbf{p}) + g_{\alpha} (2\pi\hbar)^{-3} \{ \exp\left[(\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p}) - \mu_{\alpha})/T \right] - 1 \}^{-1}, \qquad (1.60)$$

де $\nu_{\alpha}^{(c)} = \nu_{\alpha} [1 - (T/T_{0\alpha})^{3/2}]$ – густина атомів у стані α , що знаходяться у стані бозе-конденсату. У цій формулі $\delta(\mathbf{p})$ – дельта-функція Дірака, g_{α} – кратність виродження по проекції повного моменту \mathbf{F}_{α} атома в стані $|\alpha\rangle$.

Другий доданок у формулі (1.60) описує частку надконденсатних частинок. В границі нульових температур ($T \ll T_0$) густина надконденсатних частинок є малою порівняно з густиною частинок конденсату. Таким чином, щоб отримати вирази для функцій Гріна ідеального газу з БЕК в межі нульових температур, співвідношення (1.60) необхідно використовувати в наступному вигляді:

$$\frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{p}} f_{\alpha}(\mathbf{p})\ldots = \int d\mathbf{p} \ \nu_{\alpha}\delta(\mathbf{p})\ldots, \quad \nu_{\alpha} = \nu_{\alpha}^{(c)}.$$
(1.61)

Таким чином, виходячи з виразу (1.55) для фур'є-образу скалярної функції Гріна $G(\mathbf{k}, \omega)$ з використанням формул (1.60) і (1.61), можна прийти до наступного виразу

$$G(\mathbf{k},\omega) = G^{(c)}(\mathbf{k},\omega) + G^{(n)}(\mathbf{k},\omega), \qquad (1.62)$$

де доданки $G^{(c)}(\mathbf{k},\omega)$ і $G^{(n)}(\mathbf{k},\omega)$ визначаються формулами:

$$G^{(c)}(\mathbf{k},\omega) = \sum_{\alpha,\beta} |\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})|^2 \frac{\nu_{\alpha}(1-t_{\alpha}^{3/2})}{\delta\omega_{\alpha\beta}+i\gamma_{\alpha\beta}},$$

$$G^{(n)}(\mathbf{k},\omega) = (2\pi\hbar)^{-3} \sum_{\alpha,\beta} |\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})|^2 \times$$

$$\times \int_{0}^{\infty} \frac{2\pi p^2 dp}{\exp\left(\varepsilon_p/T\right)-1} \int_{-1}^{1} \frac{dy}{\delta\omega_{\alpha\beta}+pky/m+i\gamma_{\alpha\beta}},$$
(1.63)

де $\delta\omega_{\alpha\beta} \equiv \omega + \Delta\varepsilon_{\alpha\beta}$, ω и **k** – частота і хвильовий вектор зовнішнього поля, відповідно, ν_{α} – густина конденсованих атомів в стані, яке характеризується набором квантових чисел α , $\Delta\varepsilon_{\alpha\beta}$ – різниця енергій між рівнями атома з набором квантових чисел α і β , $t_{\alpha} = T/T_{0\alpha} \gamma_{\alpha\beta}$ – ймовірність спонтанного переходу зі стану α до стану β . Густина атомів у збуджених станах β по відношенню до резонансних частот зовнішнього поля вважається малою в порівнянні з густиною атомів з енергіями (розщепленого) основного стану, $\nu_{\alpha} \gg \nu_{\beta}$.

Діелектрична проникливість газу атомів. В рамках лінійної теорії відгуку ідеальних газів на зовнішнє збурення, що спричинене, як приклад, електромагнітним полем лазера, припускається, що такий лазер є пробним і практично не впливає на заселеність квантовомеханічних станів системи. Слід зауважити, що використання лінійної теорії відгуку виключає можливість врахування впливу зв'язуючого сильного лазера на систему (який необхідний для забезпечення електромагнітно-індукованої прозорості (ЕІП)). Однак, його використання зовсім не є необхідною умовою уповільнення електромагнітних імпульсів (див. також [2]).

Як можна помітити (див., наприклад, [66, 67]), при досягненні режиму БЕК в разі атомів лужних металів зазвичай використовують зріджені гази з густиною частинок $\nu \lesssim 10^{14}$ см⁻³. Такі гази з хорошою точністю можна вважати ідеальними. Тому при описі використання БЕК як фільтра електромагнітних

сигналів можна базуватися на результатах зазначеного формалізму функцій Гріна, а також відомого співвідношення для діелектричної проникливості в термінах скалярної функції Гріна (див., наприклад, [68])

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{k},\omega) = 1 + \frac{4\pi}{k^2} G(\mathbf{k},\omega)$$
(1.64)

Якщо розглядати границю нульових температур, $T \ll T_0$, можна виходити з наступного виразу для діелектричної проникності газового середовища в стані БЕК:

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{k},\omega) \approx 1 + \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{(\nu_{\alpha} - \nu_{\beta}) |\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})|^2}{\omega + \Delta \varepsilon_{\alpha\beta} + i\gamma_{\alpha\beta}}.$$
 (1.65)

Величина $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ є матричним елементом густини заряду, який визначається співвідношенням

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = e \int d\mathbf{y} \varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{y}) \varphi_{\beta}(\mathbf{y}) \left[\exp\left(i\frac{m_{\rm p}}{m}\mathbf{k}\mathbf{y}\right) - \exp\left(-i\frac{m_{\rm e}}{m}\mathbf{k}\mathbf{y}\right) \right], \quad (1.66)$$

де $\varphi_{\alpha}(\mathbf{y})$ – хвильова функція атома в квантовому стані α , e – абсолютне значення заряду електрона, $m_{\rm p}$ и $m_{\rm e}$ – маса атомного остова і електрона, відповідно ($m = m_{\rm p} + m_{\rm e}$). В разі дозволених дипольних переходів, використовуючи в (1.66) розкладання по (\mathbf{ky}) \ll 1, отримаємо

$$\sigma^{(1)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) pprox i \mathbf{k} \mathbf{d}_{\alpha\beta},$$

де $\mathbf{d}_{\alpha\beta}$ – дипольний момент атома, що відповідає переходу $\alpha \to \beta$:

$$\mathbf{d}_{\alpha\beta} = e \int \mathbf{y} d\mathbf{y} \varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{y}) \varphi_{\beta}(\mathbf{y}).$$
(1.67)

Вважаючи, що густина атомів в збуджених станах дуже мала в порівнянні з

густиною атомів в основних станах (див. [2]), формулу (1.65) можна записати у вигляді:

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{k},\omega;B) \approx 1 + \sum_{\alpha,\beta} \frac{a_{\alpha\beta}}{\omega + \Delta\varepsilon_{\alpha\beta}(B) + i\gamma_{\alpha\beta}}.$$
(1.68)

Тут вже квантовим станам, позначених індексом α відповідають рівні розщепленого у зовнішньому магнітному полі *B* основного стану атома, а індексом β позначені набори квантових чисел, що відповідають збудженим рівням атома, в тому числі і розщепленим в зовнішньому магнітному полі. Величина $\gamma_{\alpha\beta}$ в (1.68) дається виразом $\gamma_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}\Gamma_{\beta}/2$, де $S_{\alpha\beta}$ – відносна інтенсивність переходу, Γ_{β} – природна ширина збудженого рівня. Величина

$$a_{\alpha\beta} = 4\pi\nu_{\alpha}d_{\alpha\beta}^2/3 \tag{1.69}$$

визначає залежність дисперсійних характеристик середовища від поляризаційних властивостей атома і від густини атомів в газі з конденсатом.

Якщо відокремити в (1.68) реальну та уявну частини діелектричної проникності (ϵ' і ϵ'' , відповідно), можна отримати вирази для показника заломлення і коефіцієнта загасання електромагнітних хвиль в середовищі

$$n' = \frac{\sqrt{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} + \epsilon'}}{\sqrt{2}}, \quad n'' = \frac{\sqrt{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon'}}{\sqrt{2}}.$$
 (1.70)

В області прозорості перша величина буде визначати групову швидкість електромагнітного сигналу

$$v_{\rm g}(\omega, B) = \frac{c}{n'(\omega, B) + \omega(\partial n'/\partial \omega)},\tag{1.71}$$

а друга – інтенсивність пройденого імпульсу,

$$I(\omega, B) = I_0(\omega) \exp\left[-n''(\omega, B)kL\right], \qquad (1.72)$$

де $I_0(\omega)$ – початкова спектральна густина інтенсивності первинного імпульсу (імпульсу перед його проходженням через БЕК), L – характерні розміри газу атомів.

1.3. Опис рівноважних станів взаємодіючих квантових газів у просторово-періодичних потенціалах ґраток

1.3.1. Оптичні ґратки та модель Габбарда

Оптичні ґратки пропонують принципово інший підхід до квантової фізики систем багатьох частинок, дозволяючи експериментально реалізувати такі теоретичні моделі, як модель Габбарда [69,70]. У такому підході вихідною точкою є не експериментально спостережуване явище, яке потребує теоретичного пояснення, а сама теоретична модель. Ультрахолодні атоми, завантажені в ідеальний (без дефектів) кристал, що утворений лазерним світлом, являють собою симулятор для моделей конденсованого середовища, при цьому майже всі параметри моделі контролюються з високою точністю та можуть бути змінені за потреби в широких діапазонах. Певним чином це наближається до оригінальної ідеї універсального квантового симулятора, описаної Р. П. Фейнманом у 1982 р. [1]. Такий підхід також дозволяє проаналізувати відмінності між теоретичними прогнозами та експериментальними спостереженнями.

Оптична ґратка формується з лазерних стоячих хвиль, що утворюють просторово-періодичний потенціал для ультрахолодних атомів. Змінне електричне поле лазера індукує електричний дипольний момент в атомі. Взаємодія цього атомного дипольного моменту із зовнішнім змінним електричним полем, у свою чергу, призводить до ефективного електростатичного потенціалу, що діє на атом. Для лазерних частот нижче частоти атомного резонансу («червоне розстроювання частоти») дипольний потенціал є потенціалом тяжіння, а в протилежному випадку («синє розстроювання частоти») – відштовхуючим. Фізичні деталі цього процесу можна знайти в огляді [71].

Три взаємоперпендикулярні стоячі хвилі створюють періодичний потенціал виду

$$V_{dip} = \sum_{\alpha} V_{\alpha} \cos^2\left(k\alpha\right) \tag{1.73}$$

з $\alpha = x, y, z$. Це найбільш поширена форма періодичного потенціалу, що реалізується в експериментах з ультрахолодними атомами. V_{α} – глибина ґратки, а $k = \lambda/(2\pi)$ – хвильове число лазера, яке пов'язане зі сталою решітки $d = \lambda/2$. Глибина ґратки пропорційна інтенсивності лазера і обернено пропорційна різниці між частотою лазера та частотою атомного переходу. Для області в центрі оптичної пастки, яка є малою порівняно з характерною дисперсією гаусівського розподілу інтенсивності пучка, амплітуду V_{α} можна вважати сталою.

Рух атома в потенціалі ґратки визначається процесами тунелювання між сусідніми вузлами. Трансляційно-інваріантні власні стани одиничного атома в періодичному потенціалі ґратки (1.73) можуть бути визначені за допомоги функції Ваньє. Позначаючи одночастинкову функцію Ваньє як $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, що локалізована на вузлі *i*, параметри тунелювання можуть бути визначені за допомоги інтегралу перекриття хвильових функцій,

$$t_{ij} = -\int d^3r \ \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{lat}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \tag{1.74}$$

Амплітуда цього процесу експериментально регулюється інтенсивністю лазера. Пряме тунелювання до вузлів з другої координаційної сфери, як правило, є незначним при помірній глибині ґратки ($V_{\alpha} > 5E_r$, де E_r – енергія віддачі атома) [72].

Через низьку кінетичну енергію в квантових газах, два атоми різного спіну зазвичай взаємодіють через *s*-хвильове розсіяння. Довжину розсіяння *a_s* і, відповідно, силу взаємодії можна налаштувати за допомоги резонансів Фешбаха [73]. Однак амплітуда (локальної) взаємодії також залежить і від глибини ґратки; в термінах функцій Ваньє вона може бути записана як

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int d^3r \ |\psi(\mathbf{r})|^4.$$
 (1.75)

Тому вона може бути налаштована двома механізмами – зовнішнім сталим магнітним полем, яке впливає на значення *a_s* за рахунок резонансів Фешбаха, та глибиною ґратки, що змінює просторовий розподіл функцій Ваньє.

Для атомів, що перебувають в нижній зоні (так званій першій зоні Бріллюена), концепція, що включає одночасно і процеси тунелювання, і ефекти взаємодії, призводить до гамільтоніану Габбарда, про який йде мова нижче. Для визначеності, оберемо одноорбітальну модель Фермі-Габбарда, яка є найпростішою моделлю сильно корельованої системи електронів у ґратці. Така модель передбачає одиничну зону і локальну взаємодію між частинками. Гамільтоніан має наступний вигляд:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (V_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}, \qquad (1.76)$$

де $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\hat{c}_{i\sigma})$ – оператори народження (знищення) частинки зі спіном $\sigma = \{\uparrow,\downarrow\}$ на вузлі *i* та $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{i\sigma}$ – оператор числа частинок з власними значеннями 0 або 1. Символьне написання $\langle i,j\rangle$ означає підсумовування по сусідніх вузлах ґратки, а μ – хімічний потенціал частинок.

В оптичній ґратці атоми можуть тунелювати між двома сусідніми вузлами i і j завдяки тунелюванню з амплітудою t_{ij} , що визначається відповідно до рівняння (1.74). Оскільки ферміони підкоряються принципу Паулі, тунелювання можливе лише в тому випадку, якщо кінцевий вузол ґратки або порожній, або окремо зайнятий ферміоном з протилежним спіном. Для простоти, взаємодія атомів у системі вважається суто локальною. Це справедливе наближення для досить глибоких оптичних ґраток та атомів лужних металів в основному стані. У твердотільних системах таке наближення зазвичай виправдовується великим екрануванням кулонівської взаємодії, що робить ефективну взаємодію короткодіючою. Як тільки два ферміони з протилежними спінами займають один і той же вузол ґратки, енергія системи змінюється на величину U, див. (1.75), що може бути як позитивною (відштовхування, $a_s > 0$) або негативною (тяжіння, $a_s < 0$). У цій дисертації вивчаються властивості як моделі (1.76), так й більш загальних та складних, лише зі взаємодіями відштовхування. При описі експериментальних систем зазвичай також існує зовнішній потенціал V_i (потенціал оптичної пастки, як правило, параболічного типу), який порушує трансляційну симетрію ґратки.

Члени з тунелюванням і взаємодією в гамільтоніані (1.76) мають конкуруючі ефекти в однорідних системах. Перший приводить частинки до делокалізації, що призводить до сильного перекриття одночастинкових хвильових функцій, тоді як другий зменшує кількість подвійно зайнятих комірок через відштовхувальну взаємодію між частинками. Домінування одного члена над іншим дає принципово різні багаточастинкові стани речовини, а визначення приналежності системи до одного чи іншого є одною з нетривіальних задач в фізиці сильно корельованих систем багатьох електронів.

Модель Габбарда для сильно корельованих матеріалів грає аналогічну роль, як і модель Ізінга для класичних спінових систем. Незважаючи на спрощення, вона все ще залишається нерозв'язною проблемою багатьох тіл, за винятком одновимірного випадку, для якого точне рішення дали Ліб і Ву в 1968 р. [74]. Точні числові методи можуть бути застосовані лише для невеликих систем, оскільки обчислювальні витрати зростають експоненціально з розміром системи. У граничному випадку слабкої взаємодії можна застосувати
одночастинкові наближення, такі як теорія Хартрі-Фока [75]. При такому підході внески електронів ефективно відокремлюються, тобто два електрони, що займають одне місце ґратки, взаємодіють один з одним лише через статичне середнє поле. Однак, у разі сильних взаємодій подвійне заповнення стає несприятливим і статична теорія середнього поля не застосовується. У наступних розділах обговорюються кілька важливих теоретичних підходів до вивчення близькокритичних властивостей (фізичних характеристик та особливостей їх поведінки в околі фазових переходів) квантових газів, що описуються моделлю Габбарда.

1.3.2. Спіново-хвильовий підхід

У цьому підрозділі наводяться основні принципи спіново-хвильового теоретичного підходу, який використовується в дисертаційній роботі у випадку, коли в моделі Габбарда типу (1.76) можна знехтувати членами з міжчастинковою взаємодію, або якщо останні можна звести у границі слабого зв'язку до білінійної форми за операторами народження та знищення частинок. Будемо виходити з наступної форми гамільтоніану (див. також [76, 77])

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \left(A_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} B_{ij} a_i a_j + \frac{1}{2} B_{ji}^* a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} \right), \qquad (1.77)$$

де, для визначеності та відповідності до застосування у розділах нижче, будемо розглядати, що частинки підкорюються статистиці Бозе-Ейнштейна. Переходячи далі до Фур'є-компонентів операторів a_l^{\dagger} та a_l ,

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_l}, \quad a_l^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l},$$

що підкорюються тим самим комутаційним співвідношенням, гамільтоніан (1.77) запишеться у вигляді

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left(A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} B_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} B_{\mathbf{k}}^{*} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right).$$
(1.78)

Слід зазначити, що коефіцієнти $A_{\mathbf{k}}$ та $B_{\mathbf{k}}$ напряму залежать від елементів A_{ij} та B_{ij} у початковому гамільтоніані (1.77). Їх явний вигляд не впливає на загальні положення методу та стає важливим тільки при описі конкретних фізичних систем.

Далі, з метою приведення гамільтоніану (1.78) до діагонального виду в імпульсному просторі, застосовуються добре відомі перетворення Боголюбова

$$a_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^{*}b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \quad a_{\mathbf{k}}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}}^{*}b_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}b_{-\mathbf{k}},$$

де $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ та $b_{\mathbf{k}}$ – оператори народження та знищення квазічастинок (наприклад, магнонів або екситонів), відповідно. Якщо нові оператори задовольняють тим самим комутаційним співвідношенням, то й коефіцієнти мають задовольняти умові $|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$.

Гамільтоніан системи в термінах операторів квазічастинок має вигляд

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}, \qquad (1.79)$$

де E_0 – енергія нульових коливань (або енергія вакуумного стану в системі квазічастинок), а $\omega(\mathbf{k})$ – енергія квазічастинки з хвильовим вектором **k**. Ці величини можуть бути визначені за допомоги квантовомеханічного рівняння стану (див. детальніше в [76]), що призводить до

$$\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{A_{\mathbf{k}}^2 - |B_{\mathbf{k}}|^2}, \quad E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega(\mathbf{k}) - A_{\mathbf{k}}].$$
(1.80)

Зазначимо, що узагальнення спіново-хвильового підходу на випадок частинок з більшим числом сортів є доволі прямолінійним з математичної точки зору та може бути проведено за аналогією та у відповідності з загальними формулами, що наведені, наприклад, в огляді [77].

1.3.3. Розкладання в границі сильного зв'язку

У підрозділі 1.3.1 було представлено модель Габбарда (1.76), що описує тунелювання і взаємодію частинок з локалізованими станами Ваньє на ґратці. Нижче коротко описується метод отримання магнітних фаз основного стану з цієї моделі, відомий як перетворення Шріффера-Вольфа [78,79]. Для визначеності, розглянемо випадок ферміонів зі спіном 1/2, що відштовхуються між собою (U > 0), з гамільтоніаном виду:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j\sigma} + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow},$$

де $\langle ij \rangle$ означає підсумовування по сусідніх вузлах ґратки, $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Нижче ми розглянемо систему в границі сильної взаємодії, $U \gg t$ (*стан ізолятора Momma*).

Ми зосередимо увагу на тому випадку, коли на кожну комірку припадає одна частинка (тобто при умові, що немає легування). Обмежимось в обчисленнях парами сусідніх вузлів і порівняємо енергії станів:

$$|1,1\rangle = |\underline{\uparrow},\underline{\uparrow}\rangle, \quad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\underline{\uparrow},\underline{\downarrow}\rangle + |\underline{\downarrow},\underline{\uparrow}\rangle), \quad |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\underline{\uparrow},\underline{\downarrow}\rangle - |\underline{\downarrow},\underline{\uparrow}\rangle).$$

Зауважимо, що триплетний стан $|1, -1\rangle$ опущено, оскільки його поведінка явно ідентична $|1, 1\rangle$. Оскільки всі ці стани мають однакове заселення вузлів, і оскільки член з тунелюванням буде утворювати будь-який стан ортогональний

для кожного з наведених, зрозуміло, що в лінійному порядку теорії збурень:

$$\langle 1,1|\hat{\mathcal{H}}|1,1\rangle = \langle 1,0|\hat{\mathcal{H}}|1,0\rangle = \langle 0,0|\hat{\mathcal{H}}|0,0\rangle = 0.$$

Однак, стани, що продукуються тунелюванням, можуть стати власними станами оператора взаємодії, якщо розглядати внесок тунелювання в рамках другого порядку теорії збурень:

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_m \frac{\langle n|\delta\hat{\mathcal{H}}|m\rangle\langle m|\delta\hat{\mathcal{H}}|n\rangle}{E_n - E_m}.$$
(1.81)

Одразу можна побачити, що $\delta \hat{\mathcal{H}} |1,1\rangle = 0$, оскільки член з тунелюванням не може перемістити частинку зі спіном \uparrow , на ділянку, яка вже зайнята той же самою. Однак, для інших станів можна отримати:

$$\delta \hat{\mathcal{H}} |\uparrow, \downarrow\rangle = -t \left(+ |\uparrow\downarrow, _\rangle + |_, \uparrow\downarrow\rangle \right), \tag{1.82}$$

$$\delta \hat{\mathcal{H}} | \underline{\downarrow}, \underline{\uparrow} \rangle = -t \left(- | \underline{\uparrow} \underline{\downarrow}, \underline{} \rangle - | \underline{}, \underline{\uparrow} \underline{\downarrow} \rangle \right). \tag{1.83}$$

Для того, щоб співвідносити два вищезазначені члени, необхідно обрати правило знаків для того, як діаграматичні конфігурації відносяться до впорядкування операторів. Вибір, який було використано вище, – це: $|\uparrow, \downarrow\rangle = \hat{a}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{2\downarrow}^{\dagger} |\Omega\rangle$, тобто, оператори відображаються в тому ж порядку, що і комірки, і $|\uparrow\downarrow, _\rangle = \hat{a}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{1\downarrow}^{\dagger} |\Omega\rangle$, тобто, оператори зі спіном \uparrow з'являються першими. Наприклад, рівняння (1.82) запишеться як:

$$-t\left(\hat{a}_{1\downarrow}^{\dagger}\hat{a}_{2\downarrow}+\hat{a}_{2\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{1\uparrow}\right)\hat{a}_{1\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{2\downarrow}^{\dagger}=-t\left(-\hat{a}_{1\downarrow}^{\dagger}\hat{a}_{1\uparrow}^{\dagger}+\hat{a}_{2\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{2\downarrow}^{\dagger}\right)=-t\left(+|\underline{\uparrow\downarrow},\underline{}\rangle+|\underline{},\underline{\uparrow\downarrow}\rangle\right)$$

Таким чином, зрозуміло, що маємо $\delta \hat{\mathcal{H}} |1,0\rangle = 0$ через скасування двох доданків,

але $\delta \hat{\mathcal{H}} |0,0\rangle \neq 0$, тому

$$\delta E_{0,0}^{(2)} = \frac{2t \cdot 2t}{0 - U} = \frac{-4t^2}{U}.$$

Таким чином, має місце *антиферомагнітна* взаємодія з амплітудою $4t^2/U$, що призводить до обрання синглетного стану як основного. Для пари частинок зі спіном 1/2 оператор

$$\hat{\mathbf{S}}_{i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j} = \frac{1}{2} \left[(\hat{\mathbf{S}}_{i} + \hat{\mathbf{S}}_{j})^{2} - \hat{\mathbf{S}}_{i}^{2} - \hat{\mathbf{S}}_{j}^{2} \right] = \begin{cases} \frac{1}{2} (0 - \frac{3}{2}) & \text{для синглетного стану;} \\ \frac{1}{2} (2 - \frac{3}{2}) & \text{для триплетного стану.} \end{cases}$$

Таким чином, його можна записати як $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j = \frac{1}{4} - \hat{\mathcal{P}}_{\text{Singlet}}$, де $\hat{\mathcal{P}}_{\text{Singlet}}$ – оператор проекції на синглетний стан. Підсумовуючи, оператор тунелювання ефективно може бути записаний як $J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$, що відповідає ізотропній магнітній взаємодії, як у спіновій моделі Гейзенберга.

Далі вивчимо, як тунелювання діє у виродженому підпросторі, включаючи ефекти віртуальних стрибків. Щоб послідовно розглянути низькоенергетичний сектор поза режимом наповнення зони наполовину, треба окремо розглядати внески тунелювання, що змінюють енергію, від тих, що цього не роблять. Тобто, амплітуди, пов'язані з двома процесами:

(i)
$$\uparrow _ \Rightarrow _ \uparrow$$
 (ii) $\uparrow \downarrow \Rightarrow _ \uparrow \downarrow$

є різними, бо процес (іі) коштує енергію U, однак обидва процеси в даний час описуються одним і тим же доданком у гамільтоніані Габбарда, $t\hat{a}_{2\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{1\uparrow}$.

Шляхом вирішення проблеми є здійснення унітарних перетворень, вперше введених Шріффером та Вольфом [78], задля усунення провідних ефектів тунелювання, таких як (іі). Формально слід розділити оператор тунелювання $\hat{\mathcal{H}}_t$ на частини, що є діагональними $\hat{\mathcal{H}}_{t,D}$ та позадіагональними $\hat{\mathcal{H}}_{t,OD}$ в термінах оператора взаємодії $\hat{\mathcal{H}}_U$. Отже, метою є знайти ермітівський оператор \hat{S} такий, щоб

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = e^{i\hat{S}}(\hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,OD})e^{-i\hat{S}} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \mathcal{O}(t^2/U), \quad (1.84)$$

що відповідає роботі в новому базисі, де всі члени $\propto t$, які призводять до виходу з підпростору основного стану, виведені з розгляду та залишають за собою лише віртуальний опосередкований внесок вищого порядку по t. З метою такого розділення $\hat{\mathcal{H}}_t$ зручним буде записати

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{t} &= -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \underbrace{\hat{n}_{j\bar{\sigma}} \hat{a}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma} \hat{n}_{i\bar{\sigma}}}_{\hat{\mathcal{H}}_{t,2}} + \underbrace{\hat{n}_{j\bar{\sigma}} \hat{a}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma} (1 - \hat{n}_{i\bar{\sigma}})}_{\hat{\mathcal{H}}_{t,+}} + \\ &+ \underbrace{(1 - \hat{n}_{j\bar{\sigma}}) \hat{a}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma} \hat{n}_{i\bar{\sigma}}}_{\hat{\mathcal{H}}_{t,-}} + \underbrace{(1 - \hat{n}_{j\bar{\sigma}}) \hat{a}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma} (1 - \hat{n}_{i\bar{\sigma}})}_{\hat{\mathcal{H}}_{t,0}}. \end{aligned}$$

Введені множники залежать від заселеності початкового та кінцевого вузлів протилежним спіном і є такими, що сума всіх чотирьох частин відтворює $\hat{\mathcal{H}}_t$. Заселеність початкового та кінцевого вузлів спіном, що тунелює, не потрібно відокремлювати, оскільки оператор тунелювання зникає за винятком випадків, коли відбувається перехід із заповненої на порожню комірку. Розглянемо $\hat{\mathcal{H}}_{t,0}$ в якості тунелювання дірок, як у (і), і $\hat{\mathcal{H}}_{t,2}$ в якості тунелювання пар, тобто $\uparrow \downarrow \downarrow \Rightarrow \downarrow \uparrow \downarrow$. Ці дві частини разом дають діагональну складову $\hat{\mathcal{H}}_{t,D} = \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,D}$, так що решта $\hat{\mathcal{H}}_{t,OD} = \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-}$ відповідає створенню пари «дірка-пара» або знищенню такої пари.

Розкладаючи таке унітарне обертання до другого порядку по \hat{S}

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = e^{i\hat{S}}\hat{\mathcal{H}}e^{-i\hat{S}} = \hat{\mathcal{H}} + i[\hat{S},\hat{\mathcal{H}}] - \frac{1}{2}\left[\hat{S},[\hat{S},\hat{\mathcal{H}}]\right], \quad \hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,OD}.$$

Виходячи з того, що $S \sim t/U$, запишемо до складових порядку $\sim t^2/U$:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \hat{\mathcal{H}}_U + i[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] + \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,OD} + i[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,OD}] - \frac{1}{2} \left[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] \right]$$

Тож, очевидно, що для скасування позадіагональних складових порядку t, має відбутися таке співвідношення:

$$[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] = i\hat{\mathcal{H}}_{t,OD}.$$
(1.85)

Таким чином, маємо

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + i[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,OD}] - \frac{1}{2} \left[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] \right].$$

Для вирішення задачі спочатку потрібно визначити Ŝ. Для цього необхідно зазначити, що

$$[\hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}, \hat{\mathcal{H}}_U] = \mp U \hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}.$$
(1.86)

Це можна побачити також, розрізняючи, чи відбувається подвійне заповнення в початковому стані (для $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$) або в кінцевому (для $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$), а отже, в якому оператор $\hat{\mathcal{H}}_U$ залишається активним, оскільки він знищує будь-що за відсутності подвійно зайнятої комірки. Тому з рівнянь (1.85) і (1.86) виходить

$$\hat{S} = \frac{i}{U}(\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}), \qquad \left[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U]\right] = i[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{t,OD}] = \frac{2}{U}[\hat{\mathcal{H}}_{t,-}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+}].$$

Потрібно зазначити, що $[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{t,D}]$ описує процеси, що виводять за межі основного набору станів, оскільки вони включатимуть один оператор $\hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}$, тоді як доданок у останньому рівнянні може повернути стан до основного набору шляхом створення, а потім знищення пари «дірка-пара». Якщо припустити, що початковий стан не має таких збуджень, можна додатково зазначити, що $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}\hat{\mathcal{H}}_{t,-} = 0$, оскільки такий стан анігілюється оператором знищення збудження.

Таким чином, маємо

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \frac{1}{U}\hat{\mathcal{H}}_{t,-}\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$$

Щоб бути послідовними, на цьому етапі слід також опустити $\hat{\mathcal{H}}_U$, оскільки кількість подвійно зайнятих комірок в основному стані є постійною, тому $\hat{\mathcal{H}}_U$ вносить свій внесок лише як *с*-число в гамільтоніані.

Щоб записати $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}^{ij}\hat{\mathcal{H}}_{t,+}^{ji}$, ми дозволяємо процесу $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$ мати однакову чи протилежну мітку проекції спіну до процесу $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$,

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,-}^{ij}\hat{\mathcal{H}}_{t,+}^{ji} = t^2 \sum_{\sigma} \left[(1 - \hat{n}_{j-\sigma})\hat{a}_{j\sigma}^{\dagger}\hat{a}_{i\sigma}\hat{n}_{i-\sigma} + (1 - \hat{n}_{j\sigma})\hat{a}_{j-\sigma}^{\dagger}\hat{a}_{i-\sigma}\hat{n}_{i\sigma} \right] \cdot \hat{n}_{j-\sigma}\hat{a}_{j\sigma}^{\dagger}\hat{a}_{i\sigma}(1 - \hat{n}_{i-\sigma})$$

Після вилучення операторів числа частинок, які є надлишковими через ферміонну природу операторів народження та знищення, і вводячи оператори числа частинок, де це можливо, запишемо

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,-}^{ij}\hat{\mathcal{H}}_{t,+}^{ji} = t^2 \sum_{\sigma} \left[\hat{n}_{i-\sigma}\hat{n}_{j\sigma} - \hat{a}_{j-\sigma}^{\dagger}\hat{a}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{a}_{i-\sigma}\hat{a}_{j\sigma} \right]$$

Тут також використано той факт, що в початковому стані немає подвійно заселених комірок, тобто $(1 - \hat{n}_{i-\sigma})\hat{n}_{i\sigma} = \hat{n}_{i\sigma}$.

Обидва внески існують лише в тому випадку, якщо комірки i, j спочатку містять протилежні спіни, і таким чином відповідають обмінному доданку, який або залишає спини незмінними, або обмінює їх зі зміною знаку. Використовуючи оператори $\hat{\mathbf{S}}$,

$$\sum_{\sigma} \hat{n}_{i-\sigma} \hat{n}_{j\sigma} = \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{2} - 2\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z, \quad \sum_{\sigma} \hat{a}_{j-\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i-\sigma} \hat{a}_{j\sigma} = \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+,$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \text{const} - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{\mathbf{S}}_{i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j} - \frac{\hat{n}_{i} \hat{n}_{j}}{4} \right) + \mathcal{O}(t^{2}/U),$$

де $J = 4t^2/U$ є амплітудою ефективного антиферомагнітного зв'язку в обмінному доданку типу Гейзенберга. Це так звана *t-J* модель, яку застосовують до опису сильно корельованих електронних систем. Зокрема, ця модель використовується для обчислення станів високотемпературних надпровідників в легованих антиферомагнетиках [80].

1.3.4. Середньопольовий підхід

Середньопольовий теоретичний підхід є потужним методом розв'язання задач в фізиці твердого тіла, насамперед, задач пов'язаних з магнітними властивостями матеріалів, що описуються ефективними спіновими моделями. Найбільш відомим є приклад розв'язку моделі Ізінга, де використовується середньопольове співвідношення $m = \langle s_i \rangle$, де s_i – проекція спіну на вузлі ґратки i (див., наприклад, [81]). Далі, на основі явного виду гамільтоніана, виводиться рівняння самоузгодження та досліджуються критичні властивості системи. За аналогією до зазначеного метода, наведемо концепцію для більш загального прикладу – гамільтоніану Бозе-Габбарда, реалізація якого можлива як в системах складених з ультрахолодних атомів в оптичних ґратках, так і при описі багатоелектронних спінових станів у твердих тілах (як приклад, в кристалах оксидів кобальту).

Розглянемо наступний гамільтоніан:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \left(A_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} B_{ij} a_i a_j + \frac{1}{2} B_{ji}^* a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} \right) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i + 1), \quad (1.87)$$

який відрізняється від наведеного раніше у спіновохвильовому підході, див. формулу (1.77), наявністю члену з локальною взаємодією, якою не можливо знехтувати з будь-яких фізичних причин. Такий гамільтоніан може буде зведений до локального базису у випадку, якщо у нелокальному члені сума ведеться за близькосусідніми вузлами ґратки. Тоді, вводячи середньопольову заміну операторів на вузлах $j \neq i$ комплексними числами, $\langle a_j \rangle = \phi$, та позначаючи число сусідів в першій координаційній сфері Z, можна записати

$$\mathcal{H} = \sum_{i} \mathcal{H}_{i}^{MF}, \quad \mathcal{H}_{i}^{MF} = Z\left(Aa_{i}^{\dagger}\phi + \frac{1}{2}Ba_{i}\phi + \frac{1}{2}B^{*}a_{i}^{\dagger}\phi^{*}\right) + \frac{U}{2}n_{i}(n_{i}+1) \quad (1.88)$$

Локальний гамільтоніан \mathcal{H}_{i}^{MF} , як правило, можливо напряму обчислити методом точної чисельної діагоналізації. Таким чином, маючи доступ до набору власних функцій $|\psi_{l}^{(i)}\rangle$ та енергій E_{l} оператору \mathcal{H}_{i}^{MF} , рівняння самоузгодження записується у вигляді

$$\langle a_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_l a_l^{(i)} e^{-\beta E_l}, \quad \text{ge} \quad \mathcal{Z} = \sum_l e^{-\beta E_l}$$
(1.89)

– статистична сума, $\beta = 1/T$ – зворотня температура в енергетичних одиницях, а коефіцієнти $a_l^{(i)}$ обчислюються відповідно до співвідношення $a_i |\psi_l^{(i)}\rangle = a_l^{(i)} |\psi_l^{(i)}\rangle$.

Як правило, обчислювальна процедура в рамках даного середньопольового підходу починається з початкового вибору значення ϕ (так званого поля Вейса). В залежності від конкретної задачі та фізичного режиму, ϕ може бути згенерованим випадковим комплексним числом, або результатом попередніх обчислень в близькій точці параметричного простору. Якщо обчислення ведуться для просторово-однорідної фази, збіжність обчислень проявляється в досягненні границі $\langle a_i \rangle \rightarrow \phi$ в рівнянні (1.89); в зворотньому випадку – процедура (n + 1 ітерація) повторюється з новим значенням $\phi_{n+1} = \langle a_i \rangle_n$.

У випадку фаз з порушеною трансляційною симетрією, а саме в разі дво-

підґраткового впорядкування, локальні гамільтоніани та відповідні рівняння самоузгодження обчислюються для двох підґраток A та B паралельно з відповідними величинами $\phi^{(A,B)}$. При цьому, вхідним параметром на підґратці B є величина $\phi^{(A)}$, обчислена на підґратці A згідно рівняння (1.89) та навпаки.

1.3.5. Динамічна теорія середнього поля

Загалом, теорії середнього поля використовуються для наближеного опису квантових систем багатьох частинок. Один із способів отримати таке наближення полягає у застосуванні граничного випадку для певного системного параметра. Ця процедура призводить до спрощеної системи, яка може бути обрахована теоретично і може дати розуміння основних властивостей реальної системи. Прототипом такого наближення є теорія середнього поля Вейса, яку було розглянуто у попередньому підрозділі на прикладі моделі Бозе-Габбарда. В межах нескінченної кількості вимірів ґратки, $d \to \infty$ (або, що еквівалентно, нескінченному координаційному число ґратки, $Z \to \infty$), теорія середнього поля Вейса стає точною.

Що стосується моделі Фермі-Габбарда, як було зазначено у підрозділі 1.3.1, ситуація зі стандартним (статичним) середньопольовим описом принципово ускладнюється у зв'язку зі статистикою Фермі-Дірака. Однак, у 1989 році В. Метцнером та Д. Вольхардтом [82] було показано, що модель Фермі-Габбарда може бути розв'язана точно модифікованим середньопольовим підходом у граничному випадку $d \rightarrow \infty$. У цьому граничному випадку система зводиться до локальної задачі багатьох тіл, що описується одним вузлом («домішкою»), поєднаним з «зовнішним резервуаром», тобто просторові флуктуації стають замороженими, але динаміка системи залишається повністю збереженою. Тому такий підхід називається *динамічна* теорія середнього поля (ДТСП), *engl. – dynamical mean-field theory* (DMFT). Умови самоузгодженості ДТСП можна вивести різними способами. Підхід, запроваджений А. Жоржесом та Г. Котляром [83], який зараз розглядається в якості стандартного, використовує модель домішок Андерсона [84] для опису однієї комірки з узгодженою прив'язкою до зовнішнього резервуара. Домішкова модель Андерсона – це добре вивчений об'єкт у фізиці багатьох частинок, що має різні чисельні методи вирішення, такі як квантовий метод Монте-Карло, точна діагоналізація (*engl. – exact diagonalization*), чисельна перенормуюча група (*engl. – numerical renormalization group*), ітераційна теорія збурень, тощо.

Формулювання ДТСП. У наступних рядках ми представляємо лише основні рівняння ДТСП; для детального виведення див. [85]. Ключовою величиною, що надає інформацію про кореляції в системі багатьох тіл, є функція Гріна, див. також підрозділ 1.2. У рамках підходу ДТСП (без можливих кластерних розширень) можна отримати доступ до *локальної* функції Гріна,

$$G_{loc} \equiv G_{ii,\sigma}(\tau - \tau') = -\langle \hat{\mathcal{T}} \hat{c}_{i\sigma}(\tau) \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}(\tau') \rangle, \qquad (1.90)$$

де $\hat{\mathcal{T}}$ – оператор часового впорядкування, $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\tau)$ та $\hat{c}_{i\sigma}(\tau)$ є відповідними операторами створення та знищення ферміонів на вузлі ґратки *i* зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ у момент часу τ . Зауважимо, що функція Гріна, визначена рівнянням (1.90), відповідає двоточковому корелятору; аналогічним чином, локальні корелятори вищого порядку можуть бути визначені та ефективно отримані у ДТСП.

В рамках ДТСП використовується відображення оригінальної ґраткової задачі багатьох тіл на локальну задачу одного вузла, поєднаного з зовнішнім резервуаром, складеним усіма іншими вузлами. На відміну від класичної теорії середнього поля, ДТСП повністю враховує локальні квантові флуктуації. Користуючись таким відображенням, ми нехтуємо лише просторовими кореляціями, але задача на вузлі залишається задачею багатьох тіл: як функція уявного часу, вузол обмінюється частинками з резервуаром і, таким чином, зазнає переходу між чотирма можливими квантовими станами. Ця динаміка є важливою частиною коректного опису матеріалів із сильно корельованими електронами. Отже, належний гамільтоніан для цієї системи повинен включати не тільки локальні ступені вільності, але і зв'язок з резервуаром. Утотожнюючи окремий вузол з «домішковою орбіталлю», а резервуар з «зоною провідності», можна отримати гамільтоніан, який відповідає домішковій моделі Андерсона, engl. – Anderson impurity model (AIM) [84]:

$$\mathcal{H}_{\text{AIM}} = -\sum_{l,\sigma} \tilde{\varepsilon}_{l\sigma} \hat{a}_{l\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{l\sigma} + \sum_{l,\sigma} V_{l\sigma} (\hat{a}_{l\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma} + \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{l\sigma}) + U \hat{n}_{\uparrow}^{c} \hat{n}_{\downarrow}^{c} - \mu (\hat{n}_{\downarrow}^{c} + \hat{n}_{\uparrow}^{c}).$$
(1.91)

Тут оператори народження та знищення ферміонів $\hat{c}^{\dagger}_{\sigma}, \hat{c}_{\sigma}$ описують локальні ступені вільності та $\hat{a}^{\dagger}_{l\sigma}, \hat{a}_{l\sigma}$ описують набір невзаємодіючих ферміонів, що представляють ступені вільності ефективного резервуару, що діє на вузлі *i*, див. 1.90. Отже, перший доданок у гамільтоніані описує зовнішній резервуар, останні два члени описують домішковий вузол, а другий член характеризує з'єднання двох зазначених об'єктів. Орбіталі резервуара позначаються індексом *l*, а $\tilde{\varepsilon}_{l\sigma}$ and $V_{l\sigma}$ – так звані параметри Андерсона.

Наведена модель домішок являє собою систему відліку, яка використовується для представлення (нерозв'язної) оригінальної ґраткової задачі. Для такого представлення зручно навести рівняння ДТСП в рамках формалізму функціональних інтегралів. У такому формалізмі $c^{\dagger}_{\sigma}(\tau), c_{\sigma}(\tau)$ – не ферміонні оператори народження та знищення, а змінні Грассмана. Слід зауважити, що на відміну від ферміонних операторів, змінні Грассманна є абсолютно незалежними та не пов'язані між собою шляхом ермітового спряження. Інтегруючи ступені вільності резервуара, можна отримати ефективну дію суцільно для домішкової орбіталі:

$$S_{loc} = -\int_{0}^{\beta} d\tau \int_{0}^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger}(\tau) \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(\tau - \tau') c_{\sigma}(\tau') + U \int_{0}^{\beta} d\tau \ n_{\uparrow}(\tau) n_{\downarrow}(\tau).$$
(1.92)

 S_{loc} представляє ефективну локальну динаміку на вузлі, тобто описує флукту-

ації між чотирма квантовими станами, індукованими зв'язком з резервуаром. Фізично це можна інтерпретувати як ефективну амплітуду для народження ферміона на ізольованому вузлі в момент часу τ (ферміон приходить з зовнішнього резервуару) і знищення в момент τ' (ферміон повертається до резервуару). Енергія U додається кожного разу, коли вузол займається обидвома ферміонами одночасно. $\mathcal{G}_{0,\sigma}(\tau - \tau') - функція Гріна для ефективної локальної$ дії без врахування взаємодії, яка також називається «функція Вейса», оскількиїї можна інтерпретувати як квантове узагальнення ефективного поля Вейсав класичному випадку. Важлива відмінність полягає в тому, що в квантовомеханічному випадку це функція (уявного) часу, а не просто скаляр. Фур'єобраз такої функції має вигляд

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_{\sigma}(i\omega_n) \tag{1.93}$$

де ω_n – матсубарівська частота для ферміонів, що визначається як $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, а $\Delta_{\sigma}(i\omega_n)$ – гібридизаційна функція, що визначається параметрами Андерсона:

$$\Delta_{\sigma}(i\omega_n) = \sum_{l,\sigma} \frac{|V_{l\sigma}|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_{l\sigma}}.$$
(1.94)

Локальна функція Гріна має вигляд

$$G_{imp} \equiv G_{\sigma}(i\omega_n) = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^* Dc_{\sigma}[c_{\sigma}(i\omega_n)c_{\sigma}^*(i\omega_n)] e^{-S_{loc}}$$

зі статистичною сумою

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^* Dc_{\sigma} e^{-S_{loc}}.$$

Функція Вейса співвідноситься з локальною функцією Гріна рівнянням Дайсо-

$$\Sigma_{imp} \equiv \Sigma_{\sigma}(i\omega_n) \equiv \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_n) - G_{\sigma}^{-1}(i\omega_n), \qquad (1.95)$$

де $\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)$ – самоенергія.

До цього моменту запропоноване представлення не містить наближень. Мета полягає в тому, щоб знайти належні параметри Андерсона, щоб функція Гріна на домішці і локальна функція Гріна на вузлі ґратки збігалися. Тепер розглянемо повну взаємодіючу функцію Гріна ґратки, $G_{ij,\sigma}(\tau - \tau') \equiv -\langle Tc_{i,\sigma}(\tau)c_{i,\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle$. Її фур'є-образ записується як

$$G_{\sigma}(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k},i\omega_n)},$$
(1.96)

де $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – фур'є-образ оператора тунелювання, тобто, дисперсійне співвідношення для невзаємодіючої сильно зв'язаної моделі,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{j} t_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{i} - \mathbf{R}_{j})},\tag{1.97}$$

а $\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ – самоенергія ґраткової системи.

Підсумовуючи по **k**, можна отримати компоненту ґраткової функції Гріна на обраному вузлі, тобто фур'є-образ локальної функції Гріна *G*_{loc}:

$$G_{loc}(i\omega_n) \equiv \sum_{\mathbf{k}} G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

Тут наведено основне наближення ДТСП – припускається, що самоенергія ґраткової моделі збігається з самоенергією домішкової моделі. У реальному просторі це означає, що нехтуються всі нелокальні компоненти Σ_{ij} , а локальна

на:

вважається близькою до Σ_{imp} :

$$\Sigma_{ii} \simeq \Sigma_{imp}, \quad \Sigma_{i \neq j} \simeq 0$$
 (1.98)

Таке наближення базується на тому, що в межах нескінченного координаційного числа самоенергія стає суто локальною [82]. У ефективній моделі домішок локальна самоенергія визначається згідно рівняння Дайсона зі взаємодіючою функцією Гріна та функцією Вейса:

$$\Sigma_{imp} \equiv \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_{\sigma}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n)$$
(1.99)

Приймаючи домішкову самоенергію як ґраткову, локальна функція Гріна стає

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}.$$
 (1.100)

Використовуючи вираз для невзаємодіючої густини станів

$$D(\varepsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \qquad (1.101)$$

ії можна записати у наступному вигляді:

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \int d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu - \varepsilon - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}$$
(1.102)

Це рівняння є так званою умовою самоузгодженості. Для кожної частоти воно співвідносить динамічне середнє поле $\Delta_{\sigma}(i\omega_n)$ та локальну функцію Гріна $G_{\sigma}(i\omega_n)$. Зауважимо, що ґратка з її структурою входять лише через не взаємодіючу густину станів $D(\varepsilon)$.

Рівняння (1.92), (1.93), (1.95) і (1.102) утворюють повний набір функціо-

нальних рівнянь для функції Гріна на вузлі G_{σ} та функції Вейса $\mathcal{G}_{0,\sigma}$. Розрахунок починається з ініціалізації функції Вейса \mathcal{G}_0 та відповідних параметрів у домішковому розв'язувачі, що обраховує домішкову функцію Гріна G_{imp} та самоенергію $\Sigma_{imp} = \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1} - \mathcal{G}_{imp}^{-1}$. Самоенергія дозволяє виразити ґраткову функцію Гріна $G_{loc} \equiv G_{\sigma}(i\omega_n)$ згідно рівняння (1.102). Ґраткова функція Гріна G_{loc} потім підставляється у рівняння Дайсона для отримання оновленої функції Вейса, $\mathcal{G}_{0,\sigma(new)}^{-1} = \mathcal{G}_{loc}^{-1} + \Sigma_{imp}$. Якщо нова і попередня функції Вейса не збігаються, $\mathcal{G}_{0,\sigma(new)}$ використовується в якості початкової у домішковому розв'язувачі. Процедура повторюється до досягнення сходимості.

Домішковий розв'язувач – точна діагоналізація. Для вирішення задачі домішки в дисертаційній роботі здебільшого використовується метод точної діагоналізації [86]. Алгоритм зазвичай складається з наступних трьох етапів [85]: (i) Функція Вейса апроксимується дискретизованою версією:

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) \longrightarrow \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)^{(n_s)} = i\omega_n + \mu - \sum_{l=2}^{n_s} \frac{V_l^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}.$$
 (1.103)

Така заміна може розглядатися як проекція на обмежений функціональний підпростір, що містить усі функції виду (1.103) для заданого фіксованого n_s . З математичної точки зору це є задачею раціонального наближення функцій, яку можна вирішити різними алгоритмами. Реалізація проекції є найбільш вагомою частиною діагоналізації, і існуючі методи описані в огляді [85]. У цій дисертаційній роботі використовується підхід, запропонований в [86], що базується на мінімізації відстані L між \mathcal{G}_0 та n_s -орбітальною функцією $\mathcal{G}_0^{(n_s)}$, яка визначається як:

$$L_{\mathcal{G}} = \frac{|\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)^{(n_s)}|}{\omega_n}$$
(1.104)

(ii) Гамільтоніан Андерсона (1.91), що обмежени
й n_s орбітальними станами,

діагоналізується точно, і обчислюється функція Гріна $G(i\omega_n)$.

(iii) Згідно умов самоузгодження ДТСП, обчислюється нова функція \mathcal{G}_0 , яка в свою чергу апроксимується функцією $\mathcal{G}_0^{(n_s)}$ з новим набором параметрів Андерсона. Процес повторюється, поки не буде досягнутий збіжність для набору параметрів Андерсона. Слід зауважити, що функція \mathcal{G}_0 , отримана на попередньому кроці ітерації, взагалі не належить до цього підпростору, але її можна відобразити на цей підпростір.

Базисні стани скінченновимірного простору Гільберта для гамільтоніана Андерсона задано як

$$|n_1^{\uparrow}, n_2^{\uparrow}, \dots, n_{n_s}^{\uparrow}\rangle |n_1^{\downarrow}, n_2^{\downarrow}, \dots, n_{n_s}^{\downarrow}\rangle$$

$$(1.105)$$

де $n_l^{\sigma} = 0, 1, a \sum_l n_l^{\sigma} = n_{\sigma}$. Так як в стандартному формулюванні (1.91) \mathcal{H}_{AIM} не перемішує різні сектори $(n^{\uparrow}, n^{\downarrow})$, вони можуть бути діагоналізовані незалежно. Для такого гамільтоніану повна діагоналізація можлива для значень n_s порядку $n_s = 6$ або $n_s = 7$. При скінченній температурі функція Гріна обчислюється з повного набору станів $|i\rangle$ (з власними значеннями E_i) відповідно до

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{i,j} \frac{\langle i | \hat{c} | j \rangle \langle j | \hat{c}^{\dagger} | i \rangle}{E_i - E_j - i\omega_n} \left[e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j} \right]$$
(1.106)

де $\mathcal{Z} = \sum_{i} e^{-\beta E_{i}}$ – статистична сума. Самоенергія обчислюється з рівняння Дайсона (1.95) або використовується так званий «трюк Булли», що спирається на обчисленні чотириточкових функцій Гріна (див. детальніше у [87] та у підрозділі 3.2).

 $ДTC\Pi$ за можливості розділення на дві підґратки. Для дослідження антиферомагнітної фази формулювання ДТСП слід модифікувати, оскільки в цьому випадку не всі вузли ґратки є рівнозначними. Для простого випадку антиферомагнітного стану Нееля ми трактуємо ґратку як склад двох підґраток A і B з нееквівалентними самоенергіями $\Sigma_{\sigma}^{A} \neq \Sigma_{\sigma}^{B}$. В рамках підходу ДТСП задача домішки повинна вирішуватися двічі на двох сусідніх вузлах оригінальної ґратки.

Кінетична частина гамільтоніана може бути записана в термінах операторів народження та знищення частинок для підґратки $A(\hat{a}_{i\sigma}^{\dagger}, \hat{a}_{i\sigma})$ та $B(\hat{b}_{i\sigma}^{\dagger}, \hat{b}_{i\sigma})$:

$$\mathcal{H}_{kin} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} (\hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j\sigma} - \hat{b}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma})$$
(1.107)

а її фур'є-образ записується як

$$\mathcal{H}_{kin} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Psi}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} 0 \ \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} \ 0 \end{pmatrix} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}\sigma}$$
(1.108)

зі спінорами $\hat{\Psi}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} = (\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{b}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma})$ та $\hat{\Psi}_{\mathbf{k}\sigma} = (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma})^T$. Сума береться по всіх **k** у зменшеній зоні Бріллюена, а $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – дисперсійне співвідношення на двосторонній ґратці.

Функція Гріна тепер визначається матрицею

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{-1}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} \zeta_{\sigma}^A & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_{\sigma}^B \end{pmatrix}$$
(1.109)

де $\zeta_{\sigma}^{A/B} = i\omega_n + \mu - \Sigma_{\sigma}^{A/B}.$

Загалом обидві підґратки повинні бути враховані, тобто необхідно вирішити дві ефективні задачі домішки. Однак у простому стані Нееля має місце додаткова симетрія, яка зменшує зусилля обчислення: усі властивості на вузлі з підґратки A для спіна σ точно такі ж, як у відповідних величинах на вузлі з підґратки B для протилежного спіну $\bar{\sigma}$, тобто

$$\zeta_{\sigma}^{A} = \zeta_{\bar{\sigma}}^{B} \equiv \zeta_{\sigma}. \tag{1.110}$$

Таким чином, достатньо виконати обчислення лише для однієї з двох підґраток,

щоб загальний математичний опис залишився таким, як наведено вище. Єдина модифікація пов'язана з тим, що найближчі сусіди вузла *i* тепер є частиною іншої підґратки, що впливає на локальну функцію Гріна ґратки. Обрахування зворотньої матриці $G_{\mathbf{k}\sigma}$ та перетворення суми в інтеграл по енергії (з використанням невзаємодіючої густини станів) дає вираз для модифікованої умови самоузгодженості:

$$G_{\alpha\sigma} = \zeta_{\bar{\alpha}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{D(\varepsilon)}{\zeta_{\sigma}^{A} \zeta_{\sigma}^{B} - \varepsilon^{2}}$$
(1.111)

з індексом підґратки $\alpha = A, B$, та зворотнім $\bar{\alpha} = B, A$. Тут $\zeta_{\alpha\sigma} = i\omega_n + \mu_\sigma - \Sigma_{\alpha\sigma}$.

Врахування зовнішнього потенціалу пастки та узагальнення ДТСП для координатного простору. У системах ультрахолодних атомів в оптичних решітках наближення локальної густини атомів є особливо корисним для опису ефектів, спричинених наявністю (гармонічної) пастки. Наявність зовнішнього потенціалу порушує трансляційну симетрію ґраткової системи, що призводить до неоднорідної задачі. Однак, оскільки масштаб довжини додаткового потенціалу, як правило, достатньо великий порівняно з постійною ґратки, система може бути локально наближена до однорідної моделі Габбарда. У випадку простого гармонічного потенціалу, який зазвичай використовується в експериментах з ультрахолодними атомами, хімічний потенціал є функцією відстані **г** від центру пастки:

$$\mu(\mathbf{r}) = \mu_0 - V(\mathbf{r}) = \mu_0 - V_0 \cdot \mathbf{r}^2 \tag{1.112}$$

де $\mu_0 \equiv \mu(\mathbf{r} = 0)$ – значення хімічного потенціалу в центрі пастки. Всі локальні величини апроксимуються відповідними величинами для однорідної системи, наприклад, $n(\mathbf{r}) = n(\mu_0 - V(\mathbf{r})).$

Використання теорії функціоналу електронної густини (DFT) з ДТСП. Підходи, що використовують модельні гамільтоніани, здатні пояснити багато властивостей корельованих електронних (або атомних) систем. Однак такі підходи сильно обмежені у можливості опису реальних матеріалів через невизначеність у виборі параметрів моделі та технічну складність самої задачі кореляції. Реалістична теорія повинна враховувати чітку електронну та ґратчасту структуру систем. З цією метою теорія функціоналу електронної густини (*engl.* – *density functional theory* (DFT)) і, зокрема, її наближення локальної густини виявилися успішними і стали потужної методикою для матеріало-орієнтовних досліджень фізики твердого тіла [88]. Великою перевагою DFT та її наближення є те, що це – першопринципні (*ab initio*) підходи, які не потребують емпіричних параметрів в якості вхідних даних. Однак ця методика не враховує сильних короткодіючих взаємодій і, таким чином, не в змозі описати динаміку сильно корельованих електронів.

Ці взаємодоповнюючі підходи були з'єднані в один потужний *ab-initio* метод для дослідження реалістичних сильно корельованих систем: метод DFT+DMFT. У цій обчислювальній схемі першим кроком є обчислення звичайної зоонної структури в DFT. На наступному кроці кореляції враховуються взаємодією Габбарда та зв'язком Гунда. Отримані рівняння вирішуються чисельно в межах DMFT [89]. Метод DFT+DMFT не тільки відтворює результати DFT в границі слабкої кулонівської взаємодії U, але й правильно описує корельовану динаміку при переході метал-ізолятор. Отже, такий теоретичний підхід здатен враховувати фізику при всіх значеннях кулонівської взаємодії та рівня легування електронами або дірками.

Висновки до розділу 1

Незважаючи на оглядовий характер даного розділу, серед оригінальних результатів слід зазначити наступне. З метою використання результатів у подальших теоретичних дослідженнях в області квантового виродження газів бозонів і ферміонів, побудовано поліноміальне наближення для хімічних потенціалів в інтервалі температур, де ефекти обмінної взаємодії дають суттєвий внесок в залежності термодинамічних величин. Як приклад, розглянуто рівняння стану квантових газів, а також побудовані залежності ряду термодинамічних характеристик газів від температури. На представлених залежностях чітко видно ефекти прояву квантової статистики газів, а також відмінність в особливостях поведінки бозе- і фермі-газів в області температур, порівнянних з масштабами характерних енергій. Результати відповідних досліджень опубліковано в статті [3].

Окрім наведеної методології опису термодинамічних характеристик ідеальних газів за відсутності зовнішніх полів, розглянуто загальні положення лінійної теорії відгуку бозе-газів на зовнішнє збурення електромагнітним полем. Цей теоретичний підхід добре себе зарекомендував при описі явища уповільнення електромагнітних сигналів в газах атомів лужних металів. У дисертаційній роботі він надалі використовується задля теоретичного опису явища фільтрації оптичних сигналів та обміну енергією між релятивістськими зарядженими частинками та газом у стані бозе-конденсації.

Властивості квантових газів у присутності періодичних потенціалів ґраток представляють собою велике та активне поле для сучасних досліджень. Насамперед, це стосується систем, що можуть описуватися ґратковою моделлю Габбарда, яка не має точного розв'язку в загальному випадку при наявності взаємодії між фермі-частинками. Однак, існує ряд добре зарекомендованих теоретичних підходів: спіново-хвильовий підхід, розкладання в границі сильного зв'язку, середньопольовий підхід для ефективної бозонної моделі, динамічна теорія середнього поля, що, маючи власні межі застосовності, є потужними підходами для опису сучасних експериментів та передбачення нових ефектів в квантових газах. Наведені основні першопринципні та середньопольові методи використовуються в дисертаційній роботі для опису як ультрахолодних атомів в оптичних ґратках, так і вироджених електронних газів в кристалічних структурах оксидів кобальту. Розвитку зазначених теоретичних підходів та відповідному дослідженню зазначених явищ і присвячена дана дисертація.

РОЗДІЛ 2

БЛИЗЬКОКРИТИЧНІ ЯВИЩА В УЛЬТРАХОЛОДНИХ БОЗЕ-ГАЗАХ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ З ЗОВНІШНІМ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИМ ПОЛЕМ

2.1. Ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону в бозеконденсатах атомів лужних металів

Мотивація напряму досліджень. З класичної електродинаміки досить добре відомий той факт, що в оптичних характеристиках суцільних середовищ поблизу ліній поглинання (резонансів) існують ділянки з сильною дисперсією. Це означає, що на даних ділянках значення групової швидкості електромагнітного сигналу може бути на порядки менше швидкості світла у вакуумі. Однак до цього ефекту довгий час не приділялося значної уваги саме в зв'язку з тим, що електромагнітні імпульси на даних частотах практично повністю поглинаються середовищем. Головними причинами такого поглинання, як відомо, є велика густина конденсованої речовини, некогерентний її стан і сильне теплове розширення рівнів атомів, з яких складається середовище.

Ситуація сильно змінилася, коли в кінці минулого століття вчені змогли ефективно отримувати в розріджених парах атомів лужних металів новий стан речовини – Бозе-Ейнштейнівський конденсат (БЕК) [66, 67]. БЕК може бути отриманий в експериментальних умовах при наднизьких температурах – порядку сотні нанокельвін, див. [66, 67], і густини газів лужних металів $\nu \lesssim 10^{14}$ см⁻³. Таким чином, роль причин поглинання, пов'язаних зі взаємодією складових речовини і тепловим розширенням рівнів атомів значно знижується. У таких умовах, по суті, мова йде тільки про природну ширину рівнів енергетичної структури атомів. Більш того, Бозе-Ейнштейнівський конденсат, як відомо, є когерентним станом речовини, тобто, станом з практично однаковим поведінкою атомів. Ці обставини, пов'язані з фізичними характеристиками бозе-конденсату, а також з результатами ряду досліджень з квантової оптики, присвячених ефекту електромагнітної-індукованої прозорості (ЕІП) [90], створили передумови для експериментального спостереження явища істотного уповільнення світла в БЕК. Можливості прямого виміру зменшення групової швидкості поширення світлових сигналів в БЕК атомів натрію більш ніж в мільйон разів вперше були реалізовані в експерименті [91]. Була проведена реєстрація пройшли через БЕК лазерних імпульсів з характерними часом затримки і досить високою інтенсивністю по відношенню до інтенсивності первинного сигналу. Лазерні імпульси були налаштовані на резонансні переходи, відповідні компонентам D_2 лінії натрію.

У кандидатській дисертації автора [2], побудовано мікроскопічно теорію опису ефекту уповільнення світла в БЕК. Зокрема, проведені дослідження можливості уповільнення електромагнітних імпульсів в БЕК не тільки оптичного, а й мікрохвильового діапазону спектра, показана можливість керування груповою швидкістю світла за допомогою магнітного поля, вивчено вплив температурних ефектів на явище уповільнення світла в БЕК. Крім чисто академічного інтересу, явище сильного уповільнення світла в БЕК імовірно може бути використано для побудови малопотужних оптичних перемикачів, оптичних ліній затримки, детекторів магнітних полів і пристроїв для придушення шумів. У даному розділі досліджується остання з перелічених можливостей застосування даного фізичного ефекту. Таким чином, постає завдання про можливість використання атомарного БЕК як фільтру оптичних сигналів.

Слід пояснити тепер ту обставину, що у загальній формулі для діелектричної проникності (1.68) врахована можлива залежність різниці енергій $\Delta \varepsilon_{\alpha\beta}$ від зовнішнього магнітного поля B, $\Delta \varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \Delta \varepsilon_{\alpha\beta}(B)$. Зроблено це з наступних причин. Як вже зазначалося в розділі 1.2, в роботі [2] було показано, що використання в експерименті ЕІП зовсім не є необхідною умовою уповільнення електромагнітних імпульсів в БЕК. За відсутності сполучного лазера для спостереження сильного уповільнення світла в БЕК необхідно оптимально вибрати рівні атома лужного металу (в експерименті [91] використовувалися, як уже згадувалося, атоми натрію). На різницю енергій $\Delta \varepsilon_{\alpha\beta}$ між цими рівнями і налаштовується пробний лазер, імпульс якого сповільнюється в БЕК. Ефект уповільнення світла в БЕК тим сильніше, чим менше згадана різниця енергій. Але при виборі рівнів без використання сполучного лазера доводиться шукати оптимальний варіант, який забезпечував би при можливо меншій різниці енергій Δε_{αβ} якомога менше поглинання сигналу. У проведених теоретичних дослідженнях [2] було показано, що при пошуку такого оптимального вибору зручно використовувати рівні надтонкого розщеплення воднеподібного атома в присутності зовнішнього однорідного постійного магнітного поля (ефекти Зеємана, Пашена-Бака). Більш того, як показано в роботі [2], за допомоги такого магнітного поля можна управляти груповою швидкістю світла в БЕК. Обставини, пов'язані з таким оптимальним вибором рівнів, грають важливу роль і в цій роботі. З цієї причини, перш ніж перейти до основних результатів розділу, нижче наводиться матеріал, пов'язаний з надтонкою розщепленням рівнів атомів лужних металів (а саме, натрію) в зовнішньому постійному магнітному полі.

Надтонка структура атомів натрію у зовнішньому магнітному полі. При описі енергетичного спектру атомів лужних металів в присутності магнітного поля з урахуванням надтонкого розщеплення можна виходити з наступного гамильтоніана взаємодії (див. у зв'язку з цим, наприклад, [92]):

$$\hat{V} = A_{\rm hfs} \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}} + B_{\rm hfs} \hat{Q} + \mu_B (g_I \hat{I}_z + g_J \hat{J}_z) B, \qquad (2.1)$$

де $A_{\rm hfs}$ і $B_{\rm hfs}$ – константи надтонкого розщеплення, пов'язані з магнітодіпольним і електричним квадрупольним взаємодією ядра та валентного електрона, відповідно (для станів J = 1/2 $B_{\rm hfs} = 0$, див. [92]). Î і Ĵ у виразі (2.1) – оператори спина ядра і повного моменту електрона (векторна сума спина і орбітального моменту електрона), \hat{I}_z і \hat{J}_z – відповідні оператори проекцій даних величин на напрям зовнішнього магнітного поля, μ_B – магнетон Бора (в одиницях $\hbar = 1$) та, нарешті, g_I і g_J – відповідні фактори Ланде. Оператор \hat{Q} , в свою чергу, виражається через оператори $\hat{\mathbf{I}}$ і $\hat{\mathbf{J}}$ наступним чином:

$$\hat{Q} = \frac{3(\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 + \frac{3}{2}\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}} - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)2J(2J-1)}.$$
(2.2)

Відзначимо, що для частини енергетичного спектра, що відповідає рівням основного стану атомів лужних металів, можуть бути отримані аналітичні вирази. Відповідні поправки до енергетичного спектру знаходяться з рішення секулярного рівняння (див. докладніше в [65]) для матричних елементів гамільтоніана взаємодії (2.1), як це зроблено, наприклад, в роботі [2]. Для частини ж спектра, відповідної порушеними рівнями, часто досить складно знайти аналітичні вирази (наприклад, в разі, коли одному значенню проекції m_F відповідає більше двох квантових станів одного мультиплету з різними значеннями моменту F, $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{J}}$. У подібних випадках залежність енергії розщеплення від магнітного поля може бути знайдена тільки з використанням чисельних методів.

З такої позиції розглянемо далі залежність компонент D_2 лінії атома натрію від магнітного поля. Як можна помітити, дана лінія відповідає переходу між основним станом $3S_{1/2}$ і збудженим станом $3P_{3/2}$. З точки зору поставлених завдань нижче знадобиться структура розщеплення даних рівнів в магнітному полі з урахуванням надтонкої взаємодії (див. формули (2.1) і (2.2)).

Залежність рівнів надтонкої структури основного стану $3S_{1/2}$ (l = 0, J = 1/2) в інтервалі магнітного поля від нуля до 100 Гс наведено на рис. 2.1 Для надтонкої структури збудженого стану $3P_{3/2}$ (l = 1, J = 3/2) залежність енергії розщеплення від магнітного поля в інтервалі зміни магнітного поля від нуля до 100 Гс наведено на рис. 2.2



Рис. 2.1. Залежність енергії рівнів основного стану атома натрію від напруженості зовнішнього магнітного поля з $A_{\rm hfs} = 885.8~{\rm M}$ Гц, $g_J = 2.0~{\rm M}$ Гц/Гс, $g_I = -0.8~{\rm \kappa}$ Гц/Гс [92].



Рис. 2.2. Залежність енергії рівнів збудженого стану атома натрію від напруженості зовнішнього магнітного поля з $A_{\rm hfs} = 18.5~{\rm M}$ Гц, $B_{\rm hfs} = 2.7~{\rm M}$ Гц, $g_J = 1.3~{\rm M}$ Гц/Гс, $g_I = -0.8~{\rm \kappa}$ Гц/Гс [92].

Таким чином, резонансна D_2 лінія натрію в магнітному полі розпадається на досить велику кількість складових. Кожен з цих компонентів може бути отриманий з різниці енергії одного з порушених станів і енергії одного з основних станів з використанням правил відбору по квантовим числам F, m_F $(\Delta F = 0, \pm 1; \Delta m_F = 0, \pm 1)$. Відповідно до виду зміни проекції повного моменту атома зазвичай розрізняють лінійно або π -поляризоване світло ($\Delta m_F = 0$), а також *циркулярно* або σ^{\pm} -*поляризоване* світло ($\Delta m_F = \pm 1$). Так як в умовах експерименту зазвичай використовують лазер, який має певну поляризацію, для визначеності далі будемо вважати, що зовнішнє випромінювання має лінійну поляризацію. Тоді для такого випромінювання резонансними будуть частоти, відповідні переходам $\Delta F = 0, \pm 1; \ \Delta m_F = 0$). Залежність даних частот від магнітного поля може бути отримана з залежностей, наведених на рис.рис. 2.1 и 2.2. З огляду на вищевказані правила відбору, можна отримати залежність резонансних частот для π -переходів між підрівнями основного стану $3S_{1/2}$ зі значеннями повного моменту F = 2 і підрівнями збудженого стану $3P_{3/2}$ зі значеннями повного моменту F' = 1, 2, 3. Залежність даних компонент від напруженості магнітного поля представлена на рис. 2.3.

Необхідно відзначити, що з метою спрощення і наочності наведених графіків тут і нижче не наводяться залежності від напруженості магнітного поля компонентів D_2 лінії натрію, що відповідають переходам між підрівнями основного стану $3S_{1/2}$ зі значеннями повного моменту F = 1 і підрівнями збудженого стану $3P_{3/2}$ зі значеннями повного моменту F' = 0, 1, 2. Як легко бачити з рис. 2.1, за відсутності магнітного поля резонансні частоти для даних переходів будуть відстояти від резонансних частот, наведених на рис. 2.3 на величину, пропорційну енергії надтонкої розщеплення основного стану, $\nu_{\rm hf} \sim$ 1,8 ГГц. Так як нижче розглядається випадок, коли частота зовнішнього поля близька до резонансних частотах, представленим на рис. 2.3, то ефекти, пов'язані з наявністю зазначених компонентів в D_2 лінії натрію можуть позначатися при великих значеннях напруженості зовнішнього магнітного поля



Рис. 2.3. Залежність компонент D_2 лінії атома натрію від напруженості зовнішнього постійного магнітного поля. Переходи між станами з проекціями повного моменту $m_F = 1, 2$ позначені жирними лініями.

 $(B \sim 10^4 \ \Gamma c)$, або в разі надходження сигналу з великим значенням дисперсії ($\sigma \sim 1 \ \Gamma \Gamma \mu$, див. нижче). Так як дані випадки в рамках представленої роботи не розглядаються, то в подальших обчисленнях зручно обмежитися залежностями, представленими на рис. 2.3.

Початковий сигнал та вибір параметрів системи для його фільтрації. Скористаємося тепер результатами, представленими на рис. 2.1–2.3, щоб вибрати фізичні параметри системи з точки зору використання її для фільтрації в БЕК електромагнітних сигналів. Слід зазначити, що зважаючи на велику кількість компонентів надтонкого розщеплення спектру атомів лужних металів, може мати місце безліч різних варіантів для реалізації фільтрації початкового сигналу при його проходженні атомну хмару з БЕК. Ці варіанти залежать від виду розподілу інтенсивності початкового сигналу по частотах, розташування інтервалу частот корисного сигналу в частотному спектрі, поляризації сигналу, заселеності станів атомного спектру і т.д.). Для простоти припустимо, що зовнішнє випромінювання являє собою сигнал, спектральна густина якого $I_0(\omega)$ має нормальний (гаусовий) розподіл по частотах з центром ω_0 , відповідним різниці енергій збудженого рівня $3P_{3/2}$ натрію (без урахування надтонкої взаємодії) і верхнього рівня надтонкою структури $3S_{1/2}$ (так званий «верхній компонент» D₂ лінії). У представлених нижче розрахунках всі частотні залежності обраховуються для частоти ω , що розстроєна відносно ω_0 на $\delta \omega = \omega - \omega_0$, де $\omega_0 = \Delta \varepsilon_{\alpha\beta} (B = 0) + \frac{1}{4} \nu_{\rm hf}$, $|\alpha\rangle = |l = 0, J = 1/2\rangle, |\beta\rangle = |l = 1, J = 3/2\rangle$ і $\nu_{\rm hf} = 1,772$ ГГц. Дисперсію σ розподілу інтенсивності сигналу виберемо порядку величини надтонкого розщеплення збудженого стану $3P_{3/2}$ атома натрію. А саме, визначимо параметри початкового сигналу наступним чином:

$$I_0(\omega) = \frac{I_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-(\omega - \omega_0)^2/2\sigma^2\right],$$
(2.3)

де $\omega_0 = 508.848052$ ТГц і $\sigma = 50$ МГц. Слід зазначити, що зручність вибору таких параметрів відповідає тому факту, що центр розподілу ω_0 сигналу в даному випадку відповідає нульовому значенню поправки до частоти переходу за рахунок взаємодії (2.1), див. рис. 2.3.

Будемо припускати, що треба зробити з даного початкового зовнішнього електромагнітного сигналу, що потрапляє в БЕК, «корисний сигнал» з характерною шириною частотного інтервалу порядку 1/20 від всього частотного інтервалу сигналу. Схематичне зображення обраної системи і частотних характеристик вихідного сигналу показані на рис. 2.4.

Покажемо тепер на прикладі проходження обраного сигналу через двокомпонентний бозе-конденсат, що система, зображена на рис. 2.4, може бути достатньо зручною для виділення корисного сигналу з початкового. Під двокомпонентним БЕК в даному випадку розуміється бозе-конденсат, атоми якого можуть знаходитися тільки в двох квантовомеханічних станах (див. у зв'язку з цим [2] та розділ 1). Насправді це означає, що заселеність двох



Рис. 2.4. (а) Схема енергетичної структури атомів натрію з урахуванням надтонкого розщеплення (з метою наочності, не показані рівні стану $3P_{1/2}$). (б) Спектральна інтенсивність початкового сигналу (нормальний розподіл) і область, яку потрібно відфільтрувати від іншої частини сигналу (густе штрихування).

обраних квантовомеханічних станів повинна бути набагато більше заселеності інших квантовомеханічних рівнів атомів. У зв'язку з цим слід нагадати, що інтенсивність пробного електромагнітного сигналу, як уже зазначалося вище, повинна бути досить слабкою, щоб не приводити до істотної заселеності рівнів, додаткових до обраним (оцінки інтенсивності пробних лазерних сигналів для застосовності лінійної теорії відгуку наведені в [2]).

Будемо припускати, що інтенсивність зовнішнього однорідного магнітного поля з достатньою точністю (близько 0.1 Гс) може регулюватися в межах від 0 до 100 Гс. Відзначимо, що такі напруженості магнітних полів можуть забезпечуватися як магнітними пастками, в яких і відбувається процес бозеконденсації газу атомів, так і додатковими магнітами.

Слід підкреслити, що вибір квантовомеханічних станів атомів, що складають двокомпонентний БЕК, повинен визначатися, як мінімум, двома факторами: частотним місцем розташування корисного сигналу в частотному розподілі початкового сигналу і зручністю заселення двох обраних станів енергетичного спектра атомів для отримання відповідного конденсату.

Для демонстрації можливості використання БЕК як фільтра для електромагнітних сигналів виберемо в якості заселених одні з найбільш зручних станів з точки зору отримання двокомпонентного БЕК (див. у зв'язку з цим [93]), а саме стану $|1\rangle = |F = 2, m_F = 1\rangle$ і $|2\rangle = |F = 2, m_F = 2\rangle$. Дані стани на рис. 2.4(а) відзначені суцільними лініями. Таким же чином відзначені збуджені стани з аналогічними проекціями повного моменту. Підкреслимо, що при взаємодії системи з лінійно-поляризованим світлом переходи між станами з однаковими проекціями і будуть резонансними. Залежність же резонансних частот від магнітного поля для даного конденсату легко отримати з залежностей, представлених на рис. 2.3, виключивши нерезонансні частоти. В даному випадку резонансними будуть лише власні частоти, залежно яких від напруженості магнітного поля відмічені жирними лініями. Як буде показано нижче, внаслідок сильних залежностей резонансних частот від напруженості поля, навіть при обмеженні загальної задачі вибором двокомпонентного БЕК, можна домогтися реалізації можливості виділення корисного сигналу з вихідного в досить великому інтервалі його частот.

Відокремлення корисного сигналу за допомоги БЕК. Для ілюстрації останнього твердження попереднього параграфу виберемо напруженість зовнішнього магнітного поля порядку 25 Гс. З метою спрощення чисельних розрахунків будемо вважати густини атомів в заселених станах однаковими $\nu_1 = \nu_2 = 10^{12}$ см⁻³ (найбільш типове значення густини атомів в експериментах з БЕК, див., наприклад, [91]). Вважаючи також розміри конденсату L = 40 мкм, на основі формул (1.71) і (1.72) обраховано залежності, що представлені на рис. 2.5. З цих залежностей видно, що значна частина сигналу поглинається системою, однак цієї обставини ще недостатньо для вилучення необхідного сигналу. Для більш точного виділення корисного сигналу пропонується використання того факту, що різні частотні складові сигналу рухаються з різними груповими швидкостями. Дійсно, як можна помітити, завдяки явищу сильного уповільнення світла в БЕК (див. також [2]), різні компоненти будуть досягати приймача в різні моменти часу.

На рис. 2.6 представлена залежність часу затримки сигналу від частоти.



Рис. 2.5. Частотні залежності групової швидкості та інтенсивності сигналу при проходженні через двокомпонентний БЕК, складений зі станів $|F = 2, m_F = 1\rangle$ і $|F = 2, m_F = 2\rangle$.



Рис. 2.6. Частотні залежності часової затримки сигналу і його інтенсивності при проходженні через двокомпонентний БЕК. Реєстрація інтенсивності сигналу проводиться з 12 по 14 нс.

Таким чином, щоб отримати заданий сигнал, достатньо реєструвати минулий сигнал в чітко визначений інтервал часу. При цьому інші частини вихідного електромагнітного імпульсу переважно будуть або досягати приймача раніше встановленого часу (частоти, на яких має місце слабке уповільнення сигналу), або пізніше (частини сигналу, які сповільнюються ще сильніше). Для досліджуваного нами випадку (див. рис. 2.4) найбільш оптимальним часовим проміжком для вилучення сигналу є часовий проміжок з 12 по 14 нс. В результаті згаданих дій по «відокремленню» непотрібних компонент, можна отримати відповідний розподіл інтенсивності по частоті, який зображено в нижній частині рис. 2.6.

Відзначимо, що, незважаючи на досягнення досить високого рівня фільтрації сигналу, ефект можна ще збільшити за рахунок додаткового пропускання первинно відфільтрованого сигналу через подібну систему з БЕК, але з іншим значенням зовнішнього магнітного поля (або з іншими заселеностями рівнів основного стану). Покажемо це, припускаючи, що після проходження через фільтрувальну систему, що описана вище, сигнал додатково проходить через такий же конденсат, але для якого підтримується інша напруженість магнітного поля, наприклад, B = 40 Гс. Характерні залежності для такого випадку представлені на рис. 2.7. Як можна помітити, в даному випадку початковий імпульс практично повністю очищається від шуму (це легко побачити з порівняння рис. 2.7 і рис. 2.4, 2.5)). Таким чином, можна зробити висновок про досить вдалі характеристики газу атомів лужних металів в стані бозе-конденсату для фільтрації оптичних сигналів слабкої інтенсивності.

Слід зазначити, що згадане явище електромагнітної-індукованої прозорості (ЕІП) також відкриває додаткові можливості щодо зменшення рівня шумів в сигналах. До переваг використання ЕІП слід віднести можливість вилучення корисних сигналів з малою дисперсією без залучення додаткових методик з відсікання сигналу за часом затримки. З урахуванням сильних залежностей дисперсійних характеристик газу від магнітного поля цей факт значною мірою розширює діапазон зручних частот для отримання потрібного сигналу. Одним



Рис. 2.7. Частотні залежності часової затримки сигналу і його інтенсивності при проходженні через двокомпонентний БЕК. Реєстрація інтенсивності сигналу проводиться з 8 по 11 нс.

же з недоліків залучення ефекту ЕІП є постійна необхідність у використанні сполучного лазера, частота випромінювання якого повинна добре варіюватися.

2.2. Проходження релятивістської зарядженої частинки крізь атомарний БЕК

Зміни енергії зарядженої частинки в газі атомів. При прольоті через речовину зарядженої частинки кількість енергії, що поглинається середовищем (або віддається середовищем, див. нижче) в інтервалі частот $d\omega$ та інтервалі хвильових векторів $d\mathbf{k}$, визначається через дисперсійні характеристики системи загальною формулою [68]:

$$Q_{\omega \mathbf{k}} = -\frac{2}{(2\pi)^4} \operatorname{Im} \left(\frac{4\pi}{\omega \epsilon} |\mathbf{j}_{\parallel}|^2 + \frac{4\pi \omega |\mathbf{j}_{\perp}|^2}{\omega^2 \epsilon - c^2 k^2} \right), \qquad (2.4)$$
де **j**_{||} и **j**_⊥ – поздовжні і поперечні складові густини зовнішнього струму відносно напряму хвильового вектора **k**. Тут і далі в цілях скорочення формулювання магнітну сприйнятливість газу будемо вважати рівною одиниці.

Якщо зміна енергії частки невелика (нижче наводяться оцінки, що підтверджують дане наближення), то її рух можна вважати рівномірним. В даному випадку густина струму **j**, що входить у вираз (2.4), можна записати у вигляді:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = e\mathbf{v}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{v}t),\tag{2.5}$$

де e і **v** – заряд і швидкість частинки, відповідно, $\delta(x)$ – дельта-функція Дірака. Тоді перетворення Фур'є густини струму має вигляд:

$$\mathbf{j}(\omega, \mathbf{k}) = 2\pi e \mathbf{v} \delta(\omega - \mathbf{k} \mathbf{v}).$$

Підставляючи цю формулу в (2.4), після нескладних перетворень можна отримати вираз для зміни енергії частинки, що пролітає, за одиницю часу, $\mathcal{E}_{\omega \mathbf{k}} = -Q_{\omega \mathbf{k}}/T,$

$$\mathcal{E}_{\omega \mathbf{k}} = \frac{e^2 \omega}{\pi^2} \delta(\omega - \mathbf{k} \mathbf{v}) \operatorname{Im} \frac{v^2 / c^2 - 1/\epsilon}{\omega^2 \epsilon / c^2 - k^2}.$$
(2.6)

При цьому необхідно скористатися співвідношенням

$$\delta^2(\omega - \mathbf{kv}) = \frac{T}{2\pi} \delta(\omega - \mathbf{kv}), \qquad (2.7)$$

де *T* – час прольоту частинки крізь атомну хмару. Таким чином, сумарну зміну енергії частинки на одиниці відстані можна записати в такий спосіб:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = \frac{1}{v} \int d\omega d^3 k \mathcal{E}_{\omega \mathbf{k}}.$$
(2.8)

Слід зазначити, що в загальному випадку можуть відбуватися як втрати енергії зарядженою частинкою (уповільнення, $d\mathcal{E}/dx < 0$), так і прискорення частинки системою ($d\mathcal{E}/dx > 0$). Як можна побачити з формули (2.6), реалізація одного із зазначених варіантів для конкретної системи залежить від початкової швидкості частинки і дисперсійних характеристик середовища. Нижче досліджуються детально можливості реалізації цих варіантів в ультрахолодних газах атомів лужних металів при наявності фази з БЕК.

Слід зауважити, що розріджені гази атомів лужних металів навіть в області резонансних частот оптичних ліній мають близький до одиниці показник заломлення. Зокрема, зміна показника заломлення газу атомів натрію з густиною $\nu \sim 10^{12}$ см⁻³ в області частот, відповідних резонансній D_2 -лінії, є малим, $\Delta n \sim 0.01$. Тобто, в таких системах ефекти, зумовлені полюсом $1/\epsilon$ в виразі (2.6), будуть відсутні (так звані поляризаційні втрати). Однак, при дотриманні певних умов можливий внесок полюса $\omega^2 \epsilon - c^2 k^2 = 0$, який відповідає внеску ефекту Вавілова-Черенкова в зміну енергії частинки, що пролітає.

Слід підкреслити, що черенковське випромінювання в диспергуючому середовищі може відбуватися тільки в інтервалі частот, де виконується умова

$$n(\omega)\beta \ge 1,\tag{2.9}$$

де $\beta = v/c$,

$$n^{2}(\omega) = (\sqrt{\epsilon'^{2} + \epsilon''^{2}} + \epsilon')/2, \qquad (2.10)$$

 ϵ' и ϵ'' – дійсна і уявна частини діелектричної проникності, відповідно, $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$. Таким чином, можна прийти до висновку, що в середовищах з близьким до одиниці показником заломлення зміна енергії частинок за рахунок ефекту Черенкова можливо лише при релятивістських швидкостях частинок. Як показують нескладні оцінки, якщо показник заломлення газу в області резонансів досягає значення $n_{\text{max}} = 1.01$, то для спостереження зазначеного ефекту необхідно прискорювати частинки до швидкостей понад 0.99*c*, що відповідає лоренц-фактору $\gamma \approx 7$. Тобто, ефект Черенкова в досліджуваній системі може спостерігатися у релятивістських частинок, кінетична енергія яких, як мінімум, перевищує енергію спокою в кілька разів.

Для більш детального дослідження особливостей зміни енергії зарядженої частинки при її прольоті через атомарний БЕК скористаємося моделлю дворівневої системи. З цією метою зафіксуємо в формулі (1.65) індекси, що відповідають двом обраним станам, a = 1, b = 2 ($\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < 0$), і розглянемо випадок, коли частота можливого випромінювання близька до різниці енергій між даними рівнями. В результаті з (1.65) отримаємо

$$\epsilon(\mathbf{k},\omega) = \left[1 + \frac{4\pi}{k^2} |\sigma(\mathbf{k})|^2 \frac{(\nu_1 - \nu_2)}{\delta\omega + i\Gamma/2}\right]^{-1},\qquad(2.11)$$

де $\delta \omega$ – розстроювання частоти відносно резонансу, $\delta \omega = \omega - \varepsilon_1 + \varepsilon_2$; для скорочення запису в величинах $\sigma(\mathbf{k})$, $\delta \omega$ і Γ опущені парні індекси 1,2, що відповідають переходам в дворівневій системі. Після розкладання діелектричної проникності (2.11) на дійсну та уявну частини з використанням наближення $(\epsilon' - 1) \ll 1$, зміна енергії (2.6) може бути записано у вигляді:

$$\mathcal{E}_{\omega \mathbf{k}} \approx -\epsilon'' \frac{e^2 \omega^3 \beta^2}{\pi^2 c^2} \left[\left(\frac{\omega^2 \epsilon'}{c^2} - k^2 \right)^2 + \left(\frac{\omega^2 \epsilon''}{c^2} \right)^2 \right]^{-1}, \qquad (2.12)$$

де

$$\epsilon' = \frac{\delta\omega(\delta\omega + \alpha) + \Gamma^2}{(\delta\omega + \alpha)^2 + \Gamma^2}, \quad \epsilon'' = \frac{\alpha\Gamma}{(\delta\omega + \alpha)^2 + \Gamma^2}, \quad (2.13)$$

$$\alpha(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{k^2} |\sigma(\mathbf{k})|^2 (\nu_1 - \nu_2).$$
(2.14)

Вираз (2.12) містить важливу інформацію про характер зміни енергії зарядженої частинки при використанні моделі дворівневої системи. Як можна



Рис. 2.8. Залежності уявної частини діелектричної проникності атомарного газу від частоти в разі (а) нормальної заселеності і (б) інверсної заселеності в дворівневій системі.

помітити, знак $\mathcal{E}_{\omega \mathbf{k}}$ повністю визначається знаком уявної частини ϵ'' діелектричної проникності середовища. У свою чергу, дана величина пропорційна різниці заселеностей рівнів ($\nu_1 - \nu_2$) (див. (2.13) і (2.14)). Таким чином, приходимо до висновку, що можливі два різних види зміни енергії частинки. У середовищі з нормальною заселеністю ($\nu_1 > \nu_2$) спостерігатимуться черенковські втрати, $\mathcal{E}_{\omega \mathbf{k}} < 0$. У середовищі ж з інверсною заселеністю ($\nu_1 < \nu_2$) частинка буде прискорюватися конденсатом. Залежності уявної частини діелектричної проникності від розстроювання частоти відносно резонансного переходу для даних випадків представлені на рис. 2.8.

Далі, використовуючи формули (2.8) і (2.12), можна визначити повну зміну енергії частинки на одиниці відстані в околі резонансу. При обчисленні інтеграла в (2.8) необхідно також врахувати умову (2.9), що характеризує наявність ефекту Черенкова в системі. Після інтегрування по кутах і модулю



Рис. 2.9. Залежність показника заломлення атомарного газу від частоти. Штрихуванням позначено інтервал, в якому спостерігається ефект Вавілова-Черенкова.

хвильового вектора в результаті отримаємо вираз:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = -\frac{2e^2}{\pi v^2} \int_{\omega_l}^{\omega_r} d\omega \omega \epsilon''(\omega) \int_{0}^{\theta_0(\omega)} \frac{\sin \theta d\theta}{\cos^3 \theta} \left[\left(\epsilon' - \frac{c^2}{v^2 \cos^2 \theta} \right)^2 + \left(\epsilon'' \right)^2 \right]^{-1}, \quad (2.15)$$

де граничний кут $\theta_0(\omega)$ може бути знайдений з умови $n(\omega)\beta \cos \theta_0 = 1$, а границі $\omega_{l,r}$ визначають кінці інтервалу частот, на яких відбувається випромінювання. Дані величини знаходяться з рівняння $n(\omega_{l,r})\beta = 1$ (див. також рис. 2.9). Після обчислення внутрішнього інтеграла по полярному куту отримаємо:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = -\frac{e^2}{\pi c^2} \frac{\epsilon''}{|\epsilon''|} \int_{\omega_l}^{\omega_r} d\omega \omega \left\{ \operatorname{arctg} \left[\frac{\beta^2 (\epsilon'^2 + \epsilon''^2) - \epsilon'}{|\epsilon''|} \right] - \operatorname{arctg} \left[\frac{\beta^2 (\epsilon'^2 + \epsilon''^2) - n^2 \epsilon'}{|\epsilon''| n^2} \right] \right\}.$$
(2.16)

Таким чином, формула (2.16) описує зміну енергії зарядженої частинки на одиниці відстані в інтервалі частот, відповідних резонансному переходу в атомах, що утворюють БЕК. Щоб обчислити зміну енергії на всьому інтервалі частот, досить підсумувати окремі вклади резонансних переходів, в області яких при заданій швидкості частинки виконується співвідношення (2.9).

Щоб не захаращувати опис врахуванням великою кількістю переходів, оцінимо ефект в області одного резонансного переходу по порядку величини. Вважаючи, що різниця двох арктангенсів у виразі під інтегралом не перевищує числа π і є слабо мінливою функцією на інтервалі інтегрування, а також використовуючи наближення ($\omega_r - \omega_l$) $\approx \Gamma$, $\Gamma \ll \omega_0$, де ω_0 – частота випромінювання, що відповідає резонансному переходу, $\Gamma \equiv \Gamma_{12}$, отримаємо

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} \sim \frac{e^2}{c^2} \omega_0 \Gamma. \tag{2.17}$$

Якщо розглядати випадок прольоту вільного електрона через газ атомів лужних металів (наприклад, натрію), то, підставляючи значення резонансної D_2 лінії, $\Gamma \sim 10^8$ сек⁻¹ і $\omega_0 \sim 10^{15}$ сек⁻¹ в формулу (2.17), отримаємо $d\mathcal{E}/dx \approx 10^{-5}$ eB/см. Далі, вважаючи, що характерні лінійні розміри атомарних парів, в яких спостерігається перехід до фази з БЕК, порядку часток міліметра, легко оцінити, що зміна енергії електрона на одиничному резонансі в газі з БЕК $\Delta \mathcal{E}_{ab} \approx 10^{-7}$ eB.

Необхідно підкреслити, що, насправді, атоми являють собою багаторівневі системи, і, як уже зазначалося, зміна енергії буде відбуватися на всіх резонансних переходах, в околі яких дотримується умова (2.9). Однак, як видно навіть врахування великого (але кінцевого) числа переходів не призведе до значного зміні кінетичної енергії \mathcal{E}_0 частинки, так як при значенні лоренц-фактору $\gamma = 7$ отримуємо гранично мале співвідношення енергій, $\Delta \mathcal{E}_{ab}/\mathcal{E}_0 \sim 10^{-11}$.

Слід, однак, відзначити, що ефект може бути посилений при використанні газу з більш високою густиною (це призводить до збільшення площі заштрихованої області на рис. 2.9), а також при використанні багатозарядних іонів або ядер з зарядом Ze, що призведе до посилення ефекту в Z^2 разів.

Можливість прискорення частинки. Як показано вище, зміна енергії

частинки в даній системі є малою, і навряд чи зміни швидкості, пов'язані з ефектом Черенкова, можуть бути безпосередньо виміряні в разі розріджених газів з БЕК. Однак слід звернути увагу на принципову можливість прискорення зарядженої частинки внаслідок прольоту її крізь ультрахолодний розріджений газ.

Як уже зазначалося вище, прискорення частинки в рамках моделі дворівневої системи можливо при інверсній заселеності атомарних рівнів. Дане явище відповідає зворотньому ефекту Черенкова в досліджуваному газі. Фізичною інтерпретацією даного ефекту служить картина, коли заряджена частинка при прольоті стимулює перехід в атомах з верхнього рівня атома на нижній, причому надлишок енергії внаслідок даного процесу може передаватися зарядженій частинці.

Якщо ж враховувати наявність інших рівнів в атомах, можна зробити висновок, що на певних резонансних переходах частинка буде отримувати енергію від середовища, а на певних – втрачати. Таким чином, в результаті взаємодії з набором резонансних переходів частинка в загальному випадку буде втрачати енергію. Однак, як видно, спеціальним підбором швидкості частинки і заселеності строго визначених квантових станів в системі можна здійснити варіант, коли в цілому частинка буде прискорюватися системою. Зазначене явище можливе в системі, в якій для переходів з інверсною заселеністю станів умова (2.9) виконується, а для переходів з нормальною заселеністю – швидкості частки недостатньо для появи ефекту Черенкова (див. рис. 2.10), або ефект на даних переходах є більш слабким.

По всій видимості, найбільш вдалими квантовими станами для експериментальної реалізації даного ефекту можуть служити рівні надтонкого розщеплення основного стану атомів лужних металів. Це обумовлено їх великим часом життя в порівнянні з рівнями з відмінним від нуля орбітальним моментом. На цих мікрохвильових (радіочастотних) переходах при відповідному підборі заселеностей станів (див., наприклад, рис. 2.10) можливе прискорення



Рис. 2.10. Дисперсійні характеристики газу атомів натрію, в якому можливе прискорення частинки на резонансному переході з інверсною заселеністю. Для простоти ймовірності переходів Γ_{ab} обрані однаковими та рівними Γ , а $\nu_2 - \nu_1 = 2(\nu_2 - \nu_{3,4})$.

частинки. Якщо ж для підготовленої таким чином системи для верхніх (оптичних) переходів умова (2.9) не виконуватиметься, то, в цілому, частинка буде прискорюватися газом. У зворотному ж випадку, на мікрохвильових переходах частинка буде отримувати енергію (прискорюватися), а на оптичних – втрачати (сповільнюватися).

Також можлива реалізація ситуації, коли інверсна заселеність переходів здійснюється за допомогою оптичного накачування додатковими лазерами, налаштованими на резонансні переходи. Ефект в даному випадку може бути більш помітним у зв'язку з оцінками, наведеними у формулі (2.17). Однак, дисперсійні характеристики газу (1.65) в разі оптичного накачування не можуть бути розраховані в рамках цієї роботи. Це обумовлено тим, що опис впливу на систему додаткових лазерів, які змінюють заселеність квантових станів в системі, виходить за межі застосовності лінійної теорії відгуку (див. підрозділ 1.2).

Визначення спектральних характеристик атомів. За допомогою детектування та аналізу випромінювання Черенкова, викликаного прольотом зарядженої частинки через БЕК, можна, по всій видимості, визначати спектральні характеристики атомів, що утворюють конденсат. Зокрема, ефект може бути використаний для визначення природної ширини рівня Г. Дана величина може бути визначена як для оптичних (дипольно-дозволених) так і для мікрохвильових (дипольно-заборонених) переходів в атомах лужних металів. Питання про визначенні ширини рівнів основного стану може бути особливо актуальною з точки зору проведених експериментів по атомних годинниках [94].

Ідея методу полягає в тому, щоб визначити частоту, що відповідає максимуму показника заломлення в області обраного резонансного переходу. Це може здійснюватися за допомогою варіювання швидкості частинки, що пролітає. Як можна зробити висновок з рис. 2.9, при зменшенні швидкості частинки висота заштрихованої області зменшується, і в границі $1/\beta \rightarrow n_{\text{max}}$ отримуємо $\omega_{l,r} \rightarrow \omega_c$, $\omega_c = \omega(n_{\text{max}})$.

Тут і нижче обмежимося розглядом випадку області прозорості, тобто $|\epsilon''| \ll \epsilon' \approx 1$. Як нескладно переконатися, в нульовому наближенні за $(\epsilon''/\epsilon') \ll 1$ з (2.10) можна отримати $n(\omega) \approx \sqrt{\epsilon'(\omega)}$, звідки з умови максимуму, $\partial n/\partial \omega = 0$, і формули (2.11) отримуємо $\omega_c^{(0)} = \omega_0 - \Gamma/2$, а, отже,

$$\Gamma^{(0)} = 2(\omega_0 - \omega_c). \tag{2.18}$$

Таким чином, якщо за допомогою ефекту Черенкова визначено знаходження максимуму показника заломлення ω_c , і відома з достатньою точністю частота переходу ω_0 , може бути визначена ширина рівня.

Якщо ж частота переходу ω_0 не відома заздалегідь, ширину рівня можна визначити, використовуючи додатково умова $n_{\max} = 1/\beta$. Тоді, відповідно до виразу (2.13), отримаємо

$$\Gamma^{(0)} = \frac{\alpha(\mathbf{k})}{2(1/\beta - 1)}.$$
(2.19)

Таким чином, якщо відомий явний вигляд хвильової функції атома в двох певних квантових станах, то на підставі даного ефекту, відповідно до формул (1.66) і (2.19), можна визначити природну ширину рівня атома, пов'язану зі спонтанним переходом між обраними станами.

Слід зазначити, що при необхідності можна отримати більш точні вирази для природної ширини рівня, використовуючи поправки, які виходять із подальшого розкладання по теорії збурень по $(\epsilon''/\epsilon') \ll 1$ (як можна переконатися, це аналогічно наближенню $(|\alpha(k)|/\Gamma) \ll 1$). В результаті, після ряду математичних перетворень прийдемо до такої формули:

$$\Gamma^{(1)} = 2(\omega_0 - \omega_c) + 3\alpha(\mathbf{k})/2.$$
 (2.20)

Проводячи ж подібні розкладання при невідомій величині ω_0 , отримаємо:

$$\Gamma^{(1)} = \frac{\alpha(\mathbf{k})}{2(1/\beta - 1)} \left[1 - \frac{(1/\beta - 1)}{2} \right].$$
 (2.21)

Необхідно підкреслити, що на підставі ефекту Черенкова в БЕК можна визначати і інші характеристики системи. Якщо, наприклад, природна ширина рівня є відомою величиною, можна представленим способом визначити частоту переходу, густину атомів в системі, які перебувають в певному квантовому стані, або швидкість частинки, що пролітає крізь газ.

2.3. Відсутність особливостей в явищі уповільнення світла в околі фазового переходу до стану з БЕК

Функції Гріна ідеального бозе-газу вище температури БЕК. Завдяки отриманим в розділі 1.1 явним залежностям хімічного потенціалу від температури з'являється можливість вивчення температурної поведінки дисперсійних характеристик ідеальних газів на всьому інтервалі температур. Нижче температури БЕК, $T \leq T_0$ такі залежності детально було викладено в кандидатській дисертації автора [2], тому нижче приводяться формули для випадку $T > T_0$, де у формулі (1.62) $G^{(c)}(\mathbf{k}, \omega) = 0$, а завдяки $\mu(T) \neq 0$ функція Гріна нормальної компоненти записується у вигляді

$$G^{(n)}(\mathbf{k},\omega) = (2\pi\hbar)^{-3} \times \sum_{\alpha,\beta} |\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})|^2 \int_0^\infty \frac{2\pi p^2 dp}{\exp\{[\varepsilon_p - \mu(T)]/T\} - 1} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\delta\omega_{\alpha\beta} + pky/m + i\gamma_{\alpha\beta}}, \quad (2.22)$$

Далі, використовуючи формули (1.68), (1.11) та (2.22), можна дослідити явище уповільнення світла в околі точки фазового переходу до стану з БЕК. Покажемо це нижче на прикладі газу атомів, внутрішні ступені вільності яких можуть бути описані трирівневою системою.

Уповільнення світла для трирівневої системи в околі фазового переходу до стану з БЕК. Задля обрахування дисперсійних характеристик вище температури переходу до стану з БЕК у трирівневій системі, умовно зображеній на рис. 2.11(а), наведемо вирази для дійсної та уявної частини функцій Гріна (2.22), G_1 та G_2 , відповідно. В цьому випадку, згідно з загальною методологією (див. також [2] для деталей), вони запишуться як

$$G_1 = bt[I'(\Delta + \Omega, t; b) + I'(\Delta - \Omega, t; b)],$$

$$G_2 = bt[I''(\Delta + \Omega, t; b) + I''(\Delta - \Omega, t; b)],$$
(2.23)



Рис. 2.11. (а) Схематичне зображення трирівневої атомної системи. Залежності показника заломлення (б) та декременту загасання (в) від розстроювання частоти для трьох значень температури газу.

де I'і I''при довільному хімічному потенціалі μ визначаються як

$$I'(w,t) = \int_{0}^{\infty} \frac{xdx}{e^{x^{2}-\nu} - 1} \ln \left| \frac{1 + [w + x(\kappa\sqrt{t})]^{2}}{1 + [w - x(\kappa\sqrt{t})]^{2}} \right|,$$

$$I''(w,t) = 2 \int_{0}^{\infty} \frac{xdx}{e^{x^{2}-\nu} - 1} \left\{ \operatorname{arctg} \left[w - x(\kappa\sqrt{t}) \right] - \operatorname{arctg} \left[w + x(\kappa\sqrt{t}) \right] \right\}.$$
(2.24)

Тут $b = [\kappa \sqrt{\pi} \zeta(3/2)]^{-1},$

$$\kappa = \frac{\hbar k}{\gamma} \sqrt{\frac{2T_0}{m}} \sim \frac{\hbar k}{\gamma m} \hbar \nu^{1/3}, \qquad (2.25)$$

 $\Delta = \delta \omega / \gamma$ – відносне розстроювання частоти, $t = T/T_0$ та $\nu = \mu/T_0$ – відносна температура та хімічний потенціал, відповідно (T_0 та ν визначаються згідно з (1.3), (1.11)), $\Omega = \Delta \varepsilon_{\rm mag} / (2\gamma)$, $\Delta \varepsilon_{\rm mag}$ – різниця енергій між збудженими станами (див. рис. 2.11(a)).

Наведені функції Гріна (2.23) дозволяють обрахувати діелектричну про-

никливість газу (1.64) на всьому інтервалі температур. Для трирівневої системи такий зв'язок можна записати як

$$\epsilon'(\mathbf{k},\omega;t) = \frac{1+aG_1}{(1+aG_1)^2 + (aG_2)^2}, \quad \epsilon''(\mathbf{k},\omega;t) = \frac{-aG_2}{(1+aG_1)^2 + (aG_2)^2}, \quad (2.26)$$

де $a = 4\pi |\sigma_{12}(\mathbf{k})|^2 \nu / k^2 \gamma.$

Для чисельних розрахунків величину $|\sigma_{12}(\mathbf{k})|^2$ в разі дозволених дипольних переходів, як і раніше, можна оцінити виразом $|\sigma_{12}(\mathbf{k})|^2 \approx k^2 d^2/3$ (див. також (1.69)), що призводить до $a \approx 4.19 d^2 \nu / \gamma$. Якщо взяти $d^2 \approx S_{FF'}(3.52er_0)^2$ $(r_0 -$ радіус Бора, e - елементарний заряд, $S_{FF'}$ – відносна інтенсивність переходу $F \leftrightarrow F'$ [92]), F = 2, F' = 2 і $S_{22} = 1/4$ для густини газу $\nu = 5 \times 10^{12}$ см⁻³ та, відповідно до формули (2.25), отримаємо a = 0.052, $\kappa = 0.016$ та b = 13.46. Слід зазначити, що при $\kappa < 1$ дисперсійні характеристики практично не змінюються в околі фазового переходу до стану з БЕК, t = 1. Тому, для розрахунків використовуються вищі значення κ , при яких ефект становиться помітним. Не змінюючи значення усіх інших параметрів, відповідно до співвідношення (1.70), наведено залежності дисперсійних характеристик середовища, що зображені на рис. 2.11(б),(в).

Наостанок, покажемо як змінюються групова швидкість та інтенсивність пройденого світла в залежності від наведеного параметра κ та температури. Відповідно до формул (1.71) та (1.72), отримаємо залежності, що зображені на рис. 2.12. Таким чином, можна безпосередньо побачити, що перехід до стану з БЕК та відповідний когерентний стан атомів не є визначальними в явищі уповільнення світла. Дисперсійні характеристики та їх сприйнятливість до термальних флуктуацій, в першу чергу, визначаються формулою (2.25). Саме коли відповідні характеристики як газу в цілому, так і внутрішні характеристики атомів та зовнішнього випромінювання стають такими, що $\kappa > 1$, охолодження до температур характерних для квантового виродження газу є доцільним.



Рис. 2.12. Залежності групової швидкості та інтенсивності пройденого сигналу від температури газу для трьох значень параметру *к*.

Висновки до розділу 2

Результати досліджень, представлених у даному розділі, опубліковано в статтях [4–8]. Серед основних результатів в якості висновків можна виділити наступні:

• Продемонстровано можливість фільтрації світлових сигналів за допомоги ультрахолодного газу атомів лужних металів у стані з конденсатом Бозе-Ейнштейна. Фільтрація імпульсів оптичного діапазону обумовлена резонансною взаємодією світлового імпульсу з газом в фазі з БЕК. В результаті цієї взаємодії частина компонентів початкового імпульсу поглинається системою, інші ж компоненти рухаються з різними значеннями груповий швидкості, частина з яких сильно уповільнюються. Останні з них можуть бути ефективно вилучені при використанні спеціальних методів відсікання сигналів за часом затримки.

• Показано, що в разі заздалегідь відомого інтервалу частот, в якому розташований «корисний» сигнал, останній можна ефективно виділити за допомогою відповідного підбору фізичних характеристик системи. Рецепт такого підбору характеристик може бути отриманий на основі першопринципних підходів і аналізу зеєманівського розщеплення надтонких компонентів основного і збудженого рівнів атомів лужних металів. Можливість фільтрації електромагнітного сигналу продемонстрована в окремому випадку, а саме для двокомпонентного БЕК атомів натрію, що взаємодіє з лінійно-поляризованим компонентом D₂ лінії натрію. В силу достатньої універсальності запропонованого підходу не складає труднощів зробити обчислення і для інших випадків, в яких використовуються зріджені пари інших атомів лужних металів, інші густини атомів, поляризації електромагнітних сигналів, спектральні розподілу інтенсивності та напруженості зовнішнього магнітного поля.

• У розділі також досліджено ефекти, пов'язані з проходженням зарядженої частинки крізь бозе-конденсат газів атомів лужних металів. Показано, що для появи ефекту Вавілова-Черенкова в досліджуваній системі частинки повинні мати високу (релятивістську) швидкість, так як в розріджених газах показник заломлення близький до одиниці в області резонансних частот. Ефект гальмування (прискорення) частинки в таких системах є малим. Досліджено принципову схему випадку, коли релятивістська частка може додатково прискорюватися розрідженим газом, атоми якого знаходяться при температурі, близькій до абсолютного нуля.

• Вивчено можливості визначення спектральних характеристик атомів на підставі ефекту Черенкова в газі з БЕК. Показано, що за допомоги варіювання швидкості частинки і визначення таким чином максимуму показника заломлення газу, може бути визначена природна ширина рівнів, якщо відомі додаткові спектральні або мікроскопічні характеристики атомів.

• Теоретичний опис дисперсійних характеристик газів узагальнено на випадок температур вищих за температури переходу газів до стану з БЕК. На прикладі трирівневої системи показано, що у випадках, що відповідають експериментам з ультрахолодними атомами лужних металів, сам стан з БЕК не є визначальним, а явище уповільнення світла може спостерігатися в газах атомів при температурах, що набагато перевищують критичні.

РОЗДІЛ З

МАГНІТНЕ ВПОРЯДКУВАННЯ ДВОКОМПОНЕНТНИХ ФЕРМІ-ГАЗІВ В ОПТИЧНИХ ҐРАТКАХ

3.1. Переваги ультрахолодних сумішей фермі-атомів з різними масами для досягнення магнітного впорядкування в оптичних ґратках

Мотивація досліджень. В останні роки ультрахолодні атоми в оптичних ґратках стали дуже зручною і потужною системою для квантового моделювання матеріалів відомих з фізики конденсованої речовини [69, 70, 95]. У багатьох випадках ці гази демонструють навіть багатшу фізику, ніж твердотільні системи. Незважаючи на те, що в останні кілька років було досягнуто приголомшливого прогресу в реалізації різних явищ у таких квантових системах багатьох частинок, досягнення ряду квантових фаз, присутніх у фізиці конденсованої речовини, все ще представляє серйозні виклики для експериментів з ультрахолодними газами. Однією з таких проблем є досягнення та вивчення магнетизму в оптичних ґратках. Значного прогресу у цьому контексті було досягнуто в експерименті [96] із ультрахолодним газом атомів ⁴⁰К в двох різних квантових станах надтонкого розщеплення.

Теоретична модель та особливості опису. У цьому підрозділі зосередимось на двокомпонентних сумішах ферміонів, що відштовхуються між собою, з дисбалансом амплітуд тунелювання, які можна реалізувати, наприклад, використовуючи ультрахолодні атоми ⁶Li та ⁴⁰К [97] або інші лужноземельні атоми [98] в оптичних ґратках, а також за допомоги спеціальних ґраток, які діють на різні квантові стани надтонкої структури атомів з різною інтенсивністю [99]. Нижче зосередимось на гамільтоніані Фермі-Габбарда наступного типу:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t_A \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j + \text{H.c.}) - t_B \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j + \text{H.c.}) + U \sum_i \hat{n}_{iA} \hat{n}_{iB} + \sum_i \sum_{\alpha = A,B} (V_i - \mu_{\alpha}) \hat{n}_{i\alpha}, \qquad (3.1)$$

де t_A і t_B – амплітуди тунелювання компонент A і B, відповідно. Позначення $\langle i, j \rangle$ вказує на підсумовування по найближчих сусідніх вузлах, а U – амплітуда локальної взаємодії між двома типами атомів з відповідними операторами густини \hat{n}_{iA} і \hat{n}_{iB} . В останньому доданку V_i – це амплітуда зовнішнього (наприклад, гармонічного) потенціалу на вузлі ґратки i, а μ_{α} – хімічний потенціал компонента α (у цьому підрозділі обмежимося випадком $\mu_A = \mu_B = \mu$). Гамільтоніан (3.1) відповідає однозонному наближенню; іншими словами, нижче досліджується випадок досить сильного потенціалу ґратки, $V_{\text{lat}} \gtrsim 5E_r$. Таким чином, амплітуди тунелювання t_{α} задаються відповідно до [100] як

$$t_{\alpha} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} E_{r\alpha} v_{\alpha}^{3/4} \exp\left(-2\sqrt{v_{\alpha}}\right), \qquad (3.2)$$

де $v_{\alpha} = V_{\text{lat}}^{(\alpha)}/E_{r\alpha}$ – відносна глибина оптичної ґратки, $E_{r\alpha} = \hbar^2 k^2/2m_{\alpha}$ – енергія віддачі атома, k – хвильове число, яке визначається довжиною хвилі лазера, що утворює оптичну ґратку, а m_{α} – маса атому α . Амплітуда потенціалу ґратки $V_{\text{lat}}^{(\alpha)}$ може бути різною для двох компонентів $V_{\text{lat}}^{(A)} \neq V_{\text{lat}}^{(B)}$, що призводить до можливості реалізувати дисбаланс в амплітудах тунелювання навіть для різних станів надтонкої структури одного атома ($m_A = m_B$) [99].

Використовуючи перетворення Шріффера-Вольфа в границі сильного зв'язку $t_{A,B} \ll U$ в околі заповнення зони наполовину, $n_{iA} + n_{iB} \approx 1$ (див. також підрозділ 1.3.3), гамільтоніан (3.1) може бути відображено на ефективний спіновий гамільтоніан [101, 102]. Для досліджуваної системи таке перетворення призводить до анізотропної моделі Гейзенберга,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = J_{\parallel} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^Z \hat{S}_j^Z + J_{\perp} \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{S}_i^X \hat{S}_j^X + \hat{S}_i^Y \hat{S}_j^Y), \qquad (3.3)$$

з константами магнітного зв'язку

$$J_{\parallel} = 2(t_A^2 + t_B^2)/U, \quad J_{\perp} = 4t_A t_B/U.$$
(3.4)

Слід зауважити, що тут і нижче всі «магнітні» характеристики відносяться до псевдоспіну, утвореного з двох різних типів ферміонів (A i B), що відповідає операторам спіну $\hat{S}_i^Z = (\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i - \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i)/2$ і $(\hat{S}_i^X + i \hat{S}_i^Y) = \hat{a}_i^{\dagger} \hat{b}_i$. Таким чином, слід зазначити, що анізотропія в спіновій моделі не пов'язана з фактичними просторовими напрямами або осями квантування в оригінальній оптичній ґратці.

Як легко побачити, за наявності дисбалансу амплітуд тунелювання, тобто $t_A \neq t_B$, антиферомагнітний зв'язок J_{\parallel} (у напрямку Z) завжди більший, ніж зв'язок J_{\perp} (у площині XY). Слід зауважити, що в границі великого дисбалансу амплітуд, $|t_A - t_B| \rightarrow (t_A + t_B)$, має місце велика анізотропія, $J_{\parallel} \gg J_{\perp}$; таким чином, другий член у гамільтоніані (3.3) може розглядатися як збудження, що ефективно призводить до відомої моделі Ізінга. Тому дисбаланс амплітуди тунелювання можна трактувати як параметр, який ефективно зменшує квантові флуктуації у досліджуваній системі. Як показано нижче, це зменшення призводить, зокрема, до відносного збільшення впорядкованої області навіть для більших значень амплітуд тунелювання $t_{\alpha} \sim U$.

Необхідно зазначити, що наведене вище відображення на ефективну спінову модель представлено з метою кращого фізичного розуміння системи, що досліджується. Звісно, для кількісних теоретичних розрахунків у проміжній області значень зв'язку ($t_{\alpha} \sim U$) необхідно використовувати непертурбативні чисельні методи в поєднанні з повним гамільтоніаном (3.1). Нижче застосовується динамічна теорія середнього поля (див. підрозділ 1.3.5) для дослідження впливу стрибкового дисбалансу на упорядковані фази в сумішах ультрахолодних газів фермі-атомів.

Перш ніж зануритися в деталі, введемо параметри, корисні для подальшого аналізу: середню амплітуду тунелювання $t = (t_A + t_B)/2$ та безрозмірний параметр дисбалансу амплітуд тунелювання $\Delta t = (t_A - t_B)/(t_A + t_B)$. Якщо не вказано інше, нижче вважаються атоми типу A легшими, ніж атоми типу B $(t_A \ge t_B)$, так що введений параметр дисбалансу є позитивним, $\Delta t \in [0, 1]$.

Результати з магнітного впорядкування. Для вивчення двостороннього типу впорядкування, такого як в антиферомагнитне (АФМ), в однорідній системі необхідно розглянути двоскладову конфігурацію з відповідними умовами самоузгодження ДТСП (див. детальніше підрозділ 1.3.5). Така ж конфігурація була використана в дослідженнях ДТСП двокомпонентних масивнозбалансованих сумішей ферміонів зі взаємодією тяжіння (U < 0) у роботі [103]. Необхідно зауважити, що фізичні величини, що обчислюються на відповідних підґратках, на відміну від збалансованої суміші ($t_A = t_B = t$), не можуть бути безпосередньо пов'язані з величинами, що відповідають двом різним видам, як наведено у формулі (1.110). Натомість, функції Гріна визначаються відповідно до виразу (1.111) як

$$G_{s\alpha}(i\omega_n) = \zeta_{\bar{s}\alpha} \int \frac{D(\epsilon)d\epsilon}{\zeta_{1\alpha}\zeta_{2\alpha} - \epsilon^2},$$

де $s = \{1,2\}$ і \bar{s} – індекс підґратки та протилежний ньому, відповідно, $\zeta_{s\alpha} = i\omega_n + \mu_\alpha - \Sigma_{s\alpha}(i\omega_n)$, частота Мацубари, що відповідає температурі T, $\omega_n = \pi (2n+1)T$ з $n \in \mathbb{Z}$, самоенергія $\Sigma_{s\alpha}(i\omega_n)$ несе інформацію про внесок локальної взаємодії, а $D(\epsilon)$ – відповідна густина станів (в даному підрозділі наводяться результати для кубічної або квадратної геометрії ґратки). Для розв'язку задачі домішки використовується метод точної діагоналізації (див. підрозділ 1.3.5). Для певних значень параметрів результати також перевірено



Рис. 3.1. (а) Критичні температури для неелівського впорядкування в моделі Габбарда при різних значеннях параметра дисбалансу амплітуд тунелювання в кубічній ґратці, що обчислені ДТСП. (б), (в) Контурні графіки, що вказують на абсолютне значення намагніченості $m_{\text{stag}} = |n_{Ai} - n_{Bi}|$ для збалансованого (б), $\Delta t = 0$, і максимально незбалансованого тунелювання (в), $\Delta t = 1.0$, компонентів суміші.

за рахунок обчислень, що використовують інші високоточні числові алгоритми, такі як метод Монте-Карло безперервного часу [104] та метод чисельної перенормуючої групи [105] для відповідної задачі домішок.

Зосередимось спочатку на випадку однорідної системи з заповненням зони наполовину, $\mu = U/2$. При низьких температурах основний стан має неелівське (антиферомагнітне) впорядкування. Відповідна фазова діаграма, отримана ДТСП для кубічної ґратки, зображена на рис. 3.1. Можна зробити висновок, що зазначений дисбаланс призводить до відносного підвищення критичної температури. В границі сильного зв'язку ($U \gg t$) такий результат можна також отримати з середньопольового значення температури Нееля в моделі Гейзенберга, $T_N = 6JS(S+1)/3$ [106], де S – значення спіну ферміонів. Беручи $J = J_{\parallel} = 2(t_A^2 + t_B^2)/U$, отримуємо для константи U/t співвідношення $T_N(\Delta t)/T_N(0) = 1 + \Delta t^2$.

Також можна провести аналогічні обчислення для двовимірної системи з квадратною геометрією ґратки. Слід підкреслити, що теорема Мерміна-Вагнера, яка виключає далекий тип впорядкування при ненульовій температурі в низьковимірному просторі ($d \leq 2$) для безперервних симетрій, застосовна лише для симетрії обертання гамільтоніану (3.3) в площині XY. Таким чином, для $J_{\parallel} > J_{\perp}$ таке Z-антиферомагнітне впорядкування є дозволеним [106]. Можна переконатися, що навіть для d = 1 [107] спектр збуджень (магнонів) має енергетичну щілину $\Delta \propto (J_{\parallel} - J_{\perp})$. Це захищає систему від нескінченної кількості низькоенергетичних збуджень, які руйнують антиферомагнітний порядок у збалансованій ($t_A = t_B$) системі при T > 0 у $d \leq 2$. Незалежно від того, є дисбаланс тунелювань чи ні, критичну температуру в d = 2 можна визначити, якщо використовується підхід середнього поля (або ДТСП, яка застосовується тут). Результати щодо залежності температури переходу від параметра дисбалансу та сили взаємодії аналогічні залежності для кубічної ґратки, як показано на рис. 3.1, але з меншими значеннями критичної температури; наприклад, можна отримати max $[T_c^{2d}(\Delta t = 0)] \approx 0.39t$ і max $[T_c^{2d}(\Delta t = 1)] \approx 0.45t$.

Слід зазначити, що дані, отримані для перехідних температур у граничному випадку суміші з однаковими амплітудами тунелювання ($\Delta t = 0$), кількісно узгоджуються з результатами, представленими у роботах [108–110], де також використовували ДТСП. Також добре встановлено, що в збалансованому випадку ДТСП завищує критичну температуру для помірних та великих амплітуд локальної взаємодії (U/t > 5) порівняно з точними квантовими моделюваннями Монте-Карло [111, 112] та кластерними наближеннями (для кількісного порівняння див. [113]). Однак в границі сильного зв'язку наявні розрахунки для спінових моделей Гейзенберга [114] та Ізінга [115] показують, що якісне збільшення T_c за рахунок незбалансованої суміші буде навіть посилено при використанні більш точних методів, таких як Монте-Карло обчислення. Є підстави вважати, що така поведінка зберігається і для проміжних значень амплітуди взаємодії.

Також можна здобути важливу інформацію з фазової діаграми, де амплітуди тунелювання різних компонентів є відповідними змінними, що представлена на рис. 3.2 (аналогічні діаграми для бозе-газів наведені у [116, 117]). Вона містить інформацію як про магнітне впорядкування, так і про провідні



Рис. 3.2. Фазова діаграма двокомпонентної суміші фермі-атомів, отриманої ДТСП при температурі T = 0.4t для кубічної геометрії оптичної ґратки. Контурні графіки праворуч вказують на абсолютне значення намагніченості m_{stag} , параметр хвилі густини заряду $c = \overline{|D-K|}/\overline{(D+K)}$ і усереднену подвійну заселеність \overline{D} , де усереднення проводиться по підґраткам s = 1, 2.

(локалізаційні) властивості системи. Фаза Нееля характеризується параметром порядку – змінною намагніченістю, що еквівалентна хвилі густини спіну. Однак з рис. 3.2 також видно, що в суміші, що не збалансована, має місце додатковий тип порядку – *хвиля густини заряду* (ХГЗ), амплітуда якої, як правило, відмінна від нуля всередині АФМ-впорядкованої фази за винятком випадку рівних амплітуд тунелювання, $t_A = t_B$ (збалансована суміш), де така хвиля зникає. Щоб визначити, чи перебуває система у металевому чи ізоляційному стані при половинному заповненні зони, можна обрахувати як подвійну заселеність, $D_i = \langle \hat{n}_{Ai} \hat{n}_{Bi} \rangle$, так і нульову (діркову) заселеність, $K_i = \langle (1 - \hat{n}_{Ai})(1 - \hat{n}_{Bi}) \rangle$.

Походження хвилі густини заряду можна чіткіше зрозуміти з аналізу просторових розподілів. З цією метою застосуємо узагальнення ДТСП для координатного простору [118,119]. Такий підхід ефективно враховує як ефекти далекодіючого впорядкування, так і ефекти, що випливають із обмеженого розміру системи та зовнішнього захоплюючого (гармонічного) потенціалу опти-



Рис. 3.3. (а)-(в): Розподіли намагніченості і густини атомів в гармонічних пастках при різних температурах, обчислені для квадратної ґратки (d = 2). (г) Такі ж розподіли, обчислені за допомоги наближення локальної густини (ДТСП(1), лінії) та узагальнення для координатного простору (ДТСП(2), точки) при температурі $T = 0.2t_A$ для кубічної ґратки (d = 3). Інші параметри в (а)-(г): $t_B = 0.5t_A$, $U = 10t_A$, $\mu = U/2$ та $V_i = 0.1t_A(r_i/a)^2$, де a – стала ґратки.

чної пастки. На рис. 3.3 показані просторові розподіли сумарного заповнення ґратки обома компонентами $n_i = n_{Ai} + n_{Bi}$ та різниці заповнень (локальної намагніченості) $m_i = n_{Ai} - n_{Bi}$ як у дво- так і в тривимірній геометрії оптичної ґратки.

З рис. 3.3(б) можна побачити, що виникнення хвилі густини заряду при половинному заповненні зони ($n_i \approx 1$) відповідає тому, що в АФМупорядкованому стані вузли *i*, які зайняті більш важким компонентом, мають більше сумарне заповнення ($n_i > 1$); тобто, вони мають підвищену подвійну заселеність D_i ($D_i > K_i$). У той же час, вузли *j*, які в основному зайняті легшою складовою, мають менше сумарне заповнення ($n_j < 1$), тобто вони мають підвищену нульову заселеність K_j ($K_j > D_j$) завдяки більшій мобільності легких атомів. Це дає змогу використати цю властивість як альтернативну ознаку магнітного впорядкування ультрахолодних ферміонів в оптичних ґратках, наприклад, шляхом локального детектування пар атомів на вузлах ґратки.

Слід зазначити, що в розподілі густини в координатному просторі сумішей з різними амплітудами тунелювання та з $\mu_A = \mu_B$ завжди присутнє «феромагнітне» кільце (це прямо видно на рис. $3.3(a),(\Gamma)$). Це кільце походить від більшої кінетичної енергії легшого компонента, що, в свою чергу, призводить до більш широкого просторового розподілу цих атомів у пастці. З рис. 3.3(6),(B) можна зробити висновок, що це кільце залишається при температурі вище критичної температури і, таким чином, не може бути однозначно ототожнено з квантовим магнетизмом.

На рис. 3.3(е), представлено порівняння двох підходів: ДТСП з наближенням локальної густини та узагальнення теорії для координатного простору. Можна побачити дуже гарне узгодження в центрі пастки (включаючи амплітуду ХГЗ) та на краях. Але в проміжній області між АФМ ядром і «феромагнітним» кільцем наближення локальної густини не відтворює детальну структуру, оскільки не враховує *ефект близькості*, тобто нехтує впливом навколишніх ділянок з різною густиною. У свою чергу, узагальнення ДТСП для координатного простору демонструє більш широкий просторовий діапазон стійкості АФМ впорядкування, що призводить до цікавої взаємодії між антиферомагнітними кореляціями та «феромагнітним» кільцем. Зауважимо, що АФМ впорядкування, спричинене близькістю, у захопленій системі також було показано раніше в подібних дослідженнях збалансованих сумішей [118,119].

Нарешті, оскільки розроблений підхід дозволяє з високою точністю обчислювати значення локальної густини, можна також провести аналіз ентропії для однорідної системи. Використовуючи співвідношення Максвела для ентропії s, що припадає на вузол i, $\partial s/\partial \mu = \partial n/\partial T$, де $n = \sum_s n_i^{(s)}/2$, отримуємо

$$s(\mu_0, T) = \int_{-\infty}^{\mu_0} \frac{\partial n}{\partial T} d\mu.$$
(3.5)



Рис. 3.4. Фазові діаграми для напівзаповненої зони моделі Габбарда ($\mu_0 = U/2$) для врівноважених (а) та незбалансованих (б) сумішей, отриманих ДТСП в однорідному випадку (у відсутності пастки). Затінені ділянки відповідають фазі Нееля (АФМ). Кольорові та темно-сірі лінії – ізоентропічні криві.

Тому, виконуючи обчислення при різних значеннях сили взаємодії $U, \mu_0 = U/2$ і температури T, можна побудувати ізоентропічні криві, представлені на рис. 3.4.

Таким чином, можна зробити висновок з рис. 3.4, що досягнення АФМвпорядкованих фаз в оптичних ґратках, засноване на приготуванні атомної суміші в стані фермі-рідини з подальшим адіабатичним посиленням взаємодії також працює і для випадку фермі-атомів з різними амплітудами тунелювання Результати, отримані з ДТСП обчислень, показують, що для того, щоб перейти до АФМ впорядкування, потрібно підготувати систему в стані з ентропією на частинку $s < \ln 2$, незалежно від значення параметра дисбалансу Δt . Однак, якщо починати з більш високих показників ентропії, то вигідніше використовувати незбалансовані суміші, оскільки вони дозволяють набагато ближче наблизитися до критичної області за рахунок адіабатичного посилення взаємодії. Наприклад, при s = 0.75 можна досягнути $T_{\rm min} = 0.82t$ при $\Delta t = 0$, тоді як при такому ж значенні ентропії $T_{\rm min} = 0.51t$ при $\Delta t = 0.8$. Можна також побачити, що при однакових відносних значеннях температури в області фермі-рідини ($U \lesssim t$) ентропія зростає з дисбалансом Δt .

Слід зазначити, що рис. **3**.4 відповідає однорідному випадку (тобто не враховує ефектів зовнішньої пастки). Внаслідок цього, зображені ізоентропічні криві відповідають лише одному з можливих механізмів охолодження, а саме ефекту Померанчука у двокомпонентних сумішах фермі-частинок [108]. Крім цього ефекту, захоплена система може також охолоджуватися шляхом перерозподілу атомів всередині пастки (детальніше див. роботи [120–122]).

3.2. Вплив різної густини атомів на магнітні фази двокомпонентних газових сумішей в оптичних ґратках

В цьому підрозділі проводиться узагальнення розробленого теоретичного підходу на двокомпонентні суміші фермі-атомів, що мають не тільки різні амплітуди тунелювання в оптичних ґратках, але й різну густину взаємодіючих компонент Для ультрахолодних атомних сумішей подібне узагальнення теоретично проводилось на випадок взаємодій тяжіння в контексті конкуруючих станів надплинності та ХГЗ [103], надплинності по типу Фулде-Ферреля-Ларкіна-Овчіннікова та інших упорядкованих фазах дальнього радіусу охоплення [123, 124]. У випадку взаємодій відштовхування узагальнення проводилось в контексті феромагнетизму по типу нестабільності Стонера [125, 126]. Антиферомагнітні фази в ультрахолодних незбалансованих сумішах ферміонів з помірними амплітудами локальної взаємодії вивчалися лише окремо у випадку дисбалансу густини [127–130] або дисбалансу маси, див. підрозділ 3.2 та [107, 131]. Очевидно, що поки що явища магнітного впорядкування для випадків, коли є два типи дисбалансу, не розглядалися. Даний підрозділ спрямовано на теоретичне дослідження саме таких фізичних реалізацій.

Теоретична модель та особливості опису. Як і в підрозділі 3.1, будемо виходити з того ж гамільтоніану Фермі-Габбарда (3.1), та враховувати різні амплітуди тунелювання для двох типів фермі-атомів, що визначаються відповідно

до формули (3.2). Для зручності, нижче також вводяться псевдоспінові індекси $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ для двох типів атомів, тобто $A \equiv \uparrow$ та $B \equiv \downarrow$. Щодо дисбалансу густини, то його величина залежить не тільки від хімічних потенціалів μ_{σ} , але і від інших параметрів, включаючи дисбаланс амплітуди тунелювань $\Delta t = (t_{\uparrow} - t_{\downarrow})/(t_{\uparrow} + t_{\downarrow})$. Для кількісної характеристики дисбалансу густини зручно ввести поляризацію $P = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/(N_{\uparrow} + N_{\downarrow})$, де N_{σ} – загальна кількість частинок типу σ у системі.

Важливо зазначити, що параметр дисбалансу Δt може бути експериментально налаштований у широкому діапазоні. Наприклад, відповідно до роботи [123], для суміші ⁶Li-⁴⁰K його можна ефективно змінювати від 0.3 до 0.85, змінюючи інтенсивність (в межах 1 Вт) і розстроювання (в діапазоні 2 нм від «магічної» довжини хвилі) лазерів, що утворюють оптичну ґратку. Інші системи, де дисбаланс тунелювань може бути реалізований та налаштований у різних діапазонах, включають суміші ¹⁷¹Yb-¹⁷³Yb [98], станово-залежні оптичні ґратки для гомонуклеарних сумішей, а також суміші лужних та лужноземельних фермі-атомів. Наближаючись до межі великого дисбалансу, $\Delta t \rightarrow 1$, ці системи навіть дозволяють вивчити модель Фалікова-Кімбала [132], яка використовується для моделювання певних твердотільних матеріалів.

Аналогічно до попереднього підрозділу, використовуючи перетворення Шріффера-Вольфа в границі сильного зв'язку $t_{A,B} \ll U$ в околі заповнення зони наполовину, $n_{Ai} + n_{Bi} \approx 1$ (див. також підрозділ 1.3.3) можна прийти до ефективної спінової моделі – анізотропної моделі Гейзенберга (моделі XXZ), але тепер також у ефективному зовнішньому полі

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = J_{\parallel} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^Z \hat{S}_j^Z + J_{\perp} \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{S}_i^X \hat{S}_j^X + \hat{S}_i^Y \hat{S}_j^Y) - \Delta \mu \sum_i \hat{S}_i^Z, \qquad (3.6)$$

з константами зв'язку, що визначаються рівняннями (3.4), і різністю хімічних потенціалів $\Delta \mu = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$, що грає роль зовнішнього магнітного поля. \hat{S}_i^R $(R = \{X, Y, Z\})$ – стандартні оператори проекції спіну частинок зі спіном

1/2 на вузлі *i*, $\hat{S}_{i}^{R} = \frac{1}{2} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{R} \hat{c}_{i\beta}$, де σ^{R} – матриці Паулі. Слід зазначити, що тут і надалі всі «магнітні» характеристики відносяться до псевдоспінової термінології, тобто усі величини відносяться до двох різних видів ферміонів, що не обов'язково мають відрізнятися проекцією спіну, а можуть відрізнятися іншими ступенями вільності. Тому анізотропія в спіновій моделі не пов'язана з просторовим напрямком або віссю квантування в оптичній ґратці.

Анізотропія в гамільтоніані (3.6) походить від дисбалансу амплітуд тунелювань. Це знижує початкову обертальну SU(2) симетрію гамільтоніану для повністю збалансованої суміші в спіновому просторі до групи перетворень $\mathbb{Z}_2 \times U(1)$, де підгрупа \mathbb{Z}_2 відповідає відбиттям відносно площини XY (клас симетрій типу Ізінга; перший доданок у рівнянні (3.6)), а U(1) відповідає неперервним обертанням у площині XY (другий член у рівнянні (3.6)). Симетрія моделі додатково зменшується до підгрупи U(1), якщо є ненульова різниця хімічних потенціалів $\Delta \mu \neq 0$.

Відповідно до рівнянь (3.4), зауважимо, що зв'язок J_{\parallel} завжди більший або дорівнює J_{\perp} . Отже, з рівняння (3.6) можна зробити висновок, що при $\Delta \mu = 0$ і $\Delta t \neq 0$ основний стан системи відповідає антиферомагнетику з простою віссю (типу Ізінга; Z-AФМ). Як вказувалося в підрозділі 3.1, спектр збуджень в цьому випадку набуває щілини, а фаза Z-AФM також дозволена в низьковимірних випадках (d < 3; оскільки теорема Мерміна-Вагнера застосовується лише до неперервних симетрій). Очевидно, це також справедливо для ненульового, але невеликого $\Delta \mu < (J_{\parallel} - J_{\perp})$, коли основний стан системи відповідає феримагнетику (Z-AФM з додатковою середньою намагніченістю в напрямку Z). У протилежному випадку, $\Delta \mu \neq 0$ і $\Delta t = 0$, основний стан є схиленим антиферомагнетиком (антиферомагнетик з простою площиною XY і середньою намагніченістю в напрямку Z), стан якого підкоряється теоремі Мермін-Вагнера і вивчався в роботах [127–130]. Тому в області проміжних дисбалансів, $\Delta \mu \sim (J_{\parallel} - J_{\perp})$, слід очікувати фазового переходу між цими двома різними типами магнітного впорядкування. Ефективний гамільтоніан (3.6) дає хороше розуміння типів упорядкованих фаз, що виникають у досліджуваній системі. Однак, щоб мати більш повне уявлення про структуру та кількісні характеристики магнітних фаз, що виникають в оптичних ґратках при ненульовій температурі та описуються гамільтоніаном (3.1), для цього необхідно використовувати непертурбативні числові підходи. У цьому підрозділі узагальнюється підхід ДТСП (див. детальніше підрозділ 1.3.5), який добре підходить для опису впорядкованих фаз дальнього радіусу охоплення у високовимірних системах і здатний описувати ефекти неоднорідності та кінцевих розмірів, які зазвичай присутні в оптичних ґратках.

Узагальнення теоретичного підходу ДТСП. Динамічна теорія середнього поля (ДТСП, див. також підрозділ 1.3.5) – це підхід, який дає змогу поєднати два граничні випадки на ґратці: майже вільний газ ферміонів та сильно взаємодіючий газ (атомна границя). Цей метод пов'язує задачу ґратки (яка, взагалі, нерозв'язна) із задачею домішок (яку вибрано чисельно вирішуваною), тим самим замінюючи повну дію ефективною. Незважаючи на те, що це – непертурбативний підхід, він все ще є приблизним методом, оскільки трактує самоенергію ґратки як локальну (що для однорідних систем означає: незалежне від імпульсу) величину, нехтуючи тим самим нелокальними квантовими коливаннями. Хоча це і не точний метод у випадку квадратної та кубічної геометричних решіток (Z = 4 та Z = 6 відповідно), результати, отримані ДТСП, можуть використовуватися як орієнтир як для експериментів, так і для більш досконалих методів, таких як квантове моделювання Монте-Карло, яке може бути досить вимогливим через наявність проблеми ферміонного знаку (про останні результати, можливості та обмеження див. [133] та посилання всередині).

Найчастіше для вирішення допоміжної задачі домішки в ДТСП, модель ґратки (3.1) пов'язується на домішковою моделлю Андерсона, див. (1.91). Домішкова модель повинна містити повну локальну фізику ґраткової задачі, тому задля вимірювання локальних спінових кореляторів в XY площині у досліджуваному випадку відповідний гамільтоніан (1.91) має бути розширений до наступного виду:

$$\hat{\mathcal{H}}_{AIM} = \sum_{l=2}^{n_s} \sum_{\sigma} \left[\varepsilon_{l\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{l\sigma} \hat{a}_{l\sigma} + V_{l\sigma} (\hat{a}^{\dagger}_{l\sigma} \hat{d}_{\sigma} + \text{H.c.}) + W_{l\bar{\sigma}} (\hat{a}^{\dagger}_{l\sigma} \hat{d}_{\bar{\sigma}} + \text{H.c.}) \right] + \sum_{l=2}^{n_s} \sum_{\sigma} \Delta_l \hat{a}^{\dagger}_{l\sigma} \hat{a}_{l\bar{\sigma}} + U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow} - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} \hat{n}_{d\sigma} - \mu^{(i)}_{\uparrow\downarrow} \sum_{\sigma} \hat{d}^{\dagger}_{\sigma} \hat{d}_{\bar{\sigma}}, \qquad (3.7)$$

де індекс σ та його зворотній $\bar{\sigma}$ відповідають проекціям спіну на вісь Z, $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, а індекс $l = \{2, \ldots, n_s\}$ відповідає орбітальним числам резервуара в моделі Андерсона, яка обмежена максимальною кількістю орбіталей n_s , що є необхідною умовою в домішковому розв'язувачі типу точної діагоналізації (див. детальніше підрозділ 1.3.5) В обчисленнях, що наведені нижче в цьому підрозділі, використовується $n_s = 5$. Аналогічно до формули (1.91), оператори $\hat{a}_{l\sigma}^{\dagger}(\hat{a}_{l\sigma})$ та $\hat{d}_{\sigma}^{\dagger}(\hat{d}_{\sigma})$ відповідають народженню (знищенню) ферміонів на орбіталі l та на домішці, відповідно, а величини $\varepsilon_{l\sigma}$, $V_{l\sigma}$, Δ_l та $W_{l\sigma}$ – так звані параметри Андерсона, що визначають амплітуди різних процесів у цій моделі.

Використовуючи стандартну техніку (див., наприклад, [134]) для усунення ступенів вільності резервуара в ефективній дії, що відповідає гамільтоніану (3.7), приходимо до аналітичних виразів для функцій Вейса, які представляють ефективні динамічні поля, що діють на домішці:

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_{n}) = i\omega_{n} + \mu_{\sigma} - \sum_{l=2}^{n_{s}} K_{l}^{-1} \left[V_{l\sigma}^{2}(i\omega_{n} - \varepsilon_{l\bar{\sigma}}) + 2V_{l\sigma}W_{l\sigma}\Delta_{l} + W_{l\sigma}^{2}(i\omega_{n} - \varepsilon_{l\sigma}) \right],$$

$$\mathcal{G}_{\uparrow\downarrow}^{-1}(i\omega_{n}) = \mu_{\uparrow\downarrow}^{(i)} - \sum_{l=2}^{n_{s}} K_{l}^{-1} \left[V_{l\uparrow}W_{l\downarrow}(i\omega_{n} - \varepsilon_{l\downarrow}) + (V_{l\uparrow}V_{l\downarrow} + W_{l\uparrow}W_{l\downarrow})\Delta_{l} + V_{l\downarrow}W_{l\uparrow}(i\omega_{n} - \varepsilon_{l\uparrow}) \right], \qquad (3.8)$$

де $K_l = (i\omega_n - \varepsilon_{l\uparrow})(i\omega_n - \varepsilon_{l\downarrow}) - \Delta_l^2$, $\omega_n = \pi (2n+1)/\beta$ – матсубарівська частота, β – зворотня температура, $\beta = 1/T$. В рамках розв'язувача типу точної діагоналізації базисні стани скінченновимірного гільбертового простору записуються як

$$|n_1^{\uparrow}, n_2^{\uparrow}, \dots, n_{n_s}^{\uparrow}\rangle |n_1^{\downarrow}, n_2^{\downarrow}, \dots, n_{n_s}^{\downarrow}\rangle$$

де $n_p^{\sigma} = 0, 1$ і $\sum_p n_p^{\sigma} \equiv n^{\sigma}$. Слід зауважити, що аномальні доданки у рівнянні (3.7) змішують сектори n^{\uparrow} і n^{\downarrow} (тобто намагніченість s_z не зберігається), тому останні не можуть бути діагоналізовано незалежно. Хоча загальний заряд $n = n^{\uparrow} + n^{\downarrow}$ все ще зберігається, це призводить до значного збільшення чисельних зусиль при діагоналізації та подальших обчисленнях відповідних функцій Гріна. При ненульовій температурі вони обчислюються з повного набору власних станів $|i\rangle$ (з власними значеннями E_i) відповідно до рівняння

$$G_{\sigma_1 \sigma_2}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{i,j} \frac{\langle i | \hat{d}_{\sigma_1} | j \rangle \langle j | \hat{d}_{\sigma_2}^{\dagger} | i \rangle}{E_i - E_j - i\omega_n} \left(e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j} \right), \qquad (3.9)$$

$$F_{\sigma_1 \sigma_2}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{i,j} \frac{\langle i | \hat{d}_{\sigma_1} \hat{d}_{\bar{\sigma}_1}^{\dagger} \hat{d}_{\bar{\sigma}_1} | j \rangle \langle j | \hat{d}_{\sigma_2}^{\dagger} | i \rangle}{E_i - E_j - i\omega_n} \left(e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j} \right), \qquad (3.10)$$

де $\mathcal{Z} = \sum_i e^{-\beta E_i}$ – статистична сума. Далі, відповідно до роботи [87], самоенергії визначаються як

$$\Sigma_{\sigma\sigma} = U \frac{F_{\sigma\sigma}G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - F_{\sigma\bar{\sigma}}G_{\sigma\bar{\sigma}}}{G_{\sigma\sigma}G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - G_{\sigma\bar{\sigma}}^2}, \quad \Sigma_{\sigma\bar{\sigma}} = U \frac{F_{\sigma\bar{\sigma}}G_{\sigma\sigma} - F_{\sigma\sigma}G_{\sigma\bar{\sigma}}}{G_{\sigma\sigma}G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - G_{\sigma\bar{\sigma}}^2}.$$
(3.11)

На практиці, процедура обчислень виглядає наступним чином: вирішується задача домішок, що визначає величини 3.9)–(3.11) для заданих параметрів U, μ_{σ} і β початкової задачі ґратки (3.1) та для певного набору допоміжних параметрів Андерсона { $\varepsilon_{l\sigma}, V_{l\sigma}, W_{l\sigma}, \Delta_l$ }, що оновлюються в кожній ітерації ДТСП. Тоді самоенергії (3.11) дозволяють обчислити функції Гріна, що відповідають початковій задачі ґратки. Надалі буде розглянуто два основні підходи до оцінки наведених функцій Гріна: (і) ДТСП з двома підґратками, що є зручним підходом для отримання фазових діаграм для однорідних (нескінченних) систем з магнітним впорядкуванням, а також може використовуватися в поєднанні з наближенням локальної густини (LDA) для аналізу газів в потенціалах пасток та (ii) узагальнення ДТСП для координатного простору, що описує скінченні неоднорідні (захоплені) системи без подальших наближень.

Рібняння самоузгодження для дволідґраткової ДТСП. Двосторонні структури, такі як стани з антиферромагнітним порядком, можуть бути описані відповідним чином шляхом введення двох ґраток. У рамках підходу ДТСП необхідно вирішити проблему домішок двічі на двох сусідніх вузлах вихідної ґратки. Важливо зазначити, що тут, на відміну від збалансованих сумішей, спостережувані величини, що відповідають різним підґраткам (що позначені нижче індексами s = 1, 2), не можуть бути безпосередньо пов'язані з величинами з протилежними спінами. Отже, функції Гріна визначаються наступним (узагальненим) чином:

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^{(s)}(i\omega_n) = \int_{-z}^{z} d\epsilon \, D(\epsilon) [\mathbf{A}^{-1}(\epsilon)]_{\sigma_1\sigma_2}^{(s)}$$
(3.12)

де

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \zeta_{\uparrow\uparrow}^{(1)} & \zeta_{\downarrow\uparrow}^{(1)} & -t_{\uparrow}\epsilon & 0\\ \zeta_{\uparrow\downarrow}^{(1)} & \zeta_{\downarrow\downarrow}^{(1)} & 0 & -t_{\downarrow}\epsilon\\ -t_{\uparrow}\epsilon & 0 & \zeta_{\uparrow\uparrow}^{(2)} & \zeta_{\downarrow\uparrow}^{(2)}\\ 0 & -t_{\downarrow}\epsilon & \zeta_{\uparrow\downarrow}^{(2)} & \zeta_{\downarrow\downarrow}^{(2)} \end{pmatrix}$$

та

$$\zeta_{\sigma\sigma}^{(s)} = i\omega_n + \mu_\sigma - \Sigma_{\sigma\sigma}^{(s)}(i\omega_n), \quad \zeta_{\sigma\bar{\sigma}}^{(s)} = \mu_{\sigma\bar{\sigma}}^{(s)} - \Sigma_{\sigma\bar{\sigma}}^{(s)}(i\omega_n), \quad (3.13)$$

де z відповідає координаційному числу ґратки (z = 4 і z = 6 для квадратної та кубічної, відповідно), $D(\epsilon)$ – нормалізована густина станів невзаємодіючого

газу, $\int_{-z}^{z} d\epsilon D(\epsilon) = 1$, явний вид якої відомий для обраної геометрії. Локальні самоенергії у (3.13) беруться з рішень задачі домішки, див. (3.11).

Для самоузгодженості ДТСП схеми функції Вейса визначаються з рівняння Дайсона,

$$[\mathcal{G}^{(s)}(i\omega_n)]_{\sigma_1\sigma_2}^{-1} = [\mathbf{G}^{(s)}(i\omega_n)]_{\sigma_1\sigma_2}^{-1} + \Sigma_{\sigma_1\sigma_2}^{(s)}(i\omega_n).$$
(3.14)

де $\mathbf{G}^{(s)}$ – блок 2 × 2 матриці (3.12), обернені якої обраховуються окремо для кожної з підґраток s = 1, 2. Використовуючи отримані функції Вейса в процедурі мінімізації (відповідно до рівнянь (3.8) та застосувавши метод спряженого градієнта), визначається новий набір параметрів Андерсона, який потім використовується в подальшій ДТСП ітерації. Такі ітерації виконуються до остаточної збіжності, тобто, поки початкова і кінцева функції Вейса не стануть тотожними.

Якщо розглядається неоднорідна система, можна використовувати ДТСП з двома підґратками в поєднанні з наближенням локальної густини. Основна перевага такого підходу полягає в тому, що він дозволяє розглядати великі системи в трьох вимірах, оскільки числові зусилля масштабуються приблизно лінійно відносно розмірів системи для симетричних потенціалів пасток. Недолік цього підходу полягає в тому, що він не в змозі відтворити детальну структуру близько до меж упорядкованих фаз, тобто не враховується можливий ефект близькості. Згаданий ефект можна врахувати узагальненням ДТСП для координатного простору, див. також підрозділ 1.3.5 та нижче.

Рівняння самоузгодження для ДТСП у реальному просторі. Ідея ДТСП для координатного простору полягає не в тому, щоб розділити задачу ґратки на кілька підґраток, а вирішити задачу домішок на кожному вузлі ґратки, що відповідає безпосередньо початковій скінченній системі. Для досліджуваного випадку це означає, що після отримання самоенергій $\Sigma_{\sigma_1\sigma_2}^{(i)}(i\omega_n)$, див. рівняння(3.11), для кожного вузла ґратки $i = \{1, ..., N\}$, вони збираються у матрицю координатного простору, що складається з обернених локальних функцій Гріна і елементів з тунелюванням між вузлами,

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} \zeta_{\uparrow\uparrow}^{(1)} & & & \\ \zeta_{\uparrow\downarrow}^{(1)} & \zeta_{\downarrow\downarrow}^{(1)} & & \\ t_{\uparrow} & 0 & \zeta_{\uparrow\uparrow}^{(2)} & & \\ 0 & t_{\downarrow} & \zeta_{\uparrow\downarrow}^{(2)} & \zeta_{\downarrow\downarrow}^{(2)} & \\ 0 & 0 & t_{\uparrow} & 0 & \zeta_{\uparrow\uparrow}^{(3)} \\ 0 & 0 & 0 & t_{\downarrow} & \zeta_{\uparrow\downarrow}^{(3)} & \zeta_{\downarrow\downarrow}^{(3)} \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$
(3.15)

яка є ермітовою та має розмір $2N \times 2N$. Діагональні елементи $\zeta_{\sigma\sigma}^{(i)}$ мають вигляд

$$\zeta_{\sigma\sigma}^{(i)}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu_\sigma - V_i - \Sigma_{\sigma\sigma}^{(i)}(i\omega_n), \qquad (3.16)$$

а позадіагональні $\zeta^{(i)}_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$ визначаються відповідно до рівняння (3.13).

Як і в двопідґратковому випадку, умови самоузгодження ДТСП забезпечуються рівнянням Дайсона,

$$[\mathcal{G}^{(i)}(i\omega_n)]_{\sigma_1\sigma_2}^{-1} = [\mathbf{G}^{(i)}(i\omega_n)]_{\sigma_1\sigma_2}^{-1} + \Sigma^{(i)}_{\sigma_1\sigma_2}(i\omega_n), \qquad (3.17)$$

де $\mathbf{G}^{(i)}$ – блок 2 × 2 матриці \mathbf{G} в координатному просторі, яка обчислюється обертанням матриці (3.15). Нарешті, для кожного вузла ґратки визначається новий набір параметрів Андерсона (як у випадку з двома підґратками).

У разі великого розміру системи, тобто коли загальна кількість вузлів ґратки стає великою, $N \gtrsim 10^3$, обертання матриці (3.15) стає трудомістким порівняно з домішковим розв'язувачем з помірною кількістю орбіталей резервуара. Тим не менш, навіть при такій обмеженій загальній кількості вузлів ґратки наведене узагальнення здатне до належного опису впливів, спричинених близькістю, в оптичних ґратках з магнітним упорядкуванням. Результати числового аналізу для однорідного газу атомів. По-перше, розглянемо ефекти, що виникають лише від масового дисбалансу в системі. Встановлюючи $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$, що призводить до збалансованої заселеності (P = 0) в однорідній системі. Згідно з наведеною ефективною моделлю (3.6), основний стан такої системи при половинному заповненні зони є антиферомагнетиком з орієнтацією спинів вздовж осі Z (Z-A Φ M) для будь-якого ненульового значення дисбалансу амплітуд тунелювання.

Перший важливий ефект, який слід підкреслити, полягає в тому, що відповідно до середньопольового аналізу та існуючих Монте-Карло обчислень в граничних випадках $\Delta t = 0$ і $\Delta t = 1$ (див. роботи [114, 115], відповідно), критична температура Нееля зростає з дисбалансом амплітуд тунелювання. Дійсно, беручи визначення середнього поля для температури Нееля в моделі Гейзенберга [106], $T_N = 6JS(S+1)/3$, де S – абсолютне значення спіна ферміонів, для постійного U/t, де $t = (t_{\uparrow}+t_{\downarrow})/2$ і $J = J_{\parallel}$ (див. визначення (3.4)), можна записати

$$T_N(\Delta t) = (1 + \Delta t^2)T_N(0).$$

Щоб довести, що цей ефект також має місце для моделі Габбарда (3.1) при помірних амплітудах взаємодії, $U \gtrsim zt$, чисельно обчислюються T_c за допомоги двопідґраткової ДТСП для кубічної ґратки. Результати показані на рис. 3.5(а), де чітко підтверджується зазначена поведінка. Відповідно до підрозділу 3.1, це явище можна пояснити як спричинене зменшенням квантових флуктуацій (через виникнення енергетичної щілини для однієї з ґолдстоунівських мод) в системах з ненульовим дисбалансом амплітуд тунелювання.

Ще один цікавий ефект стосується аналізу ентропії для однорідних систем. Як зазначено у підрозділі 3.1, можна наблизитись набагато ближче до впорядкованого стану в сумішах, де існує дисбаланс Δt . Для того, щоб показати це, на рис.. 3.5(б) представлено залежність мінімальної температури, яку можна



Рис. 3.5. Залежності (а) критичної температури для впорядкування Нееля та (б) мінімальної температури, що може бути досягнуто при фіксованих U/t або ентропії *s* на частинку, як функції Δt .

досягти для постійної ентропії при мінімізації по амплітуді взаємодії U/t (таким чином припускаючи адіабатичну зміну сили взаємодії) як функції параметра Δt . Зауважимо, що для s = 0.7 відповідна крива має максимум. Це відбувається тому, що для малого дисбалансу тунелювань найнижча температура досягається для великих U/t, так що система знаходиться в стані ізолятора Мотта. У цьому режимі мінімальна температура збільшується при збільшенні дисбалансу амплітуд тунелювання. Для ще більшого Δt найнижча температура досягається при малих U/t, таких що система знаходиться у фазі фермі-рідини. У цій фазі найнижча температура знижується з дисбалансом тунелювань, що призводить до спостережуваного максимуму.

Важливо зазначити, що добре встановлено, що ДТСП кількісно завищує критичну температуру та критичні значення ентропії порівняно з більш точними методами для збалансованих сумішей. Згідно з наведеним аналізом, це стосується також систем з ненульовим дисбалансом амплітуд тунелювання.
Однак, слід підкреслити, що підхід ДТСП стає більш точним в границі великого дисбалансу Δt не лише щодо кількісних оцінок критичної температури, а й критичної ентропії, значення якої не залежить від дисбалансу тунелювань в межах середньопольового опису для U > zt, $s_c^{\text{mf}} = \ln 2 \approx 0.69$. Це можна побачити, зокрема, із порівняння з відомими результатами для моделі Гейзенберга [135] ($U \gg t$, $\Delta t \rightarrow 0$), де $s_c \approx 0.34$, і результатами для моделі Ізінга [136] ($U \gg t$, $\Delta t \rightarrow 1$), де $s_c \approx 0.56$. Отже, обговорювані переваги незбалансованих сумішей повинні бути ще більш вираженими в дослідженнях, що використовують більш точні методи.

Слід зазначити, що, крім хвилі спінової густини, в незбалансованих сумішах спостерігається також слабка модуляція хвилі густини заряду (ХГЗ). Це безпосередньо пов'язано з наявністю одночасного АФМ впорядкування і дисбалансу тунелювання в системі і відповідає тому, що в стані Z-AФM вузли, що зайняті більш важким компонентом, мають підвищену подвійну зайнятість через тунелювання з сусідніх вузлів, які зайняті більш легким компонентом (таким же чином, протилежний механізм працює для вузлів, зайнятих більш легким компонентом). Амплітуда такої ХГЗ, згідно з оцінками, представленими у роботі [137] для U > zt, пропорційна $\Delta t (U/t)^{-2}$. Отже, ХГЗ стає більш вираженою при помірній силі взаємодії і зникає у границі сильного зв'язку U/t.

Наявність як дисбалансу густини, так і тунелювання в ультрахолодних сумішах відповідно до ефективного гамільтоніана (3.6) призводить до конкуренції між різними типами АФМ упорядкування. На рис. 3.6 представлено фазову діаграму, що показує структуру впорядкованих фаз в області проміжних параметрів при половинному заповненні зони. Для помірної поляризації P < 0.8і U > zt умова половинного заповнення виконується шляхом використання середнього хімічного потенціалу $\bar{\mu} = U/2$, де $\bar{\mu} \equiv (\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow})/2$, але для більших дисбалансів густини його слід регулювати додатково. Коли амплітуди тунелювання обох компонентів низькі порівняно з силою взаємодії, система знаходиться в парамагнітному стані ізолятора Мотта. У протилежному випадку



Рис. 3.6. Фазова діаграма суміші з дисбалансом густини та тунелювання компонентів при напівзаповненій зоні та ненульовій температурі, що отримана ДТСП для кубічної ґратки. Штрихові та суцільні лінії відповідають фазовим переходам першого та другого роду, відповідно. Параметр ХГЗ визначається в термінах подвійної заселеності $D_i = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$ як $c = (D_i - D_{i+1})/(D_i + D_{i+1})$, а намагніченість – як $m_{z,x}^{\text{stag}} = \langle \hat{S}_i^{Z,X} \rangle - \langle \hat{S}_{i+1}^{Z,X} \rangle$.

система перебуває у невпорядкованій фазі фермі-рідини, яка є більш стисливою та характеризується підвищеною подвійною заселеністю вузлів ґратки. У центральній області з'являються дві різні фази: фаза *нахиленого антиферомагнетика* (*XY*-AΦM), який характеризується змінною намагніченістю в площині *XY* і середньою намагніченістю в напрямку *Z*, і фаза *феримагнетика* (позначеного як *Z*-AΦM на цій діаграмі), який має як знакозмінну, так і середню намагніченість у напрямку *Z*. Зауважимо, що у фазі нахиленого АΦM, співвідношення заселеностей кожного вузла важкими та легкими компонентами є сталою: таким чином, додаткова ХГЗ не з'являється в цьому випадку. В області проміжного дисбалансу тунелювання між фазами різного магнітного порядку відбувається фазовий перехід першого роду із вузькою областю співіснування.

Тепер встановимо, як змінюється фазова діаграма, представлена на рис. 3.6 при збільшенні $\Delta \mu$ (що визначає поляризацію P), див. також рис. 3.7.



ΠМ

T=0.4t ХГЗ ізолятор ізолятор ізолятор 0 1.2 0.8 1.2 $6t_{\uparrow}/U$ 0 0.8 $6t_{\uparrow}/U$ 0 0 0.4 0.4 0.4 0.8 1.2 $6t_{\uparrow}/U$ Набір фазових діаграм для суміші з дисбалансом густини та Рис. 3.7. тунелювання компонентів при напівзаповненій зоні, T = 0.4t і різних $\Delta \mu$, що

ΠМ

Ζ-ΑΦΜ

отримані ДТСП для кубічної ґратки.

0.4

ΠМ

При $\Delta \mu = 0$ вся область з магнітним порядком відповідає фазі Z-AΦM, за винятком центральної частини (а саме діагональної лінії $t_{\uparrow} = t_{\downarrow}$), де AΦM впорядкування може відбуватися в будь-якому напрямку завдяки початковій симетрії SU(2). Коли з'являється дисбаланс густини, розвивається центральна фаза нахиленого AΦM. Ця фаза збільшується в ширину (у напрямку областей з великим дисбалансом маси) зі збільшенням $\Delta \mu$. Що стосується феримагнітних областей, то вони стискаються не тільки зі сторони XY-AΦM фази, а й з боків невпорядкованих фаз, оскільки середня намагніченість у напрямку Z, тобто дисбаланс густини, пригнічує слабкі Z-AΦM кореляції в областях, близьких до ліній фазових переходів. Близько до критичного значення різниці хімічних потенціалів ($\Delta \mu = 1.0t$ на рис. 3.7) спостерігається асиметрія при зникненні слабко впорядкованих феримагнітних фаз на фазовій діаграмі. Можна побачити, що феримагнітна фаза є дещо стійкішою для систем з більшістю важких



Рис. 3.8. Залежність критичної поляризації, що руйнує АФМ упорядкування, від параметра дисбалансу тунелювання при різних температурах.

частинок. Це можна зрозуміти таким чином, що слабкі магнітні кореляції менше пригнічуються збудженнями в цій області через меншу кінетичну енергію решти некорельованої частини системи. При великих дисбалансах густини ($\Delta \mu \gtrsim 1.3t$ при T = 0.4t) феримагнітна фаза повністю зникає, залишаючи лише область з XY-АФМ упорядкованим у центральній частині.

Отже, антиферомагнітне впорядкування при фіксованій температурі є найбільш нестабільним щодо дисбалансів в області трійкової точки діаграм, що представлені на рис. 3.6 та 3.7, де усі три фази – ПМ, XY-AФM та Z-AФM можуть співіснувати. На рис. 3.8 цей ефект наводиться для різних температур незбалансованих сумішей. Критична поляризація чітко виявляє чутливість AФM упорядкованих фаз до збільшення дисбалансу в областях трійкової точки, де спостерігаються відповідні мінімуми. Також ефект того, що феримагнітні стани пригнічуються дисбалансом густини, можна побачити з наведених залежностей, порівнюючи ліву (фаза нахиленого AФM) та праву (феримагнітна фаза) сторони кривих, представлену на рис. 3.8. Цікаво, що ДТСП прогнозує, що при нульовій температурі розвивається антиферомагнітний порядок для будь-якої поляризації. Це відрізняється від випадку взаємодій тяжіння та фази надплинності, яка руйнується в граничному випадку Чандрасехара-Клогстона для поляризації [138–140], що було наочно продемонстровано в експериментах з ультрахолодними фермі-газами [141].

Результати числового аналізу для газу атомів в зовнішньому полі оптичних пасток. Нарешті, перейдемо в теоретичному аналізі до випадку, коли в системі присутній додатковий зовнішній утримуючий потенціал спеціальної пастки, що є необхідною умовою в експериментах з ультрахолодними газами. Для простоти нижче припускаємо, що потенціал захоплення V_i у рівнянні (3.1) має аксіально-симетричну форму, $V_i = V_0 r_i^2/a^2$, де V_0 – амплітуда гармонічного потенціалу, r_i – відстань від вузла ґратки *i* до центру пастки, а *a* – стала ґратки. Очевидно, що всі результати можна розширити, щоб вони включали ефекти анізотропії, як правило, наявні в реальних експериментах.

Почнемо аналіз з використання наближення локальної густини з двопідгратковою ДТСП, що була представлена раніше. В рамках такого підходу, обчислення проводяться для конкретного вузла неоднорідної системи, приймаючи $\mu_{\sigma}^{(i)} = \mu_{\sigma}^{(0)} + V_i$ у ДТСП обчисленнях. У всіх результатах, представлених у цьому підрозділі, середній хімічний потенціал у центрі пастки береться як $(\mu_{\uparrow}^{(0)} + \mu_{\downarrow}^{(0)})/2 = U/2$, так що виконується умова половинного заповнення зони в центрі пастки (принаймні для $|\Delta \mu| \ll U$, де $\Delta \mu = \mu_{\uparrow}^{(0)} - \mu_{\downarrow}^{(0)}$), що є найбільш релевантним випадком для даного теоретичного дослідження.

Виконуючи розрахунки для фіксованого дисбалансу Δt та змінюючи різницю хімічних потенціалів $\Delta \mu$ у центрі пастки, можна отримати розподіли густини та намагніченості в різних напрямках, що представлені на рис. 3.9. У наведених залежностях є кілька деталей, які варто обговорити. Перш за все, зазначимо, що для ненульового дисбалансу тунелювання та $\Delta \mu = 0$ має місце (глобально) поляризована суміш завдяки «феромагнітній» оболонці, що походить від ширшого розповсюдження легшого компонента в пастці. Отже, для отримання Z-AФM упорядкування в центрі пастки слід враховувати цей



Рис. 3.9. Радіальні розподіли густини та намагніченості для кубічної ґратки в гармонічній пастці, що обчислені ДТСП з наближенням локальної густини при різних значеннях поляризації. Інші параметри обрані наступними: U = 12t, T = 0.2t, $\Delta t = 0.2$ і $V_i = 0.1t(r_i/a)^2$, де a – стала ґратки.

ефект і коригувати загальну поляризацію (або зробити потенціал гармонічної пастки різним для різних внутрішніх станів атомів). Можна також скористатися цим регулюванням у поєднанні з додатковим механізмом охолодження в незбалансованих сумішах, на що вказується у роботі [131] (видалити з системи частку важчого компонента, що несе більшу частку ентропії при U = 0).

Можливими перевагами Z-AФM фази можуть бути не тільки проблеми, пов'язані з охолодженням, як зазначено у підрозділі 3.1, але й більш пряме детектування, наприклад, за допомоги квантового газового мікроскопа [142], де можна безпосередньо виявити змінну густину одного спінового компонента. На відміну від цього, у нахиленій AФM фазі густина спінових компонентів не змінюється від одного вузла до іншого, тому треба аналізувати поведінку подвійної заселеності [109, 112], об'єднувати вузли ґратки з найближчими сусідами [143] або вводити додаткові методи виявлення спінових кореляційних функцій між найближчими вузлами в площині XY, такі як бреґтівська спектроскопія [144] або аналіз шумових кореляцій [145].

Варто зазначити, що ХГЗ структуру, що властива Z-AФM фазі, добре видно в розподілах загального числа частинок на рис. 3.9(a) та 3.9(б) (подвійні лінії в центральній частині). Натомість, вона відсутня на рис. 3.9(в), де розвивається фаза нахиленого АФМ в центрі пастки. Як можна побачити, структура оболонок також має цікаву залежність від дисбалансу густини. Намагніченість в цих оболонках зростає при збільшенні поляризації (додавання легких та видалення важких частинок із системи), але при зменшенні загальної поляризації «феромагнітна» оболонка, пов'язана з дисбалансом тунелювання, не зникає. Натомість, згідно з рис. 3.9(а), розвивається подвійна оболонка з внутрішніми та зовнішніми «феромагнітними» оболонками, що походять відповідно від дисбалансів густини та тунелювання.

Також на рис. 3.9 можна помітити розриви у намагніченості поблизу меж АФМ фаз: оскільки застосовано наближення локальної густини, цим не враховуються ефекти близькості, таким чином, такі різкі риси не розмиваються неперервним потенціалом пастки. Більше того, в областях розривів ДТСП має досить погану збіжність. На рис. 3.10 показано, що, враховуючи ефект близькості за допомоги узагальнення ДТСП для координатного простору, в потенціалах пасток намагніченість має плавну поведінку з більшою областю стійкості АФМ фази, ніж прогнозовано наближенням локальної густини.

3.3. Перспективи оптичних ґраток зі станово-залежним тунелюванням на магнітні фази в присутності зовнішнього утримуючого потенціалу

Мотивація досліджень. Завдяки недавній експериментальній реалізації станово-залежних оптичних ґраток для двокомпонентних сумішей ультрахолодних атомів ⁴⁰К при використанні техніки градієнта магнітного поля і низьким рівнем нагрівання [146] тепер набагато простіше мати доступ до вивчення асиметричних моделей ґраток без необхідності використання гетероядерних ферміонних сумішей (наприклад, ⁶Li–⁴⁰K) або довгоживучих метастабільних електронних станів того ж самого ферміонного ізотопу (наприклад, 3P₀ стан



Рис. 3.10. Порівняння профілів намагніченості в координатному просторі для квадратної ґратки в гармонічній пастці, обчислених ДТСП з наближенням локальної густини (лінії) та узагальненою ДТСП (крапки). Затінені ділянки відповідають областям, де перше наближення не відтворює детальну структуру та має проблеми зі збіжністю. Вставки: контурні графіки, що представляють розподілення намагніченості в координатному просторі, обчислені узагальненою ДТСП з тими ж параметрами. Інші параметри, що були використані: $U = 12t, T = 0.2t, \Delta t = 0.2$ і $V_i = 0.1t(r_i/a)^2$.

¹⁷³Yb). Серед потенційних застосувань цієї методики можна запропонувати наблизитись до АФМ-упорядкованих станів (див. підрозділ 3.1). Відомо, що квантовий магнетизм ультрахолодних ферміонних сумішей є одним з головних експериментальних викликів в даний час і вже досягнуто значного прогресу в цьому напрямку. Зокрема, ефективно виміряні АФМ кореляції короткого діапазону [143,147], а їх унікальна динаміка за наявності регульованої геометрії ґратки спостерігалася нещодавно в експерименті [148].

Розглядаючи двокомпонентні суміші фермі-атомів з точки зору теоретичних моделей та спінових симетрій, оптичні ґратки із залежною від стану (тобто залежними від спіну) амплітудами тунелювання ефективно порушують початкову безперервну симетрію SU(2) моделі Габбарда до U(1)×Z₂, де Z₂ – дискретна симетрія відбиття від площини вздовж перпендикулярного їй напрямку (так званої легкої вісі). Напрямок легкої вісі важливий, зокрема, для експериментального виявлення АФМ кореляцій на основі аналізу бреґґовської спектроскопії [144,147] та техніки мікроскопу для квантових газів. Незважаючи на те, що температури та ентропії, що були досягнуті у техніці мікроскопів для ферміонних газових сумішей [149–154] все ще високі, щоб спостерігати магнітні кореляції дальнього діапазону, тому необхідні подальші оптимізації та вдосконалення протоколів охолодження, важливо вивчити характерні залежності цих термодинамічних величин від інших параметрів системи (включаючи різні симетрії магнітних станів), таким чином визначити найбільш оптимальний режим для *in situ* зображень АФМ кореляцій дальнього діапазону.

Особливості теоретичного опису. Будемо виходити з гамільтоніану (3.1), в якому потенціал зовнішнього поля пастки задається як

$$V_i = V(r_i/a)^2, (3.18)$$

тобто добре апроксимується параболічним профілем у координатному просторі. Зазначимо, що асиметрична модель Габбарда (3.1), яка може бути ще визначена як розширена модель Фалікова-Кімбала для безспінових ферміонів у контексті твердотільних матеріалів [155], у границі сильного зв'язку (див детальніше підрозділ 1.3.3) може бути приведена до ефективної спінової моделі Гейзенберга з асиметричними константами магнітного зв'язку та зовнішнім полем, див. гамільтоніан (3.6) та визначення (3.4).

Згідно з наведеними в підрозділі 3.2 розрахунками, щоб уникнути потенційної конкуренції між різними типами АФМ упорядкування, що також може призвести до значного зниження критичних температур, у початковій моделі (3.1) хімічні потенціали вважаються однаковими для обох псевдоспінових компонент (тобто $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} \equiv \mu$). Слід зауважити, що асиметричні амплітуди тунелювання $t_{\uparrow} \neq t_{\downarrow}$ разом з $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$ призводять до ненульової поляризації, тобто не рівній загальній кількості частинок у двох станах ($N_{\uparrow} \neq N_{\downarrow}$), в пастці, але ця умова є найбільш оптимальною для Z-АФМ стану в моделі (3.1) при половинному заповненні зони (наприклад, при $\mu = U/2$ і $r_i = 0$), як обговорювалося вище.

Надалі розглядається тривимірна оптична ґратка з параметрами Габ-

барда, що входять до рівняння (3.1) і встановлюються близькими до експериментальних значень [146]. Зокрема, є обґрунтованим зосередитись на двох протилежних випадках: (i) нульовий (або дуже маленький) дисбаланс тунелювання $t_{\uparrow} = t_{\downarrow} = t$ та (ii) великий дисбаланс (наприклад, $t_{\uparrow} = 0.54t$ i $t_{\downarrow} = 0.06t$). Згідно з роботою [146], обидва випадки можуть бути ефективно реалізовані за рахунок техніки градієнта магнітного поля з високим рівнем контролю.

Теоретичний аналіз проводиться в рамках динамічної теорії середнього поля (див. детальніше підрозділ 1.3.5). Для врахування ефектів неоднорідності, що створюються зовнішньою пасткою, використовується ДТСП у поєднанні з наближенням локальної густини. Зауважимо, що такий підхід не враховує ефектів близькості, однак у досліджуваних випадках ці ефекти не відіграють вирішальної ролі, що призводить лише до незначних корекцій. У рамках наближення локальної густини локальні фізичні величини обраховуються у певній точці r пастки за умови $\mu(r) = \mu_0 - V(r/a)^2$, де μ_0 – хімічний потенціал у центрі пастки, який для фіксованих значень параметрів Габбарда визначає також загальну кількість частинок у системі.

З рішень ДТСП на різних вузлах ґратки (тобто вузлах, що знаходяться на різній відстані r від центру) можна проаналізувати залежність локальних величин від відстані r (див. також [156]). Зокрема, комбінуючи результати зі співвідношенням Максвела $\partial s/\partial \mu = \partial n/\partial T$, а також з рівнянь (3.5) та (3.18), можна отримати ентропію на вузлі ґратки в конкретній точці r_0 пастки (для простоти стала ґратки обрана рівній одиниці)

$$s(r_0) = 2V \int_{r_0}^{R_{\text{max}}} \frac{\partial n(r, U, T)}{\partial T} r dr, \qquad (3.19)$$

де $R_{\rm max}$ – відстань, на якій при заданій точності обчислень можна вважати $n(R_{\rm max}, U, T) = 0.$

Подальше інтегрування ентропії та розподілів густини в пастці визначає

загальну ентропію S і загальну кількість частинок N в системі (тут і нижче потенціал пастки вважається аксіально симетричним)

$$S = \int_0^{R_{\text{max}}} s(r) 4\pi r^2 dr, \quad N = \int_0^{R_{\text{max}}} n(r) 4\pi r^2 dr.$$
(3.20)

Обидві величини S і N можна вважати сталими в умовах експерименту (і, зокрема, під час ввімкнення потенціалу ґратки), що дозволяє отримати доступ до початкових значень ентропії та температури. Слід зауважити, що в якості альтернативи також можна ввести додаткову величину, що відповідає кількості ентропії, що додається в середньому кожній частинці Δs завдяки неконтрольованим процесам нагріву під час ввімкнення ґратки, як це було зроблено в роботі [143]. Нижче, для простоти та послідовності, будемо вважати, що зміна параметрів системи може здійснюватися адіабатичним чином ($\Delta s = 0$).

Для визначення початкової температури \tilde{T} у системі використовуємо вираз для ентропії фермі-газу при допущенні помірної довжини *s*-хвильового розсіювання a_s ($k_{\rm F}|a_s| < 1/2$) [157]

$$S \approx N \pi^2 \widetilde{T} / T_{\rm F},$$
 (3.21)

де $T_{\rm F}$ – температура Фермі для захопленого газу в пасці заданої геометрії. Формули (3.19)-(3.21) дозволяють встановити пряму відповідність між термодинамічними величинами до та після ввімкнення потенціалу оптичної ґратки. Отже, задачу можна ефективно вирішити за умови припущення адіабатичності процесу ввімкнення.

Порівняльний аналіз ентропії захоплених сумішей атомів, що мають різні амплітуди тунелювання. Щоб провести кількісний аналіз, необхідно вказати параметри Габбарда, які встановлюються максимально близькими до експериментальних значень [146]. Зокрема, для спрощення теоретичного опису та відповідно до рівнянь (3.19)-(3.21) береться аксіально-симетрична тривимірна пастка з частотою $\bar{\omega} = 2\pi \times 68.4$ Гц (тобто середнє геометричне трьох частот $\omega_{1,2,3}$ в [146]). Розглядаючи t = 174 Гц [146]), можна отримати амплітуду потенціалу пастки V = 0.015t у рівнянні (3.18). Щодо дисбалансів амплітуд тунелювання, зупинимось нижче на двох реалізаціях: (i) $t_{\uparrow} = t_{\downarrow} = t$ і (ii) $t_{\uparrow} = 0.54t$ and $t_{\downarrow} = 0.06t$. Оскільки V масштабується в одиницях t, то амплітуда потенціалу пастки ефективно більша у другій реалізації. Далі також припускається, що кількість частинок кожного спінового компонента N_{σ} можна настроїти незалежно, як і силу взаємодії U між компонентами можна можна змінювати за допомоги резонансів Фешбаха. Іншими словами, завжди можна вибрати оптимальні параметри Габбарда µ і U такими, щоб спостерігати найбільш можливі АФМ-впорядковані домени при заданій початковій температурі. Відповідно до досліджень двокомпонентних ферміонних сумішей з дисбалансом амплітуд (див. детальніше підрозділ 3.1), можемо встановити $\mu_0 = U/2$, таким чином, очікувати зазначені домени у центрі пастки, і $U = 10t^*$ з $t^* = (t_{\uparrow} + t_{\downarrow})/2$, що призводить до появи АФМ кореляцій при досить високих температурах (до $T \approx 0.5t^*$) в обох випадках.

На рис. 3.11 показано залежності ентропії на частинку S/N і, отже, початкову температуру \tilde{T} захопленого фермі-газу до ввімкнення оптичної ґратки від температури T. Можна зробити висновок, що в сумішах з великим дисбалансом тунелювання (друга реалізація) необхідно починати з нижчої початкової температури для наближення до режиму з АФМ кореляціями. Це може здатися суперечливим очікуванням на основі аналізу ентропії для однорідних систем, наведеного в підрозділі 3.1. Однак ефект стає зрозумілим з аналізу розподілів у координатному просторі, які наведені на рис. 3.12. Як можна помітити, ефект походить від меншої кількості ентропії, яку можна розподілити в сумішах із дисбалансом тунелювання через значну намагніченість оболонок за наявності потенціалу пастки. Зауважимо, що згідно з додатковим аналізом, і згідно з розподілами ентропії у координатному просторі, що показані на



Рис. 3.11. Залежність ентропії на частинку (ліва вісь) та початкової температури (при допущенні $\Delta s \rightarrow 0$, права вісь) від температури в простій кубічній ґратці, отриманої ДТСП для двокомпонентних сумішей з двома різними реалізаціями дисбалансу амплітуд тунелювання, $U = 10t^*$ і V = 0.015t. Сіра затінена смужка в нижній частині якісно вказує на амплітуду АФМ кореляцій в областях з $n \approx 1$. Більш точне значення $T_c^{(0)}$ для збалансованої суміші береться з [113].



Рис. 3.12. Розподіли густини n, намагніченості $m \equiv (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$, та ентропії на вузол ґратки s в гармонічній пастці з V = 0.015t, що обраховані ДТСП з наближенням локальної густини для трьох конкретних точок (1)-(3), обраних з рис. 3.11.

рис. 3.12, зменшення величини потенціалу пастки в t/t^* разів і відповідне збільшення загальної кількості частинок у системі не допомагає нівелювати основний ефект.

Стосовно потенційної компенсації феромагнітних оболонок, то їх наявність необхідна для забезпечення належного режиму параметрів у центрі пастки, оптимального для стану Z-AФM упорядкування. Таким чином, додавання до системи більшої кількості частинок менш рухливого (\downarrow) компонента призведе не тільки до конкуренції між різними типами AΦM упорядкування у центрі, але й до двох феромагнітних оболонок, які зазвичай розділені в реальному просторі (див. підрозділ 3.2 для деталей). Останній факт не дозволяє суттєво збільшити ентропію S/N, необхідну для спостереження за AΦM кореляцій дальнього діапазону.

Таким чином, індукування сильної асиметрії в амплітудах тунелювання двокомпонентних сумішей фермі-атомів у пастках не призводить до додаткових переваг з точки зору наближення до АФМ упорядкованого режиму з найвищою можливою початковою температурою до ввімкнення ґратки. Однак невелика (ненульова) асиметрія в амплітудах тунелювання може бути все ще дуже важливим інгредієнтом для спостережень за АФМ кореляцій дальнього діапазону, як показано в наступному аналізі.

Пряме спостереження $A\Phi M$ кореляцій та важливість контролю напряму для порушення симетрії. Розглянемо реалізацію, коли амплітуди тунелювання обох спінових компонентів можна вважати (а) приблизно або (б, в) суворо однаковими. У першому випадку вважається, що різниця амплітуд тунелювання невелика, щоб не впливати на термодинамічні властивості суміші, так що можна слідувати отриманій залежності для збалансованої суміші, показаної на рис. 3.11, але, у той же час, ця різниця є досить великою, щоб впливати на симетрію в гамільтоніані (3.1) контрольованим чином. Відповідно до підрозділів 3.1 та 3.2, при низьких температурах система віддає перевагу Z-A Φ M конфігурації, тобто A Φ M упорядкуванню з легкою віссю. В іншій границі строго рівних амплітуд тунелювання розглянемо два випадки: (б) присутній невеликий дисбаланс густини, так що система надає перевагу XY-A Φ M упорядкуванню, що відповідає легкій площині, і (в) суміш повністю збалансована, так що A Φ M стан відповідає спонтанному порушенню неперервної обертальної симетрії SU(2) у псевдоспіновому просторі.

В ході наступного аналізу обмежимось вимірюваннями на основі техніки мікоскопу для квантових газів, таким чином, безпосередньо можна спостерігати просторові кореляції, що включають кількість частинок кожного спінового компонента на всіх вузлах ґратки, які належать до певної площини тривимірної установки. Це означає, що кореляції легкої вісі (у напрямку Z тривимірного псевдоспінового простору) можна безпосередньо виміряти, але для отримання корисного сигналу з кореляцій легкої площини (ХУ-АФМ) потрібні, наприклад, додаткові $\pi/2$ -обертання в псевдоспіновому просторі, які слід виконати заздалегідь (для додаткових деталей див. також [144]). Останнє в ультрахолодних сумішах атомів лужних металів зазвичай виконується шляхом застосування додаткових радіочастотних імпульсів. Тому, з експериментальної точки зору, вищезгаданим реалізаціям симетрій відповідають наступні: (а) контроль як невеликого ненульового дисбалансу тунелювання, так і відповідної різниці густини компонент (для отримання слабких феромагнітних металевих оболонок у пастці), (б) збалансоване тунелювання і невеликий ненульовий дисбаланс густини та (в) збалансована суміш в обох аспектах.

Тепер, щоб перейти до кількісних оцінок у рамках ДТСП, уточнимо реалізації (а) та (б). Для випадку (а) беремо $t_{\uparrow} = 1.05t$, $t_{\downarrow} = 0.95t$, і $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$. При амплітуді V = 0.015t це призводить до поляризації $P = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/(N_{\uparrow} + N_{\downarrow}) \approx 0.09$, яка залишається майже постійною зі зміною температури T/t(або, аналогічно, S/N) у досліджуваній області. Отже, для випадку (б) беремо $t_{\uparrow} = t_{\downarrow} = t$ і $P \approx 0.09$, що відповідає $\Delta \mu = 0.07t$.

Далі, маючи доступ до основної величини, що цікавить, локальної намагніченості на вузлі $\mathbf{m}_i \equiv (\langle \hat{S}_i^X \rangle, \langle \hat{S}_i^Y \rangle, \langle \hat{S}_i^Z \rangle)$ як функції відстані r до центру пастки, можна відтворити очікувані зображення заселеності вузлів, наприклад, спін- \uparrow компонентом в координатному просторі при конкретних значеннях S/N. З цією метою ми проведемо моделювання Монте-Карло, де $(m_i^Z + n_i/2)$ використовується як ваговий коефіцієнт для зайняття вузла *i* частинкою зі спіном \uparrow . Зокрема, розглядаючи два граничних випадки при n = 1, (i) $m_i^Z = \pm 1/2$ – вузол завжди зайнятий (незайнятий) спін- \uparrow компонентом, таким чином вузол *i* належить до загальної структури шахової дошки; (ii) $m_i^Z = 0$ – вузол *i* може належати або ні до структури шахової дошки з однаковою ймовірністю.

Зауважимо, що, з точки зору обчислювального аналізу та експериментальних спостережень, зображення для випадку (а) можна отримати безпосередньо завдяки АФМ упорядкуванню легкої вісі, в той час як у випадку (б) впорядкування відбувається в площині XY. Тому в експерименті потрібно виконувати додаткове обертання $\pi/2$ у просторі псевдоспіну. У той же час, у обчислювальній процедурі, де обертальна симетрія U(1) у площині XY є спонтанно порушеною, для спрощення аналізу (наприклад, у напрямку X_0), потрібно враховувати неконтрольовані ступені вільності обертальної симетрії шляхом множення намагніченості на числовий коефіцієнт, що відповідає усередненню довжини проекції випадкового вектора на вісь X_0 , таким чином, $m_i^Z = 2m_i^{X_0}/\pi$. У випадку (в) додаткові обертання не потрібні з експериментальної точки зору, але з обчислювального боку такі ж аргументи повинні бути застосовані і для SU(2)-симетричної системи, таким чином, $m_i^Z = m_i^{Z_0}/2$, де Z_0 позначає фіксований напрямок у числовому аналізі.

Розглядаючи усі три випадки (а)-(в) на рис. 3.13, можна безпосередньо побачити, що ефекти, обумовлені керованим порушенням симетрії, можуть бути значними. Зокрема, можна зробити висновок, що при реалізації (а) при S/N = 0.6 кореляції дальнього діапазону набагато простіше спостерігати безпосередньо за допомогою техніки мікроскопу для квантових газів або бреґґовського розсіювання.

Нарешті, якщо припустити, що в експерименті можна виконати дода-



Рис. 3.13. Характерні розподіли одного атомного компонента (\uparrow) по вузлах ґратки (заповнені квадратні комірки) при двох різних значеннях ентропії на частинку і різних типах керованого порушення симетрії у захоплених газах. Області з $n \approx 1$, де можуть розвиватися АФМ кореляції, позначені колами.

тковий статистичний аналіз, іншими словами, можна порівняти деякий кінцевий набір зображень в координатному просторі (подібний до зображених на рис. 3.13) з фіксованими параметрами системи (включаючи температуру та тип реалізації), можна визначити середній розмір найбільшого домену та проаналізувати його залежність від температури та типу керованого порушення симетрії. З цією метою застосуємо процедуру, аналогічну алгоритму Хошена-Копельмана в теорії перколяції [158] з урахуванням структури шахової дошки для доменів, що призводить до результатів, представлених на рис. 3.14. Слід також зазначити, що зображення, використані для рис. 3.13 як раз були взяті близькими до найбільш вірогідних значень F/F_0 (див. рис. 3.14) з відповідних наборів Монте-Карло зразків.

Підсумовуючи, можна зробити висновок, що наведений статистичний аналіз допомагає отримати більш корисну інформацію про АФМ кореляції, якщо його додавати до одиничних знімків, показаних на рис. 3.13. У всіх



Рис. 3.14. Залежності середнього розміру найбільшого АФМ упорядкованого домену всередині області $r \leq 12a$ (із загальною кількістю вузлів $F_0 = 441$) від ентропії на частинку в системі. Кожна точка відповідає усередненню понад 100 Монте-Карло зразків (одиничних зображень в координатному просторі, найбільш характерні з яких представлені на рис. 3.13).

трьох реалізаціях (а)-(в) ефекти, що виникають завдяки магнітним кореляціям, може бути добре ідентифіковано та відокремлено від некорельованого фонового сигналу. З рис. 3.14 можна встановити, що таке фонове значення $F/F_0 \approx 0.13$ для системи, що досліджується. Однак, навіть у цьому випадку помітна істотна перевага реалізації (а), яка має найбільше співвідношення сигнал/шум на всьому інтервалі ентропії нижче $S/N \approx 0.9$. Додаткові оцінки, що спираються на ДТСП аналізі, показують, що для двовимірної системи з геометрією квадратної ґратки отримані залежності якісно залишаються незмінними при відповідному зменшенні значень S/N (залежно від параметрів конкретної експериментальної установки) приблизно на 20%.

3.4. Вплив ефектів анізотропії оптичних ґраток на многочастинкові властивості фермі-газів.

Одною з вирішальних характеристик ґраткових систем є їх просторова геометрія, оскільки вона суттєво впливає на всі інші фізичні властивості. Експериментально геометрія оптичної ґратки визначається, між іншим, просторовим розташуванням лазерних променів, а можливість захоплених атомів тунелюватися в межах ґратки потім налаштовується за допомоги інтенсивності лазера [69, 70]. Зокрема, починаючи з ізотропної кубічної ґратки і поступово збільшуючи інтенсивність лазера уздовж окремого просторового напряму, утворюється система, що складається з відокремлених шарів квадратних ґраток, паралельних один іншому і, таким чином, ефективно має місце кросовер вимірності простору від d = 3 до d = 2 (інший тип кросоверу, від d = 3 до d = 1, вивчався у відповідному контексті в роботах [143,159]. Цей підрозділ присвячено аналізу ефектів такого кросовера вимірності для квантового газу ферміонів з локальною взаємодією відштовхування. Зокрема, вивчаються впорядковані фази системи та її термодинамічні властивості. Використовуючи комбінацію ДТСП та наближення локальної густини, проводяться розрахунки для випадку додаткового зовнішнього потенціалу (гармонічної пастки) та аналізуються розподіли частинок у координатному просторі, а також ентропія системи в різних режимах параметрів.

Система та модель. Теоретичний опис будується в рамках моделі Габбарда (див. також підрозділ 1.3.1), а просторова анізотропія визначається співвідношенням параметрів t_z/t , де параметри тунелювання у площині xyвстановлюються рівними ($t_x = t_y \equiv t$), а t_z змінюється між нулем і t ($0 \le t_z/t \le$ 1). Таким чином, розглядається гамільтоніан Фермі-Габбарда наступного типу:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i} \sum_{\sigma} (V_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}, \quad (3.22)$$

де оператори і величини є тими ж самими, як і в моделі (1.76) з тими ж самими межами застосовності. Єдиною важливою різницею є те, що амплітуди тунелювання t_{ij} , які визначаються згідно з рівнянням (1.74), можуть приймати значення в зазначених вище інтервалах.

Особливості методу. Аналіз проводиться із застосуванням ДТСП. Як зазначено в підрозділі 1.3.5, для вирішення ґраткової задачі представляється модель Андерсона (1.91), яка розв'язується для обраного вузла ґратки. Опис проводиться в рамках формалізму функцій Гріна, в термінах яких використовуються рівняння Дайсона (1.95) та застосовуються умови самоузгодження (1.102). В якості домішкового розв'язувача обирається метод точної діагоналізації з максимальним числом орбіталей $n_s = 5$ для кожного з двох спінових компонентів у гамільтоніані (1.91).

Проекція локальної задачі домішки на задачу ґратки проводиться за допомоги рівняння (1.111), що дозволяє вивчати стани з порушеною симетрією, а саме двопідґраткові типи впорядкування. У збалансованому випадку, що вивчається у цьому підрозділі (тобто, дисбаланси в амплітудах тунелювання або хімічних потенціалів між двома псевдоспіновими компонентами відсутні) є додаткова симетрія, $\zeta_{\sigma}^{A} = \zeta_{\sigma}^{B}$, що дозволяє скоротити обчислення, пов'язані з рішенням домішкової задачі, до одного вузла.

Зауважимо, що (за винятком двосторонньої структури для умови самоузгодженості) геометрія ґратки входить у чисельні розрахунки лише через нормовану густину станів $D(\varepsilon)$ невзаємодіючого газу на ґратці, а саме – через рівняння (1.111). Як видно з рис. 3.15, ця величина сильно залежить від можливих анізотропій у системі. У роботі [11] були також отримані аналітичні вирази для $D(\varepsilon)$ як функції просторової анізотропії. Надалі, досліджується вплив анізотропій тунелювання на основні властивості такої системи багатьох частинок.

Передуючи наступному обговоренню, слід зазначити, що ДТСП обчислення для двовимірної системи передбачають АФМ упорядкування дальнього діа-



Рис. 3.15. Профілі нормованої густини станів (DOS) невзаємодіючого газу в періодичному потенціалі ґратки при $t_x/t = t_y/t = 1$ та різних значеннях t_z .

пазону, тоді як добре відомо, що згідно з теоремою Мерміна-Вагнера-Гогенберга таке упорядкування може виникати в ізотропній SU(2)-симетричній моделі Габбарда при ненульових температурах лише для d > 2 [160]. Таким чином, у низьковимірних однорідних системах ($d \le 2$) упорядкування для цієї моделі можливе лише при T = 0. Однак ДТСП результати для цих систем мають фізичну актуальність – обчислена температура Нееля дає хорошу кількісну оцінку для областей, де з'являються АФМ кореляції короткого діапазону в системі [110].

Результати з магнітного впорядкування. Як і очікувалося, на основі відомих граничних випадків для ізотропного тунелювання у квадратних ($t_z/t = 0$) та кубічних ($t_z/t = 1$) геометріях ґраток, спостерігається збільшення АФМ упорядкованої області зі збільшенням t_z , як показано на рис. 3.16. Зокрема, при сильному зв'язку ($U \gtrsim 5t$) критична температура значно зростає, в області проміжної сили взаємодії U/t лінія фазового переходу залишається приблизно незмінною, але при низькому U/t АФМ фаза більше пригнічується.



Рис. 3.16. Фазові діаграми для АФМ упорядкованих фаз з амплітудою тунелювання $t_z/t = 0, 0.5, 1$, що обраховані ДТСП при заповнені зони наполовину ($\mu = U/2$). Параметр порядку – абсолютне значення змінної намагніченості $m = |n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}|$ позначене кольором у площині UT.

Така поведінка стає правдоподібною, коли ми розглянемо відомі аналітичні результати для граничних випадків.

У випадку $U \ll Zt$ критична температура T_c визначається як

$$T_c \propto \sqrt{Z} t e^{-c \frac{\sqrt{Z}t}{U}},$$

де Z – координаційне число ґратки, c – позитивна константа [75]. У цьому режимі експоненціальне пригнічення домінує над лінійним зростанням із збільшенням координаційного числа Z, що відповідає збільшенню t_z у досліджуваному випадку. Для протилежного випадку сильного зв'язку U ggZtзастосовується спінова модель Гейзенберга (див детальніше підрозділ 1.3.3). У рамках середньопольового опису T_c пропорційна константі АФМ зв'язку J,

$$T_c \propto J = \frac{Zt^2}{U}$$

Як видно з рис. 3.16, середньопольове співвідношення між критичними температурами в простих кубічних і квадратних ґратках, $T_c^{(3d)}/T_c^{(2d)} = 3/2$, приблизно виконується вже при $U \gtrsim 20 t$.

Стисливість та подвійна заселеність вузлів ґратки. Електронна про-



Рис. 3.17. Контурні лінії $\kappa_e = 0.01/t$ (суцільні) та лінії фазового переходу до АФМ стану (пунктирні) для $t_z/t = 0, 0.5, 1$. Для більших t_z кросовер до стану ізолятора зсувається в бік більших амплітуд взаємодії.

відність є важливою характеристикою у фізиці твердого тіла. Однак в системах ультрахолодних атомів в оптичних ґратках простіше виміряти стисливість, яка якісно пов'язана з провідністю: електронна система є провідником, якщо багатолектронний стан є стисливим. Ця електронна стисливість визначається як похідна електронної густини по хімічному потенціалу, $\kappa_e \equiv \frac{\partial n}{\partial \mu}$. На рис. 3.17 показано порівняння контурних ліній з $\kappa_e = 0.01/t$ для конкретних значень t_z . Зсув лінії контуру в бік більшої сили взаємодії для більших t_z у невпорядкованій фазі показує, що при певних значеннях параметрів U і T експериментально можливо змінити стисливість системи в широкому діапазоні просто змінюючи параметр тунелювання t_z (тобто, змінюючи інтенсивність лазера в одному напрямку) та підтримуючи постійними U і T.

Середня подвійна заселеність вузлів ґратки, що визначається як $D_i = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$ є ще одним корисним показником для ступеня локалізації ферміонів і є важливою величиною, що має велике значення в експериментах з ультрахолодними квантовими газами [161–163]. В режимі сильного зв'язку та низьких температур було виявлено збільшення D_i зі встановленням АФМ кореляцій, які виникають зі зниженням температури у системі [109, 164]. Для того, щоб проаналізувати взаємозв'язок подвійної заселеності та магнітного

впорядкування, побудуємо обидві величини D, і m як функції температури на одній діаграмі, див. рис. 3.18. Можна чітко побачити, що зростання намагніченості збігається з підвищенням подвійної заселеності при великих силах взаємодії відповідно до результатів, наведених у [109]. Також видно, що при заданих системних параметрах для двовимірного випадку $(t_z/t = 0)$ результати добре узгоджуються з тими, що отримані за допомогою чисельної методики розширень пов'язаних кластерів [164].. Однак у тривимірному випадку отримані результати вказують на більш сильні залежності порівняно з більш точними результатами наближення динамічного кластера [112]. При проміжній амплітуді взаємодії сигнал стає менш вираженим, і нижче певного значення U/t, навіть спостерігається зворотня поведінка: подвійна заселеність плавно збільшується безпосередньо перед вступом системи в антиферромагнітну фазу, а потім зменшується зі збільшенням намагніченості. Порівнюючи діаграми для різних t_z, слід зауважити, що ефект посилення подвійної заселеності через $A\Phi M$ кореляції виникає при більших U для більших значень t_z , наприклад, при $U \approx 10t$ для $t_z = t$ і при $U \approx 8t$ для $t_z = 0$. Ці значення відповідають парамагнітній області кросоверу між металевими та ізолюючими станами, яка зміщується в область меншої амплітуди взаємодії для менших значень t_z (див. також рис. 3.17).

Загалом спостерігається більш висока подвійна заселеність при меншій силі взаємодії. Цей ефект прямо зрозумілий з модельного гамільтоніана (3.22): подвійне заселення певного вузла ґратки стає енергетично несприятливим у разі великої амплітуди взаємодії. Збільшення подвійної заселеності в АФМ фазі в границі сильного зв'язку пов'язане з ефектом віртуального тунелювання: в АФМ упорядкованій системі кожна частинка оточена частинками з протилежним спіном, що дозволяє їй тунелювати практично до всіх Z найближчих сусідів і завдяки цьому знижувати свою енергію, тоді як у ПМ режимі лише 50% найближчих сусідів мають протилежний спін (див. також [109]). У режимі слабкого зв'язку парамагнітний стан є металевим, тобто частинки є делокалі-



Рис. 3.18. Подвійна заселеність (суцільні лінії) та намагніченість (пунктирні лінії) як функції температури для різних значень U та $t_z/t = 0, 0.5, 1$. При великих значеннях амплітуди взаємодії спостерігається виражене збільшення подвійної заселеності нижче температури Нееля.

зованими. Таким чином, подвійна заселеність, як правило, є великою. Однак, температура впливає на якість металевого стану: при більш високих температурах делокалізація частинок порушується термальними флуктуаціями. Отже, делокалізація і, відповідно, подвійна заселеність збільшуються при нижчих значеннях температури. Своєрідні особливості у відповідних кривих виникають при переході в антиферомагнітну фазу: подвійна заселеність зменшується, оскільки АФМ упорядкування відкриває щілину в спектрі зарядових збуджень, тобто система стає ізолятором (так званий режим антиферомагнетика Слетера).

Щоб проаналізувати, як розмірність системи впливає на подвійну заселеність, виберемо окремі пари точок на магнітній фазовій діаграмі, які вказані на рис. 3.19, для яких проаналізуємо явну залежність D від значення t_z . Зростання D особливо сильне, коли зміна t_z з нуля до t індукує АФМ-ПМ фазовий перехід, як це відбувається у точках 1 та 3. У точках 2 та 4–6 фаза не змінюється при будь-якому значенні $t_z \in [0, t]$, тому криві мають майже однакові нахили. Отримана залежність подвійної заселеності від параметра тунелювання t_z може бути використана для виявлення наявності магнітних кореляцій або для вимі-



Рис. 3.19. Положення точок на магнітній фазовій діаграмі з лініями переходів між фазами ПМ та АФМ для $d = 2 (t_z/t = 0)$ і $d = 3 (t_z/t = 1)$ та порівняння залежностей подвійних заселеностей D для сусідніх пар. Для кожної кривої значення для T і U зберігаються постійними. (1): U = 2.5t, T = 0.07t, (2): U = 10t, T = 0.2t, (3): U = 15t, T = 0.35t, (4): U = 2.5t, T = 0.25t, (5): U = 17.5t, T = 0.4t, (6): U = 10t, T = 0.55t.

рювання температури системи, оскільки D є експериментально вимірюваною величиною, а t_z – параметром, що легко налаштовується, а амплітуда взаємодії U – це відома величина, що експериментально встановлюється незалежними методами. Однак у роботі [164] було зазначено, що збільшення подвійної заселеності у розглянутому режимі параметрів зустрічається не тільки в центрі пастки з ізолятором Мотта, але і в областях з n < 1. Таким чином, для ідентифікації збільшення D як сигналу АФМ упорядкування в експериментах слід додатково переконатися, що густина у вимірюваній області пастки близька до n = 1.

Аналіз ентропії. В експериментах з ультрахолодними атомами система

характеризується природним чином загальним числом частинок N та загальною ентропією S. Ці величини в ідеалі можна підтримувати фіксованими, оскільки система ізольована від навколишнього середовища, а основні параметри можна змінювати адіабатичним чином. Для теоретичного визначення ентропії зазвичай посилаються на визначення зі статистичної термодинаміки: $S = \ln \Omega \ (k_B = 1)$, де Ω – кількість можливих мікростатів розглянутої системи. У моделі Габбарда в рамках однозонного наближення (3.22) один вузол можна знайти у чотирьох різних станах, тому максимальна ентропія на вузол задається $s_{\text{max}} = \ln(4)$. Це граничне значення досягається при половинному заповненні зони (кількість частинок збігається з кількістю вузлів) і відсутності взаємодії U = 0, де всі чотири можливі стани мають однакову ймовірність в рамках мікроканонічного опису. Однак у випадку сильної взаємодії система стає ізолятором Мотта з лише двома можливими станами ($|\uparrow\rangle$ та $|\downarrow\rangle$), так що верхнє граничне значення для ентропії задається $s = \ln(2) \approx 0.69$. Розрахунки комбінованим методом ДТСП з наближенням локальної густини дають значення очікування локальної густини частинок *n* при різних значеннях хімічного потенціалу. Обраховуючи густину частинок *n* додатково й при різних температурах, використовується співвідношення Максвелла, з якого визначається ентропія, що припадає на вузол ґратки згідно рівняння (3.5).

Рис. 3.20 показує отримані ізоентропічні криві в площині T/U, отримані для різних значень параметра тунелювання t_z . Природно, великі значення ентропії виявляються при більш високій температурі. Спостерігаються характерні форми ізентропічних кривих для малих значень ентропії ($s \leq 0.7$), які мають слабкий нахил при слабкій взаємодії, різко згинаються при досягненні АФМ режиму, а потім слідують за викривленням границі переходу магнітної фази (чорна крива). У лівій частині фазової діаграми можна спостерігати так званий ефект охолодження Померанчука: збільшення сили взаємодії U при постійній ентропії призводить до зниження температури [108]. Ізентропічні криві зміщуються в бік більших значень T і U, коли t_z збільшується, що



Рис. 3.20. Ізентропічні криві у площині UT, що обчислены ДТСП при половинному наповненні зони ($\mu_0 = U/2$) для параметрів тунелювання $t_z/t = 0, 0.6, 1.$

робить область з ефектом Померанчука більше. Однак, згідно з проведеним додатковим аналізом, можна зробити висновок, що це розширення в основному базується на збільшенні ширини зони. Порівнюючи наведені результати в граничних випадках $t_z/t = 0$ і $t_z/t = 1$ з посиланнями [164] і [112, 133] відповідно, спостерігаються майже однакові кількісні завищення критичні ентропії у підході ДТСП. У той же час, якісна поведінка зберігається і добре узгоджується в обох граничних випадках, і тому очікується, що результати в області кросовера вимірності залишаються важливими.

Для аналізу ефектів анізотропії тунелювання побудуємо залежності для температури, яка масштабована на ширину зони W з метою виключення ефекту її розширення, як функцій параметра t_z для конкретних значень ентропії. На рис. 3.21 показані ці графіки для чотирьох різних амплітуд взаємодії. Ми спостерігаємо, що загалом у випадку d = 2 ($t_z/t = 0$) масштабована температура при заданому значенні ентропії більша, ніж у випадку d = 3 ($t_z/t = 1$). Цей ефект можна легко зрозуміти, якщо розглянути ентропію як міру невпорядкованості: перехід від d = 2 до d = 3 збільшує кількість найближчих сусідів з Z = 4 до Z =6, відкриваючи ще два варіанти тунелювання для кожного вузла ґратки (тобто, у позитивному та негативному напряму вздовж z). Отже, ентропія системи



Рис. 3.21. Поведінка ліній зі сталою ентропією на фазових діаграмах з величинами t_z/t і T/W вздовж осей, де $W = 8t + 4t_z$ – ширина зони для ідеального газу, для набору амплітуд взаємодії U/t = 0, 3.5, 6, 8.5.

повинна зростати, але оскільки її значення зберігається фіксованим, її спряжена термодинамічна змінна – температура повинна зменшуватись. Однак зниження T/W взагалі не є монотонним: для конкретних значень U та s ізоентропічні криві демонструють мінімум при проміжних значеннях t_z . Цей ефект пов'язано з фазовими переходами у системі. Нахил ізентропічних кривих стає позитивним, коли спочатку АФМ упорядкована система (області, зафарбовані сірим на рисунку) переходить у парамагнітний стан. Знову ж таки, цей ефект може бути пояснений на залежностях для ентропії: у АФМ фазі спіни впорядковуються за шаховим порядком, так що тунелювання можливе для кожного з найближчих сусідніх вузлів. Однак у парамагнітній фазі в середньому лише 50% сусідніх вузлів зайняті ферміонами з протилежним спіном. Таким чином, із переходом у парамагнітний стан ентропія повинна зменшуватися, і завдяки тому ж аргументу, що також наведено вище, температура зростає.

Ознаки переходів, що індуковані анізотропією, в координатних розподілах величин. Розподіли густини атомів у координатному просторі є експериментально вимірюваними величинами за допомоги технік мікроскопу для квантових газів [142, 149–151, 165]. У наближенні локальної густини це еквівалентно вимірюванню густини як функції хімічного потенціалу для заданої температури. Використовуючи ДТСП з наближенням локальної густини, про-



Рис. 3.22. Розподіли густини (суцільні лінії) та намагніченості (пунктирні лінії) в гармонічній пастці для двох граничних випадків $t_z/t = 0$ (тонкі сині лінії) та $t_z/t = 1$ (товсті красні лінії), в режимах слабкої (U = 3t) та сильної (U = 13t) взаємодії при різних температурах, що позначені точками на діаграмі праворуч. Амплітуда гармонічного потенціалу пастки V = 0.1t, a – стала ґратки.

аналізуємо розподіли величин для різних режимів параметрів системи, які позначені точками у діаграмі праворуч на рис. 3.22.

Зауважимо, що температури обрані таким чином, щоб на нижніх значеннях d = 2 та d = 3 системи знаходились в різних магнітних фазах: у режимі слабкого зв'язку при U = 3t та T = 0.1t двовимірна система знаходиться в стані АФМ ізолятора, тоді як тривимірна система знаходиться у стані парамагнітного металу (хоча й дуже близька до лінії магнітного переходу, тому існує ненульова намагніченість). Аналогічно, в режимі сильної взаємодії при U = 13t та T = 0.37t випадок d = 2 відповідає парамагнітному ізолятору, тоді як d =3 система знаходиться в фазі АФМ ізолятору. У кожному випадку густина частинок дорівнює одиниці в центрі пастки і зменшується зі збільшенням відстані від центру пастки, щоб остаточно зникнути при певних значеннях r. Форма розподілу густини відрізняється залежно від значень параметрів U та T. У режимі сильної зв'язку (U/t = 13) обидва профілі густини демонструють широке плато в центрі пастки, що вказує на стан ізолятора. Однак у разі слабкої взаємодії це плато може бути слугувати ознакою АФМ упорядкованого стану: воно з'являється лише тоді, коли є значна намагніченість. Таким чином, в режимі слабкого зв'язку особливості профілю густини в експерименті можуть бути використані для виявлення фази АФМ без вимірювання інших локальних кореляторів. В інших режимах залишається важливим отримати доступ до додаткових величин, таких як намагніченість та подвійна заселеність, щоб визначити фазу системи. Слід також зазначити, що різкі зміни в кривих, що спостерігаються у випадку U/t = 3, T/t = 0.1 (d = 2) та U/t = 13, T/t = 0.37 (d = 3), на границях АФМ фази, як відомо, є особливостями опису наближенням локальної густини і розгладжуються в реальній системі завдяки ефектам близькості (див., наприклад, рис. 3.3).

Висновки до розділу 3

Результати досліджень, представлених у даному розділі, опубліковано в статтях [9–12]. Серед основних результатів в якості висновків можна виділити наступні:

• Продемонстровано переваги незбалансованих двокомпонентних сумішей ультрахолодних ферміонів над збалансованими сумішами для наближення до квантового магнетизму. Для різних значень дисбалансу порівняно між собою критичні температури та ізоентропічні криві, отримані в рамках ДТСП, і показано, що для незбалансованих сумішей критичну область може бути досягнуто при більш високих значеннях ентропії, ніж для збалансованих сумішей. Також показано, що ультрахолодні фермі-гази з незбалансованими амплітудами тунелювання в упорядкованому стані Нееля мають додатковий параметр порядку у вигляді хвилі зарядової густини, що забезпечує їх альтернативною ознакою для виявлення квантового магнетизму в оптичних ґратках.

• Вивчено антиферомагнітно впорядковані фази, які виникають у двокомпонентних ультрахолодних ферміонних сумішах з дисбалансом амплітуд тунелювання і густини. Аналіз проведено в рамках ДТСП та її узагальнення для координатного простору при ненульовій температурі. Вказується, що два типи дисбалансу надають перевагу різним типам АФМ упорядкованих фаз: дисбаланс тунелювання сприяє феримагнітній фазі, в той час як дисбаланс густини призводить до нахиленої антиферомагнітної фази. За відсутності дисбалансу густини теоретично показано переваги масово незбалансованих сумішей, тобто підвищення критичної температури та можливість охолодження системи шляхом адіабатичної зміни сили взаємодії до температур нижчих, ніж це можливо для сумішей з однаковими амплітудами тунелювання. Керуючись точними значеннями критичної ентропії у граничних випадках моделей Гейзенберга та Ізінга, виявлено, що ДТСП дає кращий прогноз критичної ентропії для незбалансованих сумішей порівняно зі збалансованими, що робить системи з дисбалансом тунелювання ще вигіднішими для спостереження явищ магнітного впорядкування в оптичних ґратках.

• За наявності обох типів дисбалансу густини і тунелювання отримано фазові діаграми з відповідними фазовими переходами першого роду між різними магнітними станами. Виявлено, що АФМ впорядкування є найбільш нестабільним до термальних флуктуацій в областях з потрійною точкою. З цією метою проведено аналіз стабільності впорядкованих фаз відносно дисбалансу густини при різних температурах. При нульовій температурі виявлено, що при всіх поляризаціях розвивається АФМ впорядкування. Також отримано розподіл густини та намагніченості в координатному просторі незбалансованих сумішей у потенціалах гармонічних пасток. Показано, що, залежно від загальної поляризації, суміш з різними амплітудами тунелювання може мати різні впорядковані фази в центральній частині та різні магнітні оболонки. Детальний опис цих ефектів може допомогти не тільки у підготовці сумішей до відповідних магнітних рівноважних станів, а й у виявленні АФМ кореляцій в ультрахолодних газах.

• Теоретично вивчено перспективи оптичних ґраток, залежних від стану, реалізованих у роботі [146], з метою наближення та спостереження квантових станів багатьох частинок з дальніми магнітними кореляціями в ультрахолодних двокомпонентних ферміонних сумішах. Зроблено висновок, що з урахуванням зовнішнього гармонічного потенціалу немає додаткових переваг сумішей з великим дисбалансом амплітуд тунелювання для наближення до квантового магнетизму при фіксованому значенні ентропії на частинку в системі. Найсильніший ефект у цьому випадку виникає від структури металевих оболонок, які мають ненульову намагніченість і, таким чином, містять менше ентропії, ніж у збалансованому випадку. Проаналізовано можливість керувати напрямом порушення спінової симетрії за допомоги оптичних ґраток, тунелювання в яких залежить від внутрішнього стану атомів. Показано, що системи з невеликим ненульовим дисбалансом тунелювання мають чіткі переваги серед інших для спостережень на основі вимірювань кількості частинок і, зокрема, в розроблених експериментальних методах, що використовують квантовий газовий мікроскоп для ультрахолодних ферміонів [149–154]. Отримано характерні розподіли густини атомів в координатному просторі ґраток та проведено статистичний аналіз їх структури, який дозволив визначити значення для ентропії на частинку, що відповідає появі АФМ упорядкованих доменів в системі.

• Вивчено вплив анізотропії тунелювання на фізичні властивості фермігазів в оптичних ґратках з простою кубічною геометрією. Аналіз побудовано на обчисленнях ДТСП для параметрів тунелювання $t_x = t_y \equiv t$ і $t_z/t \in$ [0.0, 1.0]. Виявлено, що всі характерні властивості системи багатьох частинок і квантові фази системи залежать від t_z . Зокрема, проаналізовано суттєві зміни на магнітних фазових діаграмах, які залежать від сили взаємодії нетривіальним способом: критична температура для АФМ фази зменшується з t_z при малих значеннях U, але збільшується з t_z в режимі сильного зв'язку. Така поведінка узгоджується з аналітичними виразами із підходів середнього поля для граничних випадків $U \gg Zt$ та $U \ll Zt$, які мають різну залежність від координаційного числа Z. Аналіз локалізаційних властивостей показав, що експериментально можливо змінити стисливість системи, просто змінивши t_z і підтримуючи постійними інші параметри (U і T). Подвійна заселеність збільшується зі збільшенням t_z і показує виражену залежність від магнітної фази системи. Таким чином, в експериментах подвійну заселеність можна використовувати для визначення наявності магнітних кореляцій у системі або для вимірювання температури.

• У поєднанні з наближенням локальної густини проаналізовано ентропію та профілі густини у координатному просторі для системи в зовнішньому гармонічному потенціалі пасток. При аналізі ентропії виявлено, що область з наявністю ефекту Померанчука збільшується зі збільшенням t_z . При постійній ентропії температура зазвичай знижується з t_z , що просто пояснюється збільшенням координаційного числа. Однак, коли спочатку АФМ упорядкована система переходить у парамагнітний стан, температура знову підвищується. Аналіз розподілу густини частинок у координатному просторі показав, що при слабкій силі взаємодії перехід у АФМ упорядкований стан відповідає появі плато в профілі густини. Таким чином, ця ознака також може бути використана для виявлення антиферомагнітної фази в експериментах.

РОЗДІЛ 4

НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНІ ФАЗИ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ ФЕРМІ-ГАЗІВ В ОПТИЧНИХ ҐРАТКАХ

4.1. Магнітне впорядкування трикомпонентних атомних сумішей в оптичних ґратках.

Мотивація досліджень. Багатокомпонентні суміші ультрахолодних ферміонів в оптичних ґратках є новими та дуже перспективними системами багатьох частинок, які привертають увагу з точки зору наявних фундаментальних відкритих питань, таких як колективні збудження за наявності високої симетрії, кольорова надплинність, високоспінового магнетизму та немагнітного основного стану, а також наслідків порушення конкретних симетрій у високосиметричних моделях. Завдяки вражаючому експериментальному прогресу, досягнутому за останні кілька років, вже було помічено ряд цікавих явищ, властивих цим системам [98,166–169]. Для дослідження магнітних властивостей основного стану в фермі-газах, що складаються як з двох, так і з більшого числа атомних компонентів, необхідним є додаткове охолодження в цих системах. У цьому напрямку нещодавно було досягнуто важливого прогресу у розумінні механізмів охолодження [96, 170–172] та детектування магнітних кореляцій короткого діапазону [143] в оптичних ґратках. Тому, щоб поєднати прогрес в обох напрямках і продовжувати дослідження далі, потрібні кількісні прогнози щодо магнітних фаз у ультрахолодних сумішах трьох і більше компонентів в оптичних ґратках.

Було проведено ряд важливих теоретичних розрахунків з метою вивчення фаз основного стану у високоспінових ферміонних сумішах; зокрема, трикомпонентних сумішей в контексті кольорової надплинності та тріонних фаз [173–176]. Для взаємодій відштовхування запропоновано багато магнітних основних станів при різних заповненнях зони та нульовій температурі як у випадку повної [177], так і порушеної [178] SU(3) симетрії в гамільтоніані Габбарда. При заповненні однією частинкою на один вузол (заповнення зони на 1/3) та сильних взаємодіях ці суміші можуть бути описані відповідною моделлю Гейзенберга. Як це було аргументовано у роботі [179], система, що описується SU(3)-симетричною моделлю Гейзенберга, зазнає переходів між різними підґратковими АФМ упорядкованими станами у простих геометріях ґраток при ненульовій температурі.

Що стосується моделей з вищими симетріями, то тривають дискусії щодо основних станів SU(4)-симетричної моделі Габбарда та відповідних моделей Гейзенберга через різні, а іноді і суперечливі теоретичні передбачення [180–183]. Стосовно ж моделей з симетріями SU($N \geq 5$), то більшість досліджень сходяться на тому, що магнітний порядок дальнього діапазону пригнічується навіть при нульовій температурі [180, 184–187]. У цьому підрозділі вивчимо властивості магнітного упорядкування в трикомпонентних сумішах, що описуються гамільтоніаном Фермі-Габбарда при помірних амплітудах локальної взаємодії компонентів.

Модель. Оскільки фізика трикомпонентних ферміонних сумішей досить багата, обмежимося наближенням сильного зв'язування в періодичному потенціалі, що діє для досить глибоких оптичних ґраток та низького їх заповнення атомами. Зокрема, будемо виходити з гамільтоніану Фермі-Габбарда наступного типу:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{\alpha} \left(\hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha} + \text{H.c.} \right) + \sum_{i,\beta > \alpha} U_{\alpha\beta} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} + \sum_{i,\alpha} (V_i - \mu_{\alpha}) \hat{n}_{i\alpha}, \qquad (4.1)$$

де t_{α} – амплітуда тунелювання атомного компонента $\alpha = \{a, b, c\}, \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger}(\hat{c}_{i\alpha})$ – відповідний оператор народження (знищення) атома α на вузлі ґратки i, позначення $\langle ij \rangle$ означає підсумовування тільки по сусідніх вузлах, а $U_{\alpha\beta}$ – амплітуда локальної взаємодії відштовхування ($U_{\alpha\beta} > 0 \ \forall \alpha, \beta$) двох різних
компонентів з густинами $\hat{n}_{i\alpha}$ і $\hat{n}_{i\beta}$ ($\hat{n}_{i\alpha} = \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{c}_{i\alpha}$). В останньому доданку V_i – амплітуда зовнішнього (наприклад, гармонічного) потенціалу пастки на вузлі *i*, а μ_{α} – хімічний потенціал компонента α . Зауважимо, що гармонічний потенціал вважається незалежним від атомних станів. Гамільтоніан (4.1) відповідає однозонному наближенню; іншими словами, розглядається випадок досить сильного потенціалу ґратки, $V_{\text{lat}} \gtrsim 5E_r$, де E_r – енергія віддачі атомів.

Використовуючи перетворення Шріффера-Вольфа в границі сильного зв'язку $t_{\alpha} \ll U_{\alpha\beta}$, див. також підрозділ 1.3.3, у випадку заповнення зони на 1/3, $\sum_{\alpha} n_{i\alpha} \approx 1$, можна привести гамільтоніан (4.1) до ефективної спінової моделі. Для системи, що досліджується, таке перетворення призводить до наступного визначення:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = -\sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\beta > \alpha} \left(J_{\alpha\beta}^{\parallel} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\beta} - J_{\alpha\beta}^{\perp} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{i\beta} \hat{c}_{j\beta}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha} \right) + \left(\mu_{a} - \mu_{b} \right) \sum_{i} \hat{S}_{3i} + \frac{1}{\sqrt{3}} (\mu_{a} + \mu_{b} - 2\mu_{c}) \sum_{i} \hat{S}_{8i} , \qquad (4.2)$$

де \hat{S}_k – оператор проекції псевдоспіну (генератор групи SU(3)) на вісь k в ефективному восьмивимірному спіновому просторі. Спінові оператори зручно виражати в термінах матриць Гелл-Мана [188] $\lambda_k = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_8\}$ способом, аналогічним випадку частинок зі спіном 1/2, $\hat{S}_k = \frac{1}{2}\hat{c}^{\dagger}_{\alpha}\lambda_{k\alpha\beta}\hat{c}_{\beta}$. Ефективні константи магнітного зв'язку $J^{\parallel}_{\alpha\beta} = 2(t^2_{\alpha} + t^2_{\beta})/U_{\alpha\beta}$ та $J^{\perp}_{\alpha\beta} = 4t_{\alpha}t_{\beta}/U_{\alpha\beta}$. Подібним чином до анізотропної моделі Гейзенберга (XXZ моделі) для ферміонів зі спіном 1/2, див. також формулу (3.6), ці константи визначають відносну амплітуду легковісних (ізінговського типу, J^{\parallel}) або легкоплощинних (XY типу, J^{\perp}) магнітних кореляцій, які впливають на основні магнітні стани системи.

Метод. У цьому підрозділі використовується динамічна теорія середнього поля (ДТСП) та її узагальнення для координатного простору (див. детальніше підрозділ 1.3.5) для вивчення властивостей магнітного упорядкування в розглянутій системі. Хоча це не точний метод у випадку квадратної та кубічної ґратки (з координаційними числами z = 4 і z = 6, відповідно), результати, отримані ДТСП, є важливим орієнтиром як для експериментів, так і для більш досконалих методів, таких як квантові Монте-Карло обчислення, обчислювання в рамках яких досить нетривіальні (якщо можливі) через загальну наявність проблеми ферміонного знаку у відповідних сумішах з непарною кількістю спінових компонентів [189].

У даному підрозділі для вирішення ефективної квантової задачі домішки обрано розв'язувач Монте-Карло безперервного часу з розкладанням гібридизації (СТ-НҮВ) [104], оскільки такий підхід дозволяє досить просто узагальнити теоретичний опис на випадок довільної кількості спінових компонентів у системі. В рамках цього підходу обмежимось вимірюванням величин, які є діагональними у спіновому просторі, але підхід можна також узагальнити й до величин, що мають ненульові позадіагональні елементи у відповідних матрицях гібридизації.

Оскільки важливими є теоретичні передбачення для експериментальнорелевантних геометрій ґраток (наприклад, квадратних або кубічних), після вирішення задачі домішки у просторі уявного часу необхідно виразити всі відповідні величини у просторі частот Мацубари (цієї процедури можна уникнути лише для нескінченномірної ґратки Бете завдяки притаманній її структурі без кілець). Для зменшення ефектів числового шуму у самоенергії використовується представлення в термінах поліномів Лежандра [190] і обчислюються як дво-, так і чотириточкові функції Гріна [191]. Тоді можна узагальнити вираз для самоенергії (3.11) і записати спін-діагональні елементи наступним чином:

$$\Sigma_{\alpha}(i\omega_n) = \sum_{\beta > \alpha} U_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(i\omega_n) / G_{\alpha}(i\omega_n), \qquad (4.3)$$

де $F_{\alpha\beta}(i\omega_n)$ – фур'є-образ відповідної чотириточкової функції Гріна $F_{\alpha\beta}(\tau - \tau') = -\langle \mathcal{T}_{\tau} \hat{c}_{\alpha}(\tau) \hat{c}^{\dagger}_{\alpha}(\tau') \hat{n}_{\beta}(\tau') \rangle$, де \mathcal{T} – оператор часового упорядкування.

В узагальненні ДТСП для координатного простору, самоенергії входять

до відповідної матриці (ґраткове рівняння Дайсона) у координатному просторі як

$$(\mathbf{G}_{\alpha}^{-1})_{ij} = (i\omega_n + \mu_\alpha - V_i - \Sigma_{\alpha i})\delta_{ij} + t_{\alpha ij}, \qquad (4.4)$$

де $t_{\alpha ij}$ – матричний елемент тунелювання (*i* та *j* – індекси вузлів). Обернення матриці в рівнянні (4.4) призводить до матриці, що має локальні функції Гріна вздовж основної діагоналі. Далі використовується локальне рівняння Дайсона

$$\mathcal{G}_{\alpha i}^{-1}(i\omega_n) = G_{\alpha i i}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{\alpha i}(i\omega_n), \qquad (4.5)$$

де $\mathcal{G}_{\alpha i}$ – функція Вейса (тобто, динамічне середнє поле) ефективної моделі домішок на вузлі *i*, і виражається відповідна функція гібридизації для нової ітерації ДТСП

$$\Gamma_{\alpha i}(-i\omega_n) = i\omega_n + \mu_\alpha - \mathcal{G}_{\alpha i}^{-1}(i\omega_n).$$
(4.6)

Для зменшення помилки в новій функції гібридизації на вісі уявного часу Г(τ), що походить від числового зворотного перетворення Фур'є, використовується знання про її асимптотичну поведінку на великих частотах

$$\left[\Gamma_{\alpha i}(-i\omega_n) - \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{i\omega_n}\right] \longrightarrow \left[\Gamma_{\alpha i}(\tau) + \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{2}\right]. \tag{4.7}$$

Величина $\langle \epsilon^2 \rangle$ може бути обчислена відповідно до густини станів $D(\epsilon)$ невзаємодіючої системи для конкретної геометрії ґратки, $\langle \epsilon^2 \rangle = \int D(\epsilon) \epsilon^2 d\epsilon$.

Результати. У цьому підрозділі зосередимось на випадку заповнення зони на 1/3. Слід зазначити, що в такому випадку для значення хімічного потенціалу немає точного виразу, як для випадку половинного заповнення зони. Для SU(N)-симетричної суміші при половинному заповненні можна вивести загальне співвідношення $\mu = \frac{U}{2}(N-1)$, що пояснюється симетрією по відношен-



Рис. 4.1. Залежність густини атомів від хімічного потенціалу для SU(3)симетричної суміші в кубічній ґратці при U = 10t і T = 0.5t. (Вставка) Залежність хімічного потенціалу μ/U від сили взаємодії U/t при густині n = 1для різних температур, що показує, що зсув пропорційний t/U.

ню частинка-дірка у гамільтоніані Габбарда. Очевидно, що для інших значень наповнення зони немає такої симетрії, і ефекти, що виникають від принципу заборони Паулі, можуть мати сильний вплив. Зокрема, з рис. 4.1 можна зробити висновок, що приблизна умова $\mu = U/2$ гарантує зайняття однією частинкою вузла лише далеко в границі сильного зв'язку (стан ізолятора). При слабкій та помірній силі взаємодії хімічні потенціали повинні бути додатково відрегульовані для належної густини атомів у системі.

Для розрізнення типів підґраткового впорядкування у трикомпонентній суміші при низьких температурах, як це було аргументовано у роботі [179] для відповідної моделі Гейзенберга, застосовується наведене узагальнення ДТСП для системи, що описується рівнянням (4.1). Використовуються періодичні граничні умови, які входять до чисельного аналізу через елементи матриці $t_{\alpha ij}$ у рівнянні (4.4), а також розміри системи з кількістю вузлів у кожному напрямку, які є цілими кратними просторової періодичної структури впорядкування в системі, наприклад, 6^3 і 12^3 вузлів. Залежно від параметрів Габбарда і температури, спостерігаються кілька магнітних основних станів, наведених на рис. 4.2 (тут і надалі будуть використані числа для спінових індексів). У системі



Рис. 4.2. Зображення підґраткового впорядкування двох типів та відповідних трьох типів магнітних фаз, що спостерігаються в ДТСП аналізі при заповненні зони на 1/3 для трикомпонентної суміші фермі-атомів. Зображені стани з двома підґратками (праворуч) можна зрозуміти наступним чином: ХГК2 – атоми «1» та «2» є у протифазі до «3», ABK – атоми «3» не беруть участі у впорядкуванні.

може відбуватися трипідґраткове впорядкування, що відповідає хвилі густини кольору першого типу (ХГК1) з хвильовим вектором впорядкування $\mathbf{Q} = (\pm 2\pi/3, \pm 2\pi/3, \pm 2\pi/3)$ (усі знаки ± не залежать один від одного; стала ґратки обрана рівною одиниці), і двопідґраткове впорядкування, що характеризується $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ з двома різними антиферомагнітними станами: другий тип хвилі густини кольору (ХГК2) або антиферомагнетик з виділеним кольором (ABK).

Для вивчення переходів між цими станами проведемо розрахунки при різних температурах. Функції гібридизації (4.6) аналізуються на кожному вузлі ґратки *i* для кожної ітерації ДТСП, та у разі успішної збіжності алгоритму збираються значення кореляційних функцій з домішкового розв'язувача, зокрема, значення густини $\langle \hat{n}_{i\alpha} \rangle$ для кожного спінового компонента α . Просторова періодичність та значення цих величин дозволяють безпосередньо визначити фази, означені на рис. 4.2 та відповідні критичні температури. На рис. 4.3 показано спостережувані магнітні фази як за наявності повної симетрії SU(3),



Рис. 4.3. Фазові переходи між різними впорядкованими станами, що обчислені узагальненою ДТСП для кубічної ґратки з 12^3 вузлів. Параметри обрано наступними: $U_{12} = U + \Delta_{12}, U_{13} = U_{23} = U - \Delta_{12}/2, U = 12t$.

так і у випадку порушеної симетрії внаслідок різної амплітуди взаємодії між компонентами.

З рис. 4.3 можна проаналізувати критичні температури для різних типів підґраткового впорядкування. Зокрема, залежності показують, що явище впорядкування слід спостерігати при помірних температурах порядку амплітуди обмінної взаємодії t^2/U , як і у випадку частинок у двокомпонентних сумішах. Як можна також побачити, фази з двома підґратками (ХГК2 та ABK) більш стійкі до термальних флуктуацій, тоді як трискладове впорядкування (ХГК1) більш сприйнятливе до квантових флуктуацій, що цілком узгоджується з результатами [179] для відповідної SU(3) симетричної моделі Гейзенберга на основі квазікласичного аналізу. Зауважимо, що узагальнений ДТСП аналіз проведено також для квадратної ґратки, який показує таку ж структуру фаз, як показано на рис. 4.3 із меншими числовими значеннями для всіх критичних температур через менше координаційне число квадратної ґратки.

Необхідно також зробити кілька важливих тверджень про магнітні фази за наявності різної взаємодії між компонентами, які можна реалізувати в

ультрахолодних газах атомів лужних металів за допомоги резонансів Фешбаха. По-перше, слід зазначити, що асиметрія у взаємодії знімає виродження у двопідґратковому магнітному стані так само, як і у випадку половинного заповнення зони, вивченого у роботі [178]; тут вибір конкретного стану визначається відношенням між різними амплітудами магнітного зв'язку $J_{\alpha\beta}^{\parallel}$. По-друге, спостережуване зниження критичних температур для магнітного впорядкування можна пояснити з аналізу ефективної спінової моделі, описаної у рівнянням (4.2). Зауважимо, що порядок ХГК1 включає всі три амплітудами магнітного зв'язку $J_{\alpha\beta}^{\parallel}$, тому критична температура сильно залежить від мінімальної з амплітуд магнітного зв'язку, яка в асиметричних випадках, показаних на рис. 4.3 нижче, ніж у симетричному випадку SU(3). Додаткове зниження критичних температур двопідґраткового впорядкування в асиметричних режимах можна пояснити змінами енергії багаточастинкових станів на основі аналізу доданку $\hat{\mathcal{H}}_U = \sum_i \sum_{\beta > \alpha} U_{\alpha\beta} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta}$ у рівнянні (4.1). Фактично, зміна асиметрії взаємодії шляхом зміни лише параметра Δ_{12} , як на рис. 4.3 залишає незмінними власні значення $\hat{\mathcal{H}}_U$ у парамагнітній області незалежно від значення Δ_{12} (припускаючи, що всі отримані $U_{\alpha\beta}$ залишаються позитивними). Але в упорядкованій фазі (ХГК2 або ABK) власні значення $\hat{\mathcal{H}}_U$ різні для різних значень Δ_{12} . Зокрема, стан ХГК2 стає енергетично більш прийнятним зі збільшенням $\Delta_{12} > 0$, а стан ABK – зі зменшенням $\Delta_{12} < 0$.

Відзначимо ще один експериментально релевантний ефект, що виникає від асиметрії в силах взаємодії $U_{\alpha\beta}$. Вищезгадане порушення симетрії SU(3) за допомоги резонансів Фешбаха може призвести до сильного просторового розділення атомних компонентів у гармонічній пастці. На рис. 4.4 показано цей ефект для діапазону температур і асиметрій, вищих, ніж розглянуто вище, тобто таких, що є легше досяжними в умовах сучасних експериментів з ультрахолодними газами лужних металів (наприклад, ⁴⁰К в експериментах [166, 169]). Крім того, такий вибір дозволяє виключати ефекти, що пов'язані з процесами віртуального обміну. Природно, показане просторове розділення компонентів відбувається



Рис. 4.4. Розподіли сумарної густини атомів та густини компонентів (намагніченості) у координаційному просторі, що обчислені ДТСП для кубічної ґратки й асиметричних амплітуд взаємодії між трьома компонентами. Параметри є наступними: T = 4t, $V_i = 0.04t(r_i/a)^2$, де a – стала ґратки; (a) та (б): $U_{12} = U_{13} = 20t$, $U_{23} = 40t$, $\mu_1 = 45t$, $\mu_2 = \mu_3 = 60t$; (в) та (г): $U_{12} = U_{13} = 40t$, $U_{23} = 20t$, $\mu_1 = 60t$, $\mu_2 = \mu_3 = 45t$.

також і при нижчих температурах з ще більш вираженим ефектом розділення.

Асиметрія в амплітудах взаємодії ефективно призводить до додаткового утримуючого потенціалу, що залежить від внутрішнього стану атомів. Завдяки цьому механізму виникають різнокольорові структури оболонок Мотта, що складаються з одного або декількох компонентів. Ці структури також цікаві з точки зору становозалежних динамічних властивостей та можливих застосувань для додаткового охолодження газів, оскільки містять значно меншу ентропію на частинку, ніж у SU(3)-симетричному випадку [170, 171]. Останній факт, зокрема, може допомогти в експериментах досягти та більш детально вивчити магнітні багаточастинкові фази, що теоретично передбачені в цьому підрозділі.

4.2. Термодинамічні властивості трикомпонентних атомних сумішей в оптичних ґратках в околі фазових переходів.

За останнє десятиріччя досягнуто помітного експериментального прогресу у наближенні до магнетизму з використанням ультрахолодних двокомпонентних атомних сумішей в оптичних ґратках, де недавно були виявлені та виміряні антиферомагнітні кореляції короткого діапазону [143, 147]. Вважається, що спостереження та подальші детальні дослідження суміжних станів речовини дальнього порядку разом з іншими новими квантовими фазами допоможуть не тільки в проектуванні нових типів сильно корельованих матеріалів, але і у квантовому моделюванні згідно з оригінальною ідеєю Р. Фейнмана [1]. У той же час, згаданий експериментальний успіх разом із ще існуючими проблемами (наприклад, обмеженнями в охолодженні [96]) все більше розширює дослідницький кругозір та коло можливих застосувань.

З теоретичної точки зору, тоді як основні властивості магнітних фаз дальнього порядку (наприклад, фазові діаграми та критичні ентропії) визначено з достатньою точністю для однозонної двокомпонентної моделі Фермі-Габбарда (див. розділ 3 для додаткових деталей), є набагато менше кількісних прогнозів для багатокомпонентних сумішей фермі-частинок, включно з випадками високих симетрій між компонентами. Однак є чіткі докази того, що ці системи володіють дуже багатою фізикою, що призводить до різноманітних квантових фаз багатьох частинок та їх унікальних властивостей, див., наприклад, роботи [173, 174, 177–179, 192] та підрозділ 4.1.

У цьому підрозділі проводиться узагальнення підходу динамічного середнього поля задля більш детального вивчення магнітних фаз дальнього діапазону в SU(3)-симетричній моделі Габбарда та визначити структуру фазової діаграми при ненульових температурах залежно від основних параметрів системи, амплітуд тунелювання та локальної взаємодії, які можна змінювати в широких діапазонах для ультрахолодних атомів в оптичних ґратках. Однак мета полягає ще у тому, щоб краще розуміти, чи можна вважати багатокомпонентні суміші вигідними порівняно з їх двокомпонентними аналогами з метою наближення до конкретних станів дальнього діапазону, як це запропоновано у роботах [167, 172, 193].

Модель. Зосередимось на ультрахолодних газових сумішах з SU(3) симетрією компонент (фермі-атомів у трьох різних внутрішніх квантових станах), тобто на моделі (4.1), у якій $t_{\alpha} = t \forall \alpha$ та $U_{\alpha\beta} = U \forall \alpha \neq \beta$. Усі інші параметри мають теж саме значення, як і в гамільтоніані (4.1). Таку систему можна експериментально реалізувати, завантаживши в оптичну ґратку ультрахолодні атоми, які знаходяться в трьох різних квантових станах надтонкої структури. Оскільки атоми у всіх трьох внутрішніх станах, що розглядаються як псевдоспінові компоненти групи SU(3) нижче, повинні взаємодіяти один з одним з однаковою силою U, відповідними кандидатами є суміші атомів лужноземельних металів (¹⁷³Yb і ⁸⁷Sr; див., наприклад, роботи [98,194]) та суміші атомів ⁴⁰K, де за допомогою правильного вибору станів надтонкої структури та резонансів Фешбаха можна реалізувати режим майже з рівними довжинами розсіювання між компонентами. В обох експериментальних випадках глибина ґратки може бути легко налаштована за допомоги зміни інтенсивності лазерних полів, таким чином, співвідношення U/t може бути змінено в широкому діапазоні.

Варто підкреслити, що у випадку однорідної системи за відсутності зовнішніх полів ($V_i = 0$) і заповненням однією частинкою на вузол (тобто, n = 1 або, що еквівалентно, заповненням зони на 1/3) співвідношення $\mu \approx U/2$ виконується лише приблизно, див. рис. 4.1. Тим не менш, воно стає точнішим у границі сильного зв'язку, де, відповідно до рівняння (4.2) система може бути описана SU(3)-симетричною моделлю Гейзенберга,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{k=1}^{8} \hat{S}_{ki} \hat{S}_{kj}$$
(4.8)

де $J = 4t^2/U$ – позитивна (антиферомагнітна) константа зв'язку, а псевдоспінові оператори проекцій $\hat{S}_{ki} = \frac{1}{2} \hat{c}^{\dagger}_{\alpha i} \lambda_{k\alpha\beta} \hat{c}_{\beta i}$ визначаються у термінах 3×3 унітарних матриць Гелл-Мана $\lambda_k = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_8\}$ [188]. Подальший теоретичний аналіз не обмежується границею сильного зв'язку – досліджуються термодинамічні властивості моделі Габбарда (4.1) при заповненні n = 1 на всіх релевантних інтервалах U/t і T/t. У той же час, ефективний гамільтоніан (4.8) є корисним для належного аналізу конкретних ефектів, отриманих узагальненим теоретичним підходом.

Для проведення послідовного теоретичного аналізу в цьому розділі узагальнюється підхід динамічної теорії середнього поля (див. підрозділ 1.3.5) для опису багатокомпонентних фермі-газів в періодичних потенціалах ґраток. Стосовно інших найсучасніших чисельних методів, важливо зазначити, що ДТСП в даний час може розглядатися як один з найбільш оптимальних підходів для досліджуваної системи. Зокрема, детермінантний квантовий метод Монте-Карло [195] не може бути застосований до симетричної суміші SU(3) через наявність проблеми ферміонного знаку, яку неможливо зменшити чи виключити як, наприклад, у SU(4)-симетричній суміші при половинному заповненні зони [193]. У той же час, підхід прямої точної діагоналізації дуже обмежений у кількості вузлів ґратки [179], що спричиняє значні труднощі при надійному аналізі відповідних магнітних фазових діаграм. Тому нижче коротко окреслюються основні узагальнення та основні кроки в ДТСП, які дозволяють отримати основні результати підрозділу та будуть важливими для подальшого дослідження багатокомпонентних сумішей у рамках узагальненого підходу.

Узагальнення методу точної діагоналізації гамільтоніану домішок для багатокомпонентних сумішей. Основна ідея ДТСП полягає у відображенні оригінальної задачі ґратки (4.1), яка зазвичай є нерозв'язною, на локальну задачу домішки, яку можна точно вирішити. Беручи домішкову модель Андерсона (AIM), див також формулу (1.91), можна помітити, що вона може бути напряму розширена на суміші з кратним числом \mathcal{N} спінових компонентів. Оскільки в рамках дисертаційної роботи використовується переважно розв'язувач точної діагоналізації, гамільтоніан (1.91) може бути узагальнено до наступного виду:

$$\hat{\mathcal{H}}_{AIM} = \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{N}} \sum_{l=2}^{n_s} [\varepsilon_{l\sigma} \hat{a}_{l\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{l\sigma} + V_{l\sigma} (\hat{a}_{l\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma} + \text{H.c.})] + U \sum_{\sigma' > \sigma}^{\mathcal{N}} \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{N}} \hat{n}_{d\sigma} \hat{n}_{d\sigma'} - \mu \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{N}} \hat{n}_{d\sigma}, \qquad (4.9)$$

де $\sigma, \sigma' = \{1, \ldots, \mathcal{N}\}$ відповідають спіновим індексам, а $l = \{2, \ldots, n_s\}$ позначає орбітальні ступені вільності зовнішнього резервуара в моделі Андерсона з максимальним числом n_s , яке є притаманною рисою та необхідною умовою методу точної діагоналізації. Два доданки в першому рядку рівняння (4.9) відповідають енергіям електронів у ванні і гібридизації між ванною і домішкою відповідно. Оператори $\hat{a}^{\dagger}_{l\sigma}$ ($\hat{a}_{l\sigma}$) і $\hat{d}^{\dagger}_{\sigma}$ (\hat{d}_{σ}) відповідають операторам народження (знищення) ферміонів на орбіталі l і домішці, відповідно; величини $\varepsilon_{l\sigma}$ – так звані параметри Андерсона, які задають амплітуду процесів у цій моделі. Ці параметри визначаються ітераційним шляхом в ДТСП підході. Доданки у другому рядку мають пряму відповідність початковому гамільтоніану Габбарда (4.1), що узагальнені для SU(\mathcal{N})-симетричної суміші.

У представленні простору Фока зайняття орбіталі l спіновим компонентом σ може приймати два значення $n_{l\sigma} = \{0, 1\}$, таким чином, у найбільш загальному випадку, матриця, яку необхідно діагоналізувати в рамках точної діагоналізації, має розмір $L_0 \times L_0$ з $L_0 = 2^{n_s \mathcal{N}}$. Це призводить до сильного обмеження кількості орбіталей n_s , що можливо врахувати в числових обчисленнях для заданої кількості спінових компонентів \mathcal{N} . Однак завдяки структурі гамільтоніану (4.9), що відповідає початковій задачі ґратки (4.1), необхідно зазначити, що у досліджуваному випадку він не змішує різні спінові сектори, $|n_{11}, \ldots, n_{n_s 1} \rangle \cdots | n_{1 \mathcal{N}} \ldots, n_{n_s \mathcal{N}} \rangle$, таким чином загальний заряд на спіновий компонент $q_{\sigma} = \sum_{l=1}^{n_s} n_{l\sigma}$ може розглядатися як квантове число, що зберігається. Позначаючи квантовий стан як $|Q_i\rangle \equiv |q_1^{(i)}, \ldots, q_{\mathcal{N}}^{(i)}\rangle$, можна визначити таким чином кількість окремих станів, $i = \{1, \ldots, (n_s + 1)^{\mathcal{N}}\}$. Таким чином, задача діагоналізації матриці $L_0 \times L_0$ перетворюється на діагоналізацію $(n_s+1)^N$ блоків іншого (але значно меншого) лінійного розміру L_i , що може бути виражений в термінах біноміальних коефіцієнтів $L_i = \prod_{\sigma=1}^{N} {n_s \choose q_{\sigma}^{(i)}}$. Описана процедура дозволяє враховувати більше орбіталей в задачі домішок, тим самим збільшуючи відповідну точність результатів. Зокрема, з аналізу прямого розрахунку можна зробити висновок, що, порівнюючи двокомпонентні суміші з $n_s = 7$, цілком можливо використовувати $n_s = 5$ та $n_s = 4$ для сумішей трьох та чотирьох компонентів, відповідно в рамках ДТСП підходу.

В рамках проведення точної діагоналізації локального гамільтоніана, функції Гріна обчислюються згідно формули (1.106). Після цього знаходяться власні енергії з рівняння Дайсона (1.95), де функції Вейса повністю визначаються параметрами Андерсона згідно рівняння (1.103).

Кластерізація та умови самоузгодження ДТСП. З метою отримання функцій Гріна на ґратці для умов самоузгодженості ДТСП зазвичай використовується густина станів $D(\epsilon)$ для невзаємодіючого газу за певної геометрії ґратки та обчислені власні енергії домішки. Однак такий підхід може бути успішно застосований (див. підрозділ 1.3.5 для деталей), коли не порушена трансляційна інваріантність (наприклад, у парамагнітній або феромагнітній фазі), що надає можливість використовувати формулу (1.102). Або, якщо впорядкування має двосторонню структуру (наприклад, по типу хвилі густини заряду або стан Нееля), функція Гріна може бути визначена відповідно до формули (1.109).

Вочевидь, немає загального виразу в термінах $D(\epsilon)$ для більш екзотичних типів магнітного порядку і, зокрема, для трискладового антиферомагнітного стану, властивого трикомпонентним сумішам при низьких температурах, див. [179] та підрозділ 4.1. Тому узагальнення ДТСП для координатного простору може вважатися належний підходом для урахування більш складних типів магнітного впорядкування. У рамках такого підходу відповідна функція Гріна на ґратці обчислюється оберненням матриці (4.4), що визначається в координатному просторі та містить елементи відповідні конкретним вузлам ґратки.



Рис. 4.5. Схема процедури кластеризації у ДТСП на прикладі структури з трьох підґраток з геометрією квадратної ґратки (L – кількість вузлів у напрямку x), що дозволяє досліджувати антиферомагнітну фазу з хвильовим вектором впорядкування $\mathbf{Q} = (2\pi/3, 2\pi/3)$.

Важливо зауважити, що узагальнення ДТСП для координатного простору вимагає більше обчислювальних ресурсів порівняно з підходами одного вузла (1.102) або двох підґраток (1.109). Це спричинено не лише необхідністю обернення матриці (що можливо для систем, що складаються з ~10⁴ вузлів або навіть більше), а й тому, що власні енергії $\Sigma_{\sigma s}(i\omega_n)$ необхідно обчислювати на кожному вузлі ґратки початкової задачі (4.1). Однак останнє обмеження може бути значно зменшено для однорідних систем у випадку, коли тип порушення трансляційної симетрії заздалегідь відомий (наприклад, з більш неупереджених обчислень для більшої системи у координатному просторі). На рис. 4.5 показано один конкретний тип кластеризації, який передбачає можливість трискладового антиферомагнітного впорядкування в системі. Це спрощення вимагає вирішення задачі домішок лише на трьох вузлах ґратки, тоді як функції Гріна обчислюються з рівняння (4.4) для повнорозмірної системи, таким чином, ефективно мінімізуючи вплив ефектів скінченності розмірів системи.

Аналіз ентропії. Щодо експериментів із ультрахолодними атомними сумішами в оптичних ґратках, вирішальною величиною для наближення до магнітно-упорядкованих фаз є не температура (що є природною змінною у ДТСП підході, що описує властивості системи як макроканонічного ансамблю), а ентропія, оскільки атоми в оптичних ґратках певною мірою можуть розглядатися як ізольовані від навколишнього середовища, а ключові параметри системи (наприклад, амплітуду зв'язку U/t) можна змінювати адіабатичним шляхом. Тому кількісні теоретичні розрахунки для ентропії набувають великого значення в цій галузі досліджень. Для обрахування ентропії в рамках ДТСП використовується формула (3.5) з такими вхідними параметрами як хімічний потенціал μ , амплітуди взаємодії U та тунелювання t і температура T, в той час як густина n на вузлі ґратки є вимірюваною величиною.

Однак, в прямих чисельних розрахунках є зручним параметризувати хімічний потенціал у вигляді $\mu(r) = \mu_1 - V r^2$, що є аналогічним до наближення локальної густини для системи, що знаходиться у зовнішньому втримуючому потенціалі пастки параболічного типу з амплітудою V та відстанню від центру r, що вимірюється в одиницях сталої ґратки. Таким чином, додатково отримується доступ до розподілу ентропії в гармонічній пастці, так що ентропія у точці r₁ обраховується згідно з формулою (3.19). Варто зазначити, що для аналізу ентропії однорідних систем, що застосовується до фазової діаграми з фіксованим значенням густини n_1 (наприклад, $n_1 = 1$), параметр r_1 у рівнянні (3.19) необхідно визначати незалежно в кожній точці (U, T) від умови $n(r_1, U, T) = n_1$ (див. також підрозділ 4.1). Напевно, єдиний виняток може бути зроблений у цьому відношенні у випадку половинного заповнення $SU(\mathcal{N})$ -симетричної моделі Габбарда, де можна отримати фіксовану умову для хімічного потенціалу $\mu_{
m hf} = (\mathcal{N}-1)U/2$, що не залежить від квантових і термальних флуктуацій, зумовлених симетрією по відношенню частинка-дірка при будь-якої кількості компонент \mathcal{N} .

Результати. З розробленим теоретичним підходом вивчається магнітна фазова діаграма в площині *UT*. Щодо конкретного вибору методу точної діагоналізації в якості розв'язувача у ДТСП, виявлено, що в межах необхідної точності він дозволяє отримати доступ до досить низьких температур і має гнучкість у виборі амплітуди взаємодії U/t у гамбартоніані Габбарда (4.1) навіть при $n_s = 4$. Тут, відповідно до обмежень обраної домішкової моделі (4.9) і аналогічно до роботи [178] та підрозділу 4.1, обмежимось випадком, коли симетрія SU(3) може бути спонтанно порушена у двох напрямках (тобто вздовж двох легких осей, що відповідають базису густин компонент) у просторі псевдоспіну. Зокрема, вимірюються відносні густини кожної спінової складової або, що еквівалентно, аналізуються дві локальні намагніченості на вузлі ґратки s,

$$m_s^{(3)} \equiv \langle \hat{S}_{3s} \rangle = (n_{1s} - n_{2s})/2,$$

$$m_s^{(8)} \equiv \langle \hat{S}_{8s} \rangle = (n_{1s} + n_{2s} - 2n_{3s})/\sqrt{3},$$
 (4.10)

та їх періодична поведінка в координатному просторі. Тому магнітновпорядковані стани визначаються з аналізу збіжності функцій Гріна з різними умовами ДТСП самоузгодженості (1.102), (1.109), або (4.4), які дозволяють отримати різні підґраткові структури (наприклад, різні АФМ фази). Отже, основні результати узагальнені на рис. 4.6.

Використовуючи ту саму шкалу на рис. 4.6, також показано лінію переходу, отриману ДТСП для двокомпонентної суміші з SU(2) симетрією відповідного гамільтоніану Габбарда. Це порівняння безпосередньо показує повне пригнічення АФМ впорядкування при слабкій взаємодії, що відповідає відсутності ключового механізму (що призводить до так званого АФМ по типу Слетера; див., наприклад, [196]), обумовленого відсутністю ідеального гніздування зони Бріллюена, оскільки зона заповнена лише на 1/3. У протилежному випадку сильного зв'язку $U/t \gg 1$, як вже згадувалося, відбувається пряме відображення на ефективну спінову модель (4.8), таким чином АФМ стани типу Гейзенберга виникають при ненульовій температурі в кубічній геометрії ґратки. Цей механізм також підтверджується на фазовій діаграмі відповідним зниженням критичних температур $T_{c1,2}$, які пропорційні в обох випадках амплітуді магнітного зв'язку $J = t^2/U$ в границі $U/t \gg 1$.



Рис. 4.6. Фазова діаграма магнітних фаз при ненульових температурах у SU(3)симетричній моделі Габбарда при заповненні однією частинкою на вузол (*n* = 1), що обчислена ДТСП. Відповідні значення з підрозділу 4.1 позначені сірими хрестовими символами.

Щодо конкретної просторової структури впорядкованих станів, на рис. 4.7 показані їх можливі просторові конфігурації (в зображеннях для простоти опущено третій просторовий вимір, оскільки відповідне розширення є досить прямолінійним, див. також підрозділ 4.1). Слід зауважити, що інші еквівалентні просторові конфігурації трискладкових АФМ станів по типу хвилі густини кольору (ХГК1) можуть бути отримані шляхом обертання на кут $\pi/2$ та просторового зсуву на постійну ґратки вздовж кристалографічних осей. Що стосується двопідґраткових АФМ станів, то вони дозволяють мати дві можливості просторових розташувань у простих геометріях ґраток, але існує більша свобода для порушення симетрії в просторі псевдоспіну. Зокрема, як показано у роботі [178] та підрозділі 4.1, для SU(3)-симетричної суміші спостерігаються два типи двопідґраткового АФМ впорядкування: хвиля густини кольору (ХГК2) та антиферомегнетик з виділеним кольором (АВК). Зокрема, спонтанне порушення симетрії у напрямку третього спінового компонента (знову ж таки,



Рис. 4.7. Схематичне зображення спостережуваних магнітних фаз при заповненні однією частинкою на вузол. Кольоровий фон вказує на присутність додаткової загальної намагніченості в станах двопідґраткового АФМ.

в рамках обмеження у вимірюваннях вздовж легких осей) означає, що стани ХГК2 та ABK характеризуються $m_{A,B}^{(3)} = 0$ з $m_{A,B}^{(8)} \neq 0$ і $m_A^{(3)} = -m_B^{(3)} \neq 0$ з $m_A^{(8)} = m_B^{(8)} \ge 0$, відповідно; див. також рівняння (4.10) і рис.4.8.

Слід зазначити, що в наведеному аналізі АФМ станів також спостерігається додаткова загальна намагніченість вздовж напрямку, обраного механізмом порушення симетрії. Більше того, з рис. 4.8 можна зробити висновок, що така намагніченість має протилежні знаки в станах ХГК2 та ABK (тобто $n_{3A}+n_{3B} > 2/3$ і $n_{3A}+n_{3B} < 2/3$, відповідно) і збільшується зі зниженням температури. Це означає, що при низьких температурах SU(3)-симетричні суміші з фіксованою рівною кількістю атомів у трьох різних станах надтонкої структур можуть стати нестабільними до поділу фаз на домени, упорядковані ХГК2 та ABK, які компенсують залишкову чисту намагніченість, продуковану один одним. Зауважимо, що, відповідно до рис. 4.8, лінія між АФМ (2п.) та ПМ станами на рис. 4.6 (лінія T_{c2}) відповідає фазовому переходу другого роду аналогічно двокомпонентним сумішам.

Щодо інших границь фаз на рис. 4.6, необхідно зазначити, що лінії переходу отримані з відповідного аналізу намагніченостей (4.10). При крити-



Рис. 4.8. Температурна залежність відносної заселеності двох підґраток спіновими компонентами для двох можливих станів у АФМ фазах: ХГК2 (ліворуч) та АВК (праворуч) при фіксованій амплітуді взаємодії U/t = 12.

чній температурі T_{c1} спостерігаються розриви в цих величинах, тобто фазові переходи першого порядку зі стану АФМ (Зп.) у стан ПМ та АФМ (2п.). Слід зазначити, що стосовно чіткого визначення лінії фазового переходу в цьому випадку необхідно проаналізувати великі термодинамічні потенціали і, таким чином, більш детально вивчити систему щодо можливих областей співіснування та метастабільних рішень. Тут необхідно підкреслити, що у випадку недвобічної структури підґратки це завдання стає істотно ускладненим, перетворюючись таким чином на окрему задачу. Однак відповідний аналіз задачі домішки (4.9) може бути виконаний в рамках точної діагоналізації без значних зусиль, оскільки можна отримати прямий доступ до всіх власних функцій та статистичних сум, які також використовується в рівнянні (1.106). Отже, з цих оцінок можна зробити висновок про відсутність ознак співіснування між фазами ПМ та ХГК1, але, в той же час, є ознаки того, що існує вузька область співіснування (з висотою $\Delta T \sim 0.02t$) між АФМ фазами (Зп.) та (2п.). Таким чином, очікується, що фактична лінія переходу для T_{c1} буде нижчою від сторони фази АФМ (2п.),



Рис. 4.9. Ізоентропічні лінії та фазові діаграми для двокомпонентних SU(2)- та трикомпонентних SU(3)-симетричних моделей Габбарда, що обчислені ДТСП.

ніж зображено на рис. 4.6 (тобто лінія ефективно відповідає верхній границі існування фази ХГК1). Підкреслимо, що для правильного визначення лінії переходу необхідно вирішити окрему задачу та проаналізувати термодинамічні потенціали, що відповідають початковому гамільтоніану ґратки (4.1) в різних фазах з належним урахуванням підґраткових структур.

Нарешті, визначимо як залежить ентропія системи від сили зв'язку U/t і температури T/t при n = 1. Це дозволяє не тільки оцінити критичні ентропії, необхідні для наближення до магнітно-впорядкованих фаз, зазначених на рис. 4.6 та 4.7, а й вивчити збільшення ефекту Померанчука, властивого для багатокомпонентних сумішей. Для цього на рис. 4.9 також показано ізоентропічні лінії та фазову діаграму для SU(2)-симетричної суміші (див. також рис. 3.4) для безпосереднього порівняння дво- та трикомпонентних газів в оптичних ґратках.

З рис. 4.9 можна зробити висновок, що, незважаючи на більш сильне пригнічення АФМ фаз в одиницях температури T/t, ситуація виглядає дуже оптимістично для трикомпонентних сумішей з точки зору критичних ентропій, необхідних для наближення до впорядкованих фаз. Зокрема, спостерігається значне збільшення (приблизно на 50%) критичної ентропії, необхідної для наближення до станів АФМ (2п.), що обумовлено сильнішим ефектом Померанчука. Звичайно, слід пам'ятати, що ДТСП є неточним підходом для обрахування значень критичної ентропії у двокомпонентних сумішах через її обмеження на локальні кореляції (див. роботу [112] для порівняння з точними методами). Природно, неточності того ж самого походження слід очікувати в наведених оцінках щодо SU(3)-симетричної суміші. Однак величина ефекту дозволяє зробити висновок, що переважні властивості мають бути підтверджені при застосуванні інших теоретичних методів і будуть спостережені напряму в експериментах. Згідно з наведеним аналізом, це також важливий результат, що критична ентропія для досягнення фази АФМ (3п.) $s_{c1} \leq 0.5$ має значення, якого реалістично досягнути відповідно до поточного та очікуваного прогресу в техніках охолодження ультрахолодних сумішей фермі-атомів.

4.3. Порушення симетрії SU(4) та сильнокорельовані фази у чотирикомпонентній моделі Габбарда

Мотивація напряму досліджень. Суміші квантових частинок з високою спіновою симетрією в ґраткових системах привертають значну увагу в науковому співтоваристві з багатьох причин. Зокрема, експериментальні реалізації систем, інваріантні при неперервних перетвореннях $SU(\mathcal{N} > 2)$, можуть дати корисну інформацію про механізми спонтанного порушення симетрії, які відіграють вирішальну роль у багатьох областях фізики конденсованого стану та високих енергій. Залежно від конкретної симетрії, передбачається, що ці системи мають нетривіальні фазові діаграми та унікальні фізичні характеристики, які ще не вивчені з достатньою ретельністю. Ключовою властивістю багатокомпонентних сумішей, що можуть бути описані моделлю Габбарда, є їх висока ентропія, яка є істотною перевагою для наближення експериментів до низькотемпературних квантових фаз багатьох тіл з ультрахолодними атомами в оптичних ґратках.

Навіть незважаючи на те, що характерні експериментально доступні температури та ентропії захоплених атомних газів занадто високі для вивчення області екзотичних низькотемпературних фаз, експерименти з багатокомпонентними ферміонними сумішами ⁶Li, ⁴⁰K, ⁸⁷Sr та ¹⁷³Yb в оптичних ґратках вже розкрили дуже багату фізику цих систем [98, 166, 167, 169, 197–203]. Особливий інтерес серед цих фаз привертають антиферромагнітно-упорядковані фази та перехід від металу до ізолятору Мотта. У цьому контексті необхідно звернути увагу, що у випадку високої спінової симетрії (на відміну від репрезентацій SU(2) симетрії з великою довжиною спіну *S* в твердотільних матеріалах) квантові флуктуації зростають з числом взаємодіючих ферміонних компонентів [204, 205].

У відповідності до теоретичних досліджень [186,197], магнітна впорядкованість Неель-типу є домінуючою нестабільністю при половинному наповненні зони в $SU(\mathcal{N})$ -симетричних моделях Габбарда зі взаємодіючими компонентами до $\mathcal{N}=4$. Суміші з $\mathcal{N}\gtrsim 6$ починають проявляти сильні тенденції до немагнітних валентно-парних (або, більш загально, до валентно-кластерних) станів, які керують низькотемпературною фізикою цих систем. Тому на цьому етапі можна зробити два основних висновки: зі зростанням кількості компонентів (і) збільшується повна ентропія системи та (іі) магнітне упорядкування пригнічується. Таким чином, знаходження оптимального режиму параметрів може бути корисним для наближення до магнітно-впорядкованих станів в експериментах зі регульованим числом ферміонних компонентів. З цієї точки зору, чотирикомпонентні суміші можна розглядати як перспективних кандидатів. Тому цю систему обрано для детального теоретичного аналізу термодинамічних властивостей та відповідних фізичних характеристик у безпосередній близькості до фазових переходів. Нещодавно було розроблено ряд теоретичних підходів для розуміння низькотемпературної фізики в SU(4)-симетричних та інших відповідних чотирикомпонентних моделях Габбарда та Гайзенберга. Зокрема, було досягнуто значного прогресу в нещодавніх дослідженнях із залученням, зокрема, квантових методів Монте-Карло [182, 183, 193, 205, 206], динамічної теорії середнього поля (ДТСП) [207–210], підходів в одновимірному просторі [211,212], розширеного підходу високотемпературних розкладань [172] та інших підходів середнього поля [173, 184, 192].

Особливості моделі Габбарда та формалізму динамічної теорії середнього поля. Чотирикомпонентну взаємодіючу суміш фермі-частинок зручно описувати в рамках відомої двоорбітальної моделі Габбарда з двома внутрішніми спіновими станами. Крім звичайної внутрішньоорбітальної взаємодії U, існує ще два типи взаємодій, що позначаються як пряма (*engl. – direct*) V_{dir} та обмінна (*engl. – exchange*) V_{ex} взаємодія, відповідно. Об'єднавши спинові та орбітальні індекси в єдиний індекс «кольору» α , система описується загальним гамільтоніаном

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^{4} (c_{i\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha} + H.c.) - \mu \sum_{j} \sum_{\alpha=1}^{4} n_{j\alpha} + \sum_{j} \sum_{\alpha=1}^{4} \sum_{\alpha' > \alpha}^{4} U_{\alpha\alpha'} n_{j\alpha} n_{j\alpha'} + V_{ex} \sum_{j} (c_{j2}^{\dagger} c_{j3}^{\dagger} c_{j1} c_{j4} + H.c.), \quad (4.11)$$

де $c_{i\alpha}^{\dagger}$ ($c_{i\alpha}$) ферміонний оператор народження (знищення) частинки з кольором α , розташованої на вузлі *i* ґратки, та $n_{i\alpha} = c_{i\alpha}^{\dagger}c_{i\alpha}$ відповідний оператор густини. Амплітуда тунелювання *t* та хімічний потенціал μ в рамках даної роботи однакові для всіх ароматів і вузлів ґратки, а $U_{\alpha\alpha'}$ елементи симетричної матриці взаємодії атомів, заданої наступним чином: $U_{\alpha\alpha} = 0$, $U_{12} = U_{34} = U$, $U_{13} = U_{24} = V_{dir} - V_{ex}$, and $U_{14} = U_{23} = V_{dir}$. Останній доданок гамильтоніана описує процес спін-фліпу, який може бути пов'язаний із зв'язком Гунда в твердотільних матеріалах. Нижче ми обмежуємо наш аналіз випадком ферміонів, що відштовхуються, тобто обмежуємося умовою що всі ненульові матричні елементи $U_{\alpha\alpha'}$ є невід'ємними (і, зокрема, $V_{dir} \geq V_{ex}$).

Зосередимось на термодинамічних властивостях моделі (4.11) при заповненні зони наполовину (n = 2), де система є симетричною по відношенню частинка-дірка. У такому випадку відповідний хімічний потенціал визначається співвідношенням

$$\mu_{\rm hf} = (U + 2V_{dir} - V_{ex})/2. \tag{4.12}$$

Особливу зацікавленість викликає SU(4)-симетрична система, де всі спинові та орбітальні ступені вільності відіграють однакову роль у гамільтоніані (4.11), що відповідає випадку коли усі амплітуди взаємодії дорівнюють U (тобто, $V_{dir} = U$ та $V_{ex} = 0$). Симетрія SU(4) знижується, як тільки будь-які амплітуди взаємодії стають нерівними. Надалі, ми досліджуємо два окремих випадки чотирикомпонентної моделі Габбарда з нижчою симетрією. Спочатку розглянемо роль прямої взаємодії між частинками без урахування обмінної взаємодії, тобто $0 < V_{dir} < U$, $V_{ex} = 0$. Надалі, дослідимо вплив обмінної взаємодії за допомоги повного урахування «спін-фліп» доданку в рамках теоретичної моделі.

Як і в попередніх підрозділах, використовується ДТСП (див. детальніше підрозділ 1.3.5) – чисельний теоретичний підхід, що базується на ідеї відображання нелокальної задачі ґратки на ефективну (локальну) домішкову модель Андерсона. Щоб вирішити допоміжну задачу в моделі Андерсона, здебільшого використовується домішковий обчислювач з точною діагоналізацією, оскільки він є швидким та надійним в більшості режимів, що аналізуються. Крім того, на основі узагальненої версії для багатокомпонентних сумішей, див підрозділ 4.2, його можна розширити, щоб окремо вивчити вплив доданків, що характеризують обмінну взаємодію. Місцями для перевірки отриманих результатів для SU(4)-симетричної системи використовується квантовий Монте-Карло обчислювач із розкладом по гібридизації у сегментному представленні, див. роботу [104] та підрозділ 4.1.

Теоретичний аналіз зосереджено на ґратках з простою кубічною геометрією, що безпосередньо пов'язано з експериментальними реалізаціями з

ультрахолодними атомами в оптичних ґратках. Амплітуда тунелювання t використовується як одиниця енергії на протязі всіх подальших підрозділів (це відповідає ширині зони для невзаємодіючої системи W = 12t). Наведений опис має на увазі, що система є однорідною (але можливе порушення симетрії з розподілом трансляційної симетрії на дві підґратки) та нескінченною. Таким чином, результати, в першу чергу, стосуються властивостей внутрішніх областей газів, що знаходяться в пастці, або інших матеріалів, до яких дані умови може бути застосовано.

Результати для SU(4)-симетричної суміші ферміонів в оптичних ґратках. Спочатку зосередимось на магнітно-впорядкованих фазах у SU(4)симетричній системі. Термін «магнітний» використовується нижче у звичному контексті двоорбітальної моделі Габбарда. При наповненні зони наполовину (тобто, в середньому по дві частинки на вузол) ми очікуємо, що антиферомагнітні (АФМ) кореляції можуть мати місце при відповідних умовах. Для виявлення АФМ фаз та аналізу їх стабільності при ненульовій температурі ми аналізуємо параметр порядку m_{α} , визначений як

$$m_{\alpha} = |\tilde{m}_{\alpha}| \equiv |n_{\alpha}^{A} - n_{\alpha}^{B}|, \qquad (4.13)$$

де n_{α}^{γ} означає густину заселеності компонентом α на вузлі підґратки $\gamma \in \{A, B\}$. Оскільки ми маємо справу з ферміонами, значення m_{α} може коливатися в межах між 0 (парамагніт, ПМ) та 1 («ідеальний» АФМ). Зауважимо, що у фазі зі спонтанно порушеною симетрією чотири компоненти завжди розбиваються на пари (див. також аргументи нижче), причому кожна пара здебільшого займає одну з двох підґраток. Намагніченості рівні для членів кожної пари $\alpha \alpha'$ ($\tilde{m}_{\alpha} = \tilde{m}_{\alpha'}$) та протилежні для членів різних пар ($\tilde{m}_{\alpha} = -\tilde{m}_{\beta}$), але всі вони мають однакові амплітуди, $m_{\alpha} \equiv m \forall \alpha$. Тому АФМ фазу можна описати за допомоги одного параметру m.

Згідно з рис. 4.10, ми бачимо, що ця фаза є найбільш стійкою до теплових



Рис. 4.10. Фазова діаграма SU(4)-симетричної моделі Габбарда при заповненні зони наполовину (n = 2). Заштрихована область відповідає режиму співіснування ПМ фермі-рідини та АФМ ізолятора. Область співіснування метал-ізолятор (під обмеженням ПМ стану, тобто при дотриманні SU(4) симетрії), позначена світлими пунктирними лініями в середині АФМ фази.

флуктуацій при проміжній силі взаємодії порядку ширини зони ($U \sim W = 12t$). Температура Нееля досягає максимуму $T_{\rm N}^{\rm max} \approx 0.27 t$ при $U \approx 14.2 t$ та надалі зменшується при більших амплітудах взаємодії у відповідності до відомого співвідношення $T_{\rm N} \propto t^2/U$ для режиму сильного зв'язку.

Необхідно звернути увагу, що в нашому чисельному аналізі ми не застосували жодних додаткових обмежень на тип магнітного впорядкування, за винятком того, що ми обмежилися простою віссю (базисом оператора числа частинок) та дозволили системі мати максимум два різні рішення підґратки. Проте, в двох окремих областях фазової UT діаграми (див. рис. 4.10), (i) $U \approx 5t, T < 0.13t$ та $U \approx 14t, T \approx 0.3t$, для забезпечення остаточної збіжності ДТСП, незалежно від обчислювача, було потрібно додаткове демпфування між ітераціями ДТСП. Використовуючи аналіз, пов'язаний з теорією лінійного відгуку в рамках зазначеного підходу, ми перевірили, що у випадку (i) не існує інших несумісних конкуруючих типів магнітних упорядкувань, тобто, крім тих, що мають хвильовий вектор порядку $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$. Відсутність збіжності ДТСП



Рис. 4.11. Схематичний перелік потенційних фаз з порушеною симетрією на двох сусідніх вузлах з відповідною залишковою симетрією, загальна кількість непорушених генераторів N_0 та кількість збуджень Намбу-Ґолдстоуна N_1 , що дорівнює кількості спонтанно порушених генераторів [197]. p_{α} – ймовірність тунелювання компоненту α між вузлами згідно з принципом Паулі.

без додаткового гасіння в області (ii) обумовлено близькістю переходу металізолятор.

Представлений підхід дозволяє, в принципі, спостереження та аналіз інших типів упорядкованих станів далекого порядку, зокрема, інших типів хвиль густини кольору (ХГК), які мають різну залишкову симетрію і, отже, різну кількість порушених генераторів та збуджень Намбу-Ґолдстоуна; див. також рис. 4.11. Проте, хоча магнітні сприйнятливості, що відповідають іншим генераторам групи SU(4), показують аналогічну поведінку в області ПМ із відповідною розбіжністю при однаковій критичній температурі, визначено, що система вибирає «звичну» АФМ фазу за будь-якої ненульової амплітуди зв'язку U/t при зниженні температури. Це можна пояснити тим, що залишкова симетрія позначеної фази АФМ (на відміну від інших ХГК) максимально налаштована на блокування Паулі при заданих обмеженнях, так що кінетична енергія всіх чотирьох компонентів може бути мінімізована з найбільшою ефективністю.

Фазова діаграма, представлена на рис. 4.10 для SU(4)-симетричної системи, є важливою у кількох аспектах. З боку фермі-рідини (слабкого зв'язку) ми спостерігаємо розрив у намагніченості m, що вказує на фазовий перехід першого порядку від ПМ до АФМ. Цей результат суттєво контрастує з добревивченим випадком двокомпонентної SU(2)-симетричної моделі Габбарда при напівзаповненні зони, де відповідний перехід є другого порядку при будь-якій амплітуди зв'язку U/t. Це також суттєво відрізняється від низькотемпературних характеристик трикомпонентної SU(3)-симетричної моделі Габбарда на простій кубічній ґратці при n = 1 (наповнення зони на 1/3), де має місце перехід першого порядку, але з'являється лише при зв'язку $U_c \approx 9.6t$ на границі T = 0, див. також рис. 4.6.

На рис. 4.12 докладніше проаналізовано низькотемпературні поведінки намагніченості m в області слабкого зв'язку отриманої фазової діаграми (див. рис. 4.10). Враховуючи екстраполяцію, показану на вставці, ми приходимо до висновку, що область співіснування зменшується з температурою; таким чином фазовий перехід стає неперервним (тобто, другого порядку) тільки при U = 0та T = 0.

Спостережуваний перехід першого порядку також супроводжується гістерезисом подвійної заселеності вузлів (див. рис. 4.13), $D = L^{-1} \sum_{j} D_{j}$, де $D_{j} = \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'>\alpha} \langle n_{j\alpha} n_{j\alpha'} \rangle$ для вузла ґратки j, а L – загальна кількість вузлів у системі. Тому обидві фізичні величини, m та D можуть бути використані для визначення області співіснування чотирикомпонентних ПМ фермі-рідини та АФМ ізолятора (що відповідає заштрихованій області на рис. 4.10. Структура фазової наведеної діаграми добре узгоджується з нещодавніми результатами ДТСП, отриманими для аналогічної SU(4)-симетричної системи з геометрією системи типу ґратки Бете [210]. Крім того, на основі гістерезисної поведінки подвійної



Рис. 4.12. Залежності намагніченості m від сили взаємодії U/t при різних температурах. Вставка: ширина області співіснування в залежності від температури.

заселеності в режимі ПМ (зі штучним пригніченням АФМ впорядкуванням в чисельній процедурі) ми визначили положення переходу першого порядку метал-діелектрик, існування якого було зазначене в роботах [207, 208, 210]. Цей перехід вказаний на фазовій діаграмі на рис. 4.10 світлими пунктирними лініями.

Ізотермічна стисливість κ , яку можна визначити через похідну густини частинок по хімічному потенціалу, $\kappa n^2 = \partial n / \partial \mu$, дає додаткову інформацію про наявність енергетичної щілини в одночастинковому спектрі збуджень системи. Перевага цієї величини полягає в тому, що її значення можна виміряти в експериментах з високою точністю [162], аналогічно до подвійної заселеності. На рис. 4.14 представлені контурні лінії постійної стисливості як при переході до упорядкованого стану, так й у області кросовера метал-ізолятор над АФМ фазою.

Враховуючи, що ДТСП, як правило, завищує температуру Нееля в режимах проміжного та сильного зв'язку для однозонної SU(2)-симетричної моделі Габбарда (див., наприклад, статтю [113]) для порівняння), ми очікуємо, що критична точка переходу метал-ізолятор другого порядку в SU(4)-симетричній



Рис. 4.13. Залежності подвійної заселеності від температури (а) з урахуванням АФМ впорядкування і (б) під ПМ обмеженням. Набори (а) та (б) також відповідають двом різним областям співіснування, вказаним на рис. 4.10.



Рис. 4.14. Контурний графік для стисливості SU(4)-симетричної суміші при половинному наповненні зони у близькості магнітного переходу (товстої сірої лінії) та переходу метал-ізолятор (пунктирна сіра лінія). Затінені контурні лінії в АФМ області відповідають рішенням під ПМ обмеженням у ДТСП.

системі знаходиться в області ПМ і, отже, може бути безпосередньо досліджена в експерименті. Як видно з отриманих результатів, у впорядкованій фазі перехід метал-ізолятор зміщується у напрямку меншої амплітуди взаємодії та збігається з лінією АФМ переходу. Цей ефект інтуїтивно зрозумілий, оскільки при слабкому і проміжному зв'язку АФМ впорядкування приводить систему до ізоляційного стану і тим самим пригнічує збудження (типу частинка-частинка).

Ентропія, що припадає на одну частинку, служить мірою визначення температури в сучасних експериментах з ультра-холодними газами [70, 172]. В рамках теоретичного підходу, як правило, ми обчислюємо ентропію на вузол в нормальній (ПМ) фазі і отримуємо $S(\mu_0, T)$ при заданій температурі T та хімічному потенціалі $\mu_0 = \mu_{\rm hf}$ (4.12) за допомоги відомого термодинамічного співвідношення Максвелла $\partial S/\partial \mu = \partial n/\partial T$ та інтегрування $S(\mu_0, T) = \int_{-\infty}^{\mu_0} (\partial n/\partial T) d\mu$. Ентропія на частинку для однорідної системи визначається тоді як $s = S/n(\mu_0) = S/2$. Згідно з рис. 4.15, в області слабкого та проміжного зв'язку спостерігається відомий ефект охолодження Померанчука – при фіксованій ентропії температура знижується зі збільшенням U/t. Для SU(4)-симетричної суміші при заповненні зони наполовину критична величина ентропії, при якій ізентропна лінія досягає межі АФМ фази, оцінюється як $s_c \approx 0.86$ (використовуються одиниці $k_B = 1$).

Відповідно до рис. 4.15, у випадку однорідних систем трикомпонентні суміші видаються найбільш сприятливим для наближення до режиму магнітного впорядкування Неель типу. Проте, в експериментальних умовах важливу роль відіграє наявність зовнішнього потенціалу магнітооптичних пасток. Є чіткі ознаки того, що надмірна ентропія може бути більш ефективно розподілена в навколишніх оболонках чотирикомпонентних сумішей, ніж у системах, що складаються з двох чи трьох взаємодіючих ферміонних компонентів. Відповідний ДТСП аналіз з урахуванням потенціалу захоплення може бути виконаний (див., наприклад, підрозділ 3.3); однак, кількісні результати залежать від параметрів певної експериментальної установки, і, отже, це завдання виходить за рамки



Рис. 4.15. Ізентропні лінії, що відповідають ентропії на частинку, магнітні фази та області співіснування ПМ метал-ізолятор (блакитні пунктирні лінії) для трьох різних моделей Габбарда з симетрією $SU(\mathcal{N})$ на кубічній ґратці. Для $\mathcal{N} = 2, 3$ див. також підрозділи 3.1 та 4.2.

даного дослідження. Надалі, ми пропонуємо ще одне порівняння поведінки ентропії в контексті чотирикомпонентних сумішей з нижчою симетрією гамільтоніана (4.11).

Результати для чотирикомпонентних сумішей ферміонів з симетрією гамільтоніана нижчою за SU(4). Необхідно тепер теоретично дослідити вплив міжорбітальної взаємодії V_{dir} , поступово зменшуючи її амплітуду з $V_{dir} = U$ до $V_{dir} = 0$ (при встановленні $V_{ex} = 0$ спочатку) та проаналізувати перехід від повної SU(4) симетрії до випадку двох повністю відокремлених (взаємно незв'язаних) SU(2)-симетричних систем. Характерну залежність наведено на рис. 4.16, де, зокрема, можна помітити, що міжорбітальна взаємодія пригнічує АФМ фазу. Зі зменшенням V_{dir} ця фаза значно збільшується (найбільш швидка зміна спостерігається при $V_{dir} \approx U$, тобто близько до SU (4)-симетричної точки), в обох напрямках більш високих температур і меншої сили взаємодії. Зазначимо, що поточна АФМ фаза на границі $V_{dir} = 0$ ідентична результатам ДТСП, отриманим раніше для однозонної SU(2)-симетричної системи при простій кубічній геометрії ґратки [112] та підрозділи 3.1 та 3.4.

На відміну від температурних залежностей, поведінка ентропії в невпорядкованій (ПМ) області демонструє, що ентропія збільшується завдяки прямої



Рис. 4.16. Ізентропні лінії та границі АФМ фаз при різних значеннях V_{dir}/U . міжорбітальній взаємодії. Зокрема, для s = 0.9 найнижча температура, яку можна досягти за допомогою адіабатичної зміни амплітуди взаємодії, становить приблизно T = 0.5t для $V_{dir} = U$, що в два рази більше, ніж для інших випадків, зображених на рис. 4.16. Тому критична ентропія, яка дозволяє наближатись до впорядкованої АФМ фази при використанні адіабатичного процесу, значно більша у разі SU(4)-симетричної ферміонної суміші. Необхідно звернути увагу, що SU(4) симетрія не обов'язково повинна бути точною, щоб забезпечити збільшені значення ентропії. Тому ультрахолодні суміші атомів лужних металів (⁶Li та ⁴⁰K як альтернативи для атомів лужноземельних металів ⁸⁷Sr i ¹⁷³Yb) можуть бути доцільними кандидатами для наближення впорядкованих фаз.

Наостанок, ми вивчаємо вплив обмінної взаємодії і розглядаємо випадок $V_{dir} = U/2$ та $V_{ex} \ge 0$. Необхідно звернути увагу, що параметр V_{ex} задає амплітуду спін-фліп процесу, але він також з'являється в члені з операторами густини частинок, оскільки він входить до матриці взаємодії $U_{\alpha\alpha'}$. Нижче ми розглядаємо ці вклади окремо, тобто ми аналізуємо ефект $V_{ex} > 0$ у члені з операторами густини частинок без врахування спін-фліп процесу (такий внесок також позначають як зв'язок Гунда по типу Ізінга), що використовувалась, наприклад, у роботі [213] для аналізу феромагнітного впорядкування при



Рис. 4.17. Лінії фазового переходу до АФМ стану для чотирикомпонентних систем з $V_{dir} = U/2$ та $V_{ex} = 0$ (чорний), $V_{ex} = U/4$ (червоний) та $V_{ex} = U/2$ зі спін фліпом (SU(2), трикутники) та без нього (Ізінг, квадрати).

заповненні зони менш ніж наполовину), а також системи з повним урахуванням спін-фліп процесу. Ми представляємо результати для двох окремих ненульових значень обмінної взаємодії: $V_{ex} = U/4$ (використовуючи також співвідношення $V_{dir} = U - 2V_{ex}$, що, як правило, застосовується в теорії твердого тіла) та $V_{ex} = U/2$ (завдяки $V_{dir} = U/2$, ця границя відповідає нульовим недіагональним елементам $U_{13} = U_{24} = 0$ у матриці взаємодії $U_{\alpha\alpha'}$ по типу густина-густина).

Як показано на рис. 4.17, АФМ впорядкування залишається домінуючою магнітною нестабільністю для моделі Габбарда при обмінній взаємодії $0 \leq V_{ex} \leq U/2$ та напівзаповненній зоні. Крім того, внаслідок різних амплітуд для внутрішньо- та міжорбітальних взаємодій, ми спостерігаємо відносне збільшення АФМ фази у відповідній T - U діаграмі в обох випадках (з урахуванням і без урахування спін-фліп внеску). Як і очікувалося, спін-фліп процес зменшує області магнітно-впорядкованих фаз. Однак, існування ненульової прямої взаємодії переважає вказану тенденцію при слабкому і проміжному зв'язку таким чином, що максимальна критична температура при $V_{ex} \gtrsim U/4$ все ще на 30%

вище, ніж у системі з $V_{ex} = 0$.

На основі аналізу ентропії проведено оцінки щодо «оптимального» типу обмінного доданку (зі спін-фліпом або без нього, як це було розглянуто вище), що може бути реалізовано в експериментах, що використовують суміші ультрахолодних атомів. Як і у вищевикладених випадках, слід зауважити, що при фіксованих U і T ентропія зростає (відповідний ефект Померанчука стає сильнішим) з урахуванням спін-фліп процесу у близькості до магнітних переходів. Тому при проміжному зв'язку (близькому до відповідного максимуму температури Нееля) два ефекти – зменшення T_N та збільшення s – майже компенсують один одного таким чином, що критичні ентропії, що припадають на одну частинку, стають приблизно однакові, наприклад, для $V_{ex} = U/4$, в обох випадках це призводить до $s_c \approx 0.67$.

4.4. Феромагнетизм в дво- та три-орбітальній моделі Габбарда.

Мотивація досліджень. Симетрія, її дискретний або безперервний характер, а також явне або спонтанне її порушення відіграють вирішальну роль у багатьох напрямах сучасних досліджень. У теорії конденсованого стану, як приклад, моделі Гейзенберга та Ізінга є відмінними прикладами систем, що мають безперервну та дискретну спінову симетрію, відповідно. Хоча спонтанне порушення спінової симетрії відіграє центральну роль у спостереженні фазових переходів та безщілинних колективних збуджень, його явний аналог є менш «чарівним» і зазвичай походить із зовнішніх джерел, таких як поля, недосконалості матеріалів або спрощення, необхідні для проведення відповідного теоретичного аналізу.

Феромагнітне (ФМ) впорядкування з далекодійними кореляціями є визначною реалізацією спонтанно порушеної симетрії, що відповідає за багато важливих фізичних явищ, наприклад, ефект колосального магнетоопору у манґанітів [214]. У пошуках прототипної ґраткової системи частинок, що взаємодіють та дозволяють ФМ-впорядкований основний стан, однозонна модель Габбарда може бути запропонована як найпростіша. Однак, як підкреслювалося та детально вивчено у [215, 216], така модель *не є загальною* моделлю феромагнетиків, оскільки без петлевої структури ґратки або без спеціальних доданків відповідний ФМ стан може бути стабілізовано лише в границі Наґаоки $(U = \infty)$. Тільки наступна за простотою, двоорбітальна модель Габбарда, забезпечує мінімальну кількість необхідних інгредієнтів (зокрема, локальний ненульовий зв'язок Гунда) для підтримки ФМ впорядкування.

В даний час динамічна теорія середнього поля (ДТСП), див. детальніше підрозділ 1.3.5, – це потужний непертурбативний теоретичний підхід для опису фізики сильно корельованих матеріалів, включаючи переходи між різними термодинамічними фазами. У ряді попередніх ДТСП досліджень, що аналізували ФМ упорядкування у двозонній моделі Габбарда, обчислювальна процедура була обмежена взаємодією по типу густина-густина [209, 213, 217]. Хоча це спрощення суттєво знижує обчислювальні витрати, воно впливає на фізику моделі, особливо на близькокритичні явища (див., наприклад, роботу [218] з недавнім матеріально-орієнтованим аналізом). Тому було докладено значних зусиль для врахування повної обертальної симетрії двочастинкових взаємодій, див. роботи [219–228] та підрозділ 4.3.

Паралельно з прогресом ДТСП та інших теоретичних підходів, ультрахолодні атоми в оптичних ґратках [69] стали універсальним і дуже точним експериментальним інструментом для отримання нових пластів знань у багатому сімействі моделей Габбарда. У цих системах ступінь вільності, що пов'язана зі спіном частинок, може бути віднесена до атомів у різних внутрішніх станах (тобто широко застосовується концепція *nceвdocniнy*). Це призводить до великої гнучкості – за бажанням, спінова симетрія може бути явно порушена або відновлена з високою точністю за допомогою належного експериментального налаштування [98, 166]. Зокрема, останні експерименти з атомами ¹⁷³Yb та ⁸⁷Sr [202, 229, 230] демонструють можливість реалізувати двоорбітальні моделі
Габбарда за допомоги зв'язку Гунда ФМ типу і SU(*N*)-симетричні взаємодії псевдоспінових кольорів.

Мета цього дослідження – проаналізувати вплив параметризації взаємодії, що може бути SU(2)-симетричною по відношенню обертань у псевдоспіновому просторі або нижчою, на ФМ упорядкування в багатоорбітальних моделях Габбарда. Починаючи з випадку вироджених орбіталей, вводиться кристалічне поле для зв'язку металевої ФМ фази типу Стонера в моделі Габбарда із зонами, що перекриваються, і ФМ фази в моделі подвійного обміну (або ґратковій моделі Кондо). Остання має давню історію [231], і вона широко застосовується для опису ФМ упорядкування та пов'язаних з ним ефектів у манґанітів. Модельні дослідження за допомогою ДТСП вже виявили важливі наслідки електронних кореляцій [232,233] та спінових флуктуацій [234] на ФМ упорядкування в режимі подвійного обміну.

Модель та метод. Розглянемо модель Фермі-Габбарда з декількома (m = 2,3) орбіталями, що описується гамільтоніаном

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\gamma=1}^{m} (\epsilon_{\mathbf{k}\gamma} + \mu_{\gamma}) c_{\mathbf{k}\gamma\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\gamma\sigma} + U \sum_{i\gamma} n_{i\gamma\uparrow} n_{i\gamma\downarrow} + U' \sum_{i\sigma,\gamma<\gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\bar{\sigma}} + (U' - J) \sum_{i\sigma,\gamma<\gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma} + \alpha J \sum_{i,\gamma<\gamma'} (c_{i\gamma\uparrow}^{\dagger} c_{i\gamma\downarrow}^{\dagger} c_{i\gamma\downarrow} c_{i\gamma\uparrow} + \text{H.c.}) + \alpha' J \sum_{i,\gamma<\gamma'} (c_{i\gamma\uparrow}^{\dagger} c_{i\gamma\downarrow}^{\dagger} c_{i\gamma\downarrow} c_{i\gamma'\downarrow} c_{i\gamma'\downarrow} + \text{H.c.}).$$

$$(4.14)$$

Перший доданок включає енергії вільних частинок $\epsilon_{\mathbf{k}\gamma}$, хімічні потенціали μ_{γ} , а також ферміонні оператори народження (знищення) $c^{\dagger}_{\mathbf{k}\gamma\sigma}$ ($c_{\mathbf{k}\gamma\sigma}$) електронів на орбіталі γ з проекцією спіну $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ з її протилежною $\bar{\sigma} = \{\downarrow, \uparrow\}$ і квазіімпульсом \mathbf{k} . U – амплітуда внутрішньоорбітальної взаємодії, а J характеризує локальний (i – індекс вузла ґратки) феромагнітний (J > 0) зв'язок Гунда. Тут і нижче використовується параметризація U' = U - 2J, яка, як правило, справедлива для всіх взаємодій електрон-електрон, які обертально-інваріантні в координатному просторі. Коефіцієнти $\alpha, \alpha' \in [0, 1]$ можна, в принципі, встановлювати незалежно один від одного. При $\alpha = \alpha'$ два обмежуючих випадки з $\alpha = 0$ і $\alpha = 1$ відповідають так званій параметризації взаємодії по типу густина-густина (або Ізінга) і Слетера-Канаморі. Також обмежимось усіма позитивними амплітудами взаємодії, що призводить до обмежень U > 0 і $J \leq U/3$.

Гамільтоніан (4.14) дозволяє проводити окремий аналіз спінового та орбітального секторів. Оскільки симетричність останнього майже не має значення для поточного дослідження, його обговорення для простоти опускається. Зазначимо тільки, що ці симетрії можуть дозволити додаткові безперервні перетворення між орбітальними компонентами або просто факторизувати спінову частину, див. більш докладно у [209, 235]. Тому достатньо коротко вказати на вплив параметра анізотропії Ізінга α на симетрію спінового сектора. Зокрема, при $\alpha = 1$ модель стає SU(2) симетричною щодо обертів у спіновой частини до групи $\mathbb{Z}_2 \times U(1)$, де \mathbb{Z}_2 відповідає відображенням типу $c_{\gamma\uparrow} \rightarrow c_{\gamma\downarrow}$, а U(1) припускає інваріантність гамільтоніана при обертаннях навколо осі квантування z, $(c_{\gamma\uparrow}, c_{\gamma\downarrow}) \rightarrow (e^{i\phi}c_{\gamma\uparrow}, e^{-i\phi}c_{\gamma\downarrow})$.

У ДТСП аналізі магнітного впорядкування в досліджуваній системі використовується два типи розв'язувачів для допоміжної задачі домішки Андерсона. Використовується розв'язувач домішок з розкладанням по гібридизацій в квантовий Монте-Карло обчисленнях на вісі безперервного часу, що надається через програмний пакет [236], який включає необхідні узагальнення, введені у посиланнях [220, 223, 228]. Другий варіант – підхід точної діагоналізації, що заснований на розширеннях, обговорених у розділах 4.2 та 4.3. Максимальна кількість ефективних орбіталей резервуара для кожного орбітального і спінового компоненту обмежена в цьому підході значеннями $n_s = 4$ для m = 2 і $n_s = 3$ для m = 3. Обмеження в точній діагоналізації обумовлено експоненціальним зростанням відповідного простору Гільберта із загальною кількістю станів $\mathcal{N} = 2mn_s$. Систематично перевірено, що використані максимальні числа n_s є достатніми для узгодження результатів у режимах перекриття зон. При нижчих значеннях n_s або в режимі подвійного оміну відхилення стають більш помітними. Оскільки використаний розв'язувач з розкладанням по гібридизації не має вираженої проблеми ферміонного знаку [220], його вихідні результати використовуються в цьому підрозділі для отримання діаграм та графічних залежностей, а розв'язувач точної діагоналізації – як додаткове джерело, що підтримує основні спостереження.

Для простоти та загальності аналізу достатньо обмежитись нижче напівкруглою густиною станів $D(\epsilon) = (1/2\pi t^2)\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}$ і встановити амплітуду тунелювання t як одиницю масштабування $(t \equiv t_m = 1)$ у всіх енергетичних величинах (наприклад, ширина зони для системи, що не взаємодіє, таким чином стає W = 4). Слід зауважити, що відповідні оцінки для більш реалістичних геометрій ґратки зазвичай можна виконати шляхом належного масштабування величин відповідно до координаційного числа z фактичної ґратки $(t \to \sqrt{z}t)$ [208]. Наприклад, для простої кубічної геометрії гратки з z = 6 енергетичний параметр P_1 (наприклад, критична температура або сила взаємодії) стає $P_1 \approx \sqrt{6}P_0$. При слабкому зв'язку таке масштабування виконується лише в тому випадку, якщо немає особливостей Ван Хоува, близьких до енергії Фермі, інакше тенденція магнітного впорядкування може бути посилена. В границі сильного зв'язку $(U \gg t)$ форма густини станів для невзаємодіючих частинок стає менш важливою.

Особливості ФМ упорядкування аналізуються двома способами: шляхом прямого вимірювання намагніченості та шляхом аналізу магнітної сприйнятливості в симетричній фазі із зовнішнім магнітним полем. Через обмеження числового підходу гібридизаційними функціями, що є діагональними по орбітальним та спіновим індексам, не проводяться вимірювання інших потенційно конкуруючих типів упорядкування (наприклад, нахиленого АФМ, магнітких зв'язків типу Рудермана-Кіттеля-Касуя-Йосіда, спін-орбітального та екситонного спарювання).



Рис. 4.18. Фазові діаграми, що вказують на еволюцію ФМ фаз при зміні параметра анізотропії Ізінга $\alpha = 0, 0.6, 0.8, 0.9, 1$ при U = 12 та J = 3.

Резильтати для вироджених орбітальних станів. На рис. 4.18 показано зміни меж ФМ фаз на відповідних діаграмах в площині наповнення вузлів ґратки та температури для кількох значень параметра α . Параметри заповнення зони та амплітуди взаємодії взаємодії, U = 12 і J = U/4, відповідають металевому режиму Гунда із значним збільшенням ефективної маси [235, 237]. Зокрема, при m = 3 і n = 2 обраний режим є відносно далеким від переходу Мотта, див. [238]. Найяскравіша особливість полягає в тому, що у випадку двоорбітальної системи ФМ упорядкування повністю зникає в границі SU(2)симетричної системи ($\alpha = 1$). Це контрастує з попередніми очікуваннями (що ґрунтуються на ДТСП аналізі лише зі взаємодією по типу густина-густина; див. роботу [213]), що доданок із спін-фліпом не має сильного впливу на критичні температури в цьому діапазоні параметрів. Насправді це не так, і як можна побачити з порівняння з триорбітальною моделлю, ФМ упорядкування сильно залежить від кількості активних орбіталей. Цей ефект можна пов'язати з пригніченням квантових флуктуацій із збільшенням орбітального виродження, тобто ефективні спінові моменти стають більш класичними (див., наприклад, підручник [81]).

На рис. 4.19 порівнюються критичні параметри взаємодії при фіксованій температурі T = 0.025 для граничних випадків $\alpha = 0$ і $\alpha = 1$. Для двоорбітальної моделі спостерігається сильне пригнічення ФМ фази спін-фліп доданком.



Рис. 4.19. UJ фазові діаграми виродженої двоорбітальної (а) та триорбітальної (б) моделей у низькотемпературній області (T = 0.025) при заповненні ґратки n = 1.5.

Цей ефект значно зменшується в триорбітальній моделі. Яскравий вплив множинності зон узгоджується з ранніми теоретичними дослідженнями конкретних матеріалів [215]. Зауважимо, що аналогічно аргументам для однозонної SU(2)симетричної моделі Габбарда [216], результати підтверджують відсутність ФМ упорядкування при $U < \infty$ у високосиметричних (односмугових) SU(2*m*)симетричний моделях, що відповідає граничному випадку $J \rightarrow 0$ на рис. 4.19.

Форма взаємодії, тобто параметр α , впливає не тільки на границі ФМ фази, але і на одночастинкові величини в парамагнітному (ПМ) режимі, такі як ефективна маса і час життя квазічастинок, що мають вагоме значення у фізиці металів Гунда [235,237,238]. Відповідно до підходу у роботі [239], використовується поліноміальне наближення до уявної частини самоенергії $\Sigma(i\omega_n)$ на шістьох найнижчих частотах Мацубари, щоб отримати збільшення маси квазічастинок $Z^{-1} = 1 - d \operatorname{Im}[\Sigma(i\omega_n)]/d\omega_n|_{\omega_n\to 0}$ і частоту розсіювання квазічастинок Г (зворотній час життя) $\Gamma Z^{-1} = -\operatorname{Im}[\Sigma(i\omega_n)]|_{\omega_n\to 0}$. Як показано на рис. 4.20, різниця між $\alpha = 0$ і $\alpha = 1$ максимальна в околі границі ФМ фази ($\alpha = 0$). Результати для m = 3, n = 2 і $\alpha = 1$ добре узгоджуються з наявними масами



Рис. 4.20. Залежності збільшення ефективної маси та швидкості розсіювання квазічастинок (зворотний час життя) від сили взаємодії U для моделі m = 3 в ПМ режимі при n = 2, J = U/4 і трьох різних температурах, T = 0.0125, 0.025, 0.05. Вертикальні смуги позначають відповідні границі ФМ фази.

квазічастинок Z, див. роботу [238]. Границя ФМ фази в цьому випадку добре відповідає границі, отриманій для рутенату кальцію CaRuO₃ [239].

Результати за наявності щілини між енергетичними рівнями орбітаьних станів. Далі проаналізуємо особливості ФМ упорядкування, коли виродження знімається так званим кристалічним полем $\Delta = \mu_m - \mu_\gamma$ ($\gamma = 1, \ldots, m-1$), яке розщеплює одну орбіталь від решти. Густина $n = m - 1 + \delta$ фіксується так, що для великих U і $\Delta > t_\gamma$ (що відповідає режиму подвійного обміну) нижня (вироджена) зона стає наполовину заповнена, встановлюючи заповнення верхньої зони $\delta = 0.2$. Спочатку ширини усіх зон обираються рівними, $W_\gamma = W_m = 4$, і змінюється величина кристалічного поля Δ . Після цього, розглядається також випадок змінення ширини нижньої (виродженої) зони при фіксованому Δ .

На рис. 4.21 показано границі фази як функції Δ і *J*. Подібно до попередніх спостережень, повна спін-обертальна симетрія ($\alpha = 1$) пригнічує ФМ фазу, а ефект менш виражений із збільшенням кількості зон. Можна



Рис. 4.21. Ліворуч: схема енергетичних станів та заповнення орбітальних станів системи. У центрі: $J\Delta$ фазові діаграми двоорбітальної (m = 2, верхній ряд) та триорбітальної (m = 3, нижній ряд) моделей при n = 1.2 і n = 2.2, відповідно. Праворуч: орбітальне заповнення n_{γ} , отримане при $\alpha = 1$, J = 2.25 (A, пунктирні лінії) і J = 5.5 (Б, суцільні лінії). U = 4J та T = 0.025 скрізь.

помітити дві характерні області зі слабкими залежностями J_c від Δ , між якими виникає досить помітна зміна. Такий «стрибок» збігається з початком цілочислового заповнення нижньої зони. Це сигналізує про те, що режим подвійного обміну (при великих Δ) в цей момент різко закінчується. При малих Δ АФМ фаза не є стабільною за будь-яких J. Доданок з парною зміною орбіталі ($\alpha' = 1$) має лише незначний вплив на границі фаз, див. рис. 4.21. Належним поясненням цього є той факт, що є лише невелика кількість подвійно зайнятих орбіталей у заданому режимі зв'язку Гунда.

У режимі подвійного обміну ($n_{\gamma} = 1$ для $\gamma < m$ і $n_m = \delta$), що відповідає області $\Delta \gtrsim 1$ і $J \gtrsim 1$ на рис. 4.21, систему можна описати за допомоги ФМ ґраткової моделі Кондо з додатковим АФМ зв'язком між локальними спіновими моментами [240–244],

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\sum_{\gamma=1}^{m} t_{\gamma} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\gamma\sigma}^{\dagger} c_{j\gamma\sigma} + \mathcal{J}_{\text{A}} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_{i} \cdot \mathbf{S}_{j} - J \sum_{i} c_{im\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{im\sigma'} \cdot \mathbf{S}_{i}, \quad (4.15)$$

де \mathbf{S}_i – оператори спіна для «локалізованих» станів зі значенням S = (m-1)/2, $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\gamma=1}^{m-1} c_{i\gamma\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{i\gamma\sigma'}, \boldsymbol{\tau} - 2 \times 2$ матриці Паулі, а $\langle ij \rangle$ вказує підсумовування за близькосусідніми вузлами. У границі сильного зв'язку для нижчих орбітальних станів $(U \gg t_{\gamma})$ та $n_{\gamma} \approx 1$, відповідно до перетворень Шріффера-Вольфа, амплітуда АФМ зв'язку змінюється відповідно до співвідношення $\mathcal{J}_A \propto t_{\gamma}^2/U$ $(\gamma < m)$. Слід зазначити, що гамільтоніан (4.15) відповідає системі, що інваріантна по відношенню до обертань у спіновому просторі. В іншому випадку (при $\alpha \neq 1$) константи магнітного зв'язку стають анізотропними, але поведінка їх масштабування з t і U залишається подібною.

Щоб показати важливість процесів АФМ обміну, які явно включені в наведене розширення моделі подвійного обміну (4.15), проведемо додатковий аналіз, де кристалічне поле зберігається фіксованим ($\Delta = 1.2$), а ширина зон W_{γ} ($\gamma < m$) буде змінюватись. Завдяки кінетичному механізму обміну, цього має бути достатньо для пригнічення АФМ впорядкування, що диктується амплітудою \mathcal{J}_A . Це підтверджується результатами ДТСП на рис. 4.22, де продемонстровано посилення ФМ упорядкування через пригнічення свого основного конкурента, АФМ зв'язку, зі зміною ширини зони. Як і раніше, з прямого порівняння параметризацій $\alpha = 0$ і $\alpha = 1$ спостерігається більш виражений ефект спінової симетрії SU(2) в двоорбітальній моделі (m = 2), що зменшується з включенням додаткового орбітального компонента в нижчу ефективну зону (m = 3).

Поведінку критичної амплітуди взаємодії U_c при зміні співвідношення ширин зон на рис. 4.22 можна зрозуміти наступним чином. Підтримуючи ширину зони делокалізованих частинок фіксованою, очікується, що АФМ-ФМ перехід при нульовій температурі та під обмеженням колінеарного магнітного впорядкування відбудеться при певному значенні \mathcal{J}_A/J . Враховуючи, що $J \propto U$ (відношення U/J зберігається фіксованим) і $\mathcal{J}_A \propto t_{\gamma}^2/U$, отримуємо результат $U_c \propto t_{\gamma}$. Відповідна поведінка позначена лініями на рис. 4.22, що показує відносно гарне узгодження з даними ДТСП, отриманими при розгляді повної



Рис. 4.22. Залежності критичної амплітуди взаємодії U_c для ФМ упорядкування від співвідношення ширин зон в двоорбітальній (ліворуч) і триорбітальній (праворуч) моделі Габбарда при $\Delta = 1.2$, J = U/4, n = m - 1 + 0.2 і T = 0.025. Зіркові точки відповідають тим самим точкам, які вказані на фазових діаграмах на рис. 4.21. Лінійні апроксимації (пунктирні лінії) виведені з умови балансу між ефективними ФМ та АФМ амплітудами у рівнянні (4.15); див. текст. Амплітуда тунелювання у верхній зоні є фіксованою $t_m = 1$.

моделі (4.14) в режимі подвійного обміну при ненульовій температурі.

З рис.4.21 також видно, що опис в рамках моделі подвійного обміну стає невірним при малому Δ . Різкі зміни позицій границь ФМ фази, відповідно до графіків, показаних праворуч на рис. 4.21 напряму пов'язані зі зміною режиму частково перекритих зон (з металевою поведінкою всіх орбітальних компонентів) на режим подвійного обміну (з металевою поведінкою лише компоненту $\gamma = m$). Слід зауважити також, що для SU(2)-симетричного випадку і m = 3 (на відміну від m = 2) можна безпосередньо виводити систему з ФМ до АФМ упорядкованого стану, змінюючи лише величину кристалічного поля Δ .

Режим проміжних кристалічних полів цікавий у кількох аспектах. Поперше, феромагнетизм із зонами, що перекриваються частково, реалізується у високо валентних оксидах перехідних металів, таких як SrCoO₃ [245, 246]. По-друге, це можна експериментально вивчити з ультрахолодними газами лужноземельних атомів в оптичних ґратках, див. роботи [202,229,230], де заселеності орбітальних станів можна налаштовувати незалежно, отже, амплітуду розщеплення Δ можна змінювати в широких діапазонах.

Для збереження послідовності наведеного опису, він не поширюється на більші кількості орбіталей, але спостережувана поведінка дозволяє зробити корисну екстраполяцію з точки зору твердотільних реалізацій. Для систем, що характеризуються електронними d орбіталями в кубічних структурах перовскітних кристалів (і, зокрема, манганітів), типове відношення ширин зон можна приблизно оцінити як $W_{e_g}/W_{t_{2g}} \approx 2$. Якщо припустити потрійне виродження нижчих (t_{2g}) та подвійне виродження вищих (e_g) станів і $n = 3 + \delta$, поправки до характерних критичних значень внаслідок процесів спін-фліпу мають залишатися помітними, але, імовірно, мають не перевищувати 30% – це, зокрема, погоджується з останніми дослідженнями [218]. Проаналізовані залежності також дозволяють припустити, що антиферомагнітні кореляції між орбітальними станами t_{2g} відіграють важливу роль у фізиці манганітів та споріднених сполук, тому їх слід належним чином враховувати.

Висновки до розділу 4

Результати досліджень, представлених у даному розділі, опубліковано в статтях [13–17]. Серед основних результатів в якості висновків можна виділити наступні:

• Виявлено особливості магнітного впорядкування в трикомпонентних сумішах ультрахолодних ферміонів зі взаємодіями відштовхування в оптичних ґратках за допомогою динамічної теорії середнього поля, що узагальнена для координатного простору. Показано, що при наповненні зони на 1/3 з підвищенням температури система зазнає послідовних термічно-індукованих переходів між різними типами підґраткового впорядкування, що узгоджується в границі $U \gg t$ з попередніми розрахунками для SU(3)-симетричної

моделі Гейзенберга. Також обраховано критичні температури для магнітного впорядкування в трикомпонентних сумішах з різними амплітудами взаємодії між компонентами, що реалізується в ультрахолодних атомах лужних металів за допомогою резонансів Фешбаха. Показано, що асиметрична взаємодія цього типу знімає виродження в двопідґраткових фазах і призводить до пригнічення відповідних критичних температур.

• Розроблено теоретичний підхід, який дозволяє детально вивчити магнітну фазову діаграму трикомпонентних ферміонних сумішей в оптичних ґратках з простою кубічною геометрією при кінцевій температурі та заповненням однією частинкою на вузол. При слабкому зв'язку для SU(3)-симетричної суміші спостережено повне пригнічення магнітних фаз, які виникають лише в області відповідного кросоверу до стану ізолятора Мотта. У рамках узагальнень ДТСП для двох підґраток та для координатного простору побудовано магнітні фазові діаграми. Незважаючи на складнішу структуру магнітних фаз, при аналізі ентропії виявлено можливі переваги цих сумішей порівняно з двокомпонентними аналогами для наближення до квантового магнетизму в оптичних ґратках за рахунок більш вираженого охолодження, що обумовлено сильнішим ефектом Померанчука.

• Проведено теоретичний аналіз термодинамічних властивостей чотирикомпонентних ферміонних сумішей у періодичній ґратці з простою кубічною (тривимірною) геометрією при наповненні зони наполовину. Результати динамічної теорії середнього поля для SU(4)-симетричних сумішей вказують на фазовий перехід першого порядку між парамагнітною фермі-рідиною та антиферомагнітним ізолятором за ненульових температур. Інша особливість, що відрізняє SU(4)-симетричну модель, – це близькість критичної точки Мотта до магнітного переходу. Встановлено, що точне порушення SU(4) симетрії завдяки введенню в теоретичний аналіз членів з прямою міжорбітальною та обмінною взаємодіями збільшує критичну температуру впорядкування, але зменшує критичну ентропію, яка фактично є більш важливою характеристикою в експериментах, що використовують ультрахолодні атоми в оптичних ґратках.

• Виявлено вплив спінової симетрії гамільтоніана на ФМ упорядкування в мультиорбітальній моделі Габбарда за допомогою ДТСП. Спостережено сильні ефекти пригнічення ФМ фаз при врахуванні повної спіново-обертальної симетрії у двоорбітальній системі (на відміну від слабших ефектів для АФМ упорядкування). Розглядаючи триорбітальну модель, показано, що ці ефекти слабшають (тобто, ФМ упорядкування ефективно відроджується) зі збільшенням кількості активних орбіталей, що добре узгоджується з аргументами на основі пригнічення квантових флуктуацій через наближення до границі класичних спінів. Аналіз поширено на випадок розділених орбіталей, де спостерігається відповідний перехід від режиму Стонера до режиму подвійного обміну, але ефект пригнічення, що виникає при включенні процесів спін-фліпа, залишається значним. Результати для двоорбітальної моделі також важливі з точки зору експериментів ультрахолодних атомів, орієнтованих на наближення до феромагнітного Кондо режиму в оптичних ґратках. Розроблений теоретичний підхід дозволяє також вивчити вплив квантових флуктуацій у двоорбітальних моделях із $SU(\mathcal{N})$ -симетричними взаємодіями, де очікується пригнічення магнітного впорядкування зі збільшенням \mathcal{N} (кількість компонентів псевдоспіну), на відміну від дослідженого напрямку SU(2)-симетричних взаємодій та збільшення *т* (кількості активних орбіталей), де ФМ стабілізується зі збільшенням *т*.

РОЗДІЛ 5

ЕКСИТОННІ ВЛАСТИВОСТІ ОКСИДІВ КОБАЛЬТУ В ОКОЛІ КРОСОВЕРУ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ СПІНОВИХ СТАНІВ

5.1. Бозе-конденсація екситонів у LaCoO₃, індукована зовнішнім магнітним полем

Мотивація досліджень. Перовскітний оксид кобальту LaCoO₃ проявляє незвичні фізичні властивості, які привертають увагу вже понад півстоліття. Тонкий баланс між розщепленням кристалічного поля та феромагнітним зв'язком Гунда розміщує іони Со³⁺ в районі переходу між спіновими станами. У поєднанні з ковалентними зв'язками Со-О та зчепленням з ґраткою це робить LaCoO₃ складною фізичною системою. Електропровідність та магнітна сприйнятливість ділять фазову діаграму LaCoO₃ в залежності від температури T на три області з кросоверами між ними: діамагнітний ізолятор ($T\,<\,$ 80 К), парамагнітний (ПМ) ізолятор та ПМ метал (T > 600 К). Для опису фізики LaCoO₃ традиційно використовуються декілька підходів: (і) одноіонна картина основного стану з низьким спіном (S = 0, low spin (LS)) іона Co³⁺ з проміжноспіновими (S = 1, intermediate spin (IS)) або високоспіновими (S = 2, high spin (HS)) збудженнями [247,248] з кінетичним обміном між цими станами на ґратці [249], (іі) підходи зонної моделі з електронами, що взаємодіють через статичне середнє поле [250–252] і (ііі) поєднання обох у вигляді динамічної теорії середнього поля (ДТСП) [253-255]. Незважаючи на численні дослідження, послідовний теоретичний опис низькотемпературних властивостей LaCoO₃ і споріднених сполук залишається відкритою проблемою.

Режим проміжних температур з парамагнітною сприйнятливістю, щілиною для зарядових збуджень і відсутністю значної диспропорції довжин зв'язків Со-О особливо важко описати. Існуючі теорії або передбачають металевий



Рис. 5.1. (a) Процес тунелювання між найближчими атомами, що спричиняє обмін IS-LS. (б) Схематичне зображення енергій атомних мультиплетів разом з дисперсією одиничного IS стану відповідно вакуумного стану LS.

стан [251], або демонструють упорядкування спінових станів (УСС; spin-state ordering (SSO)) [248,256–258], що відповідає періодичному розташуванню атомів Со в різних спінових станах, яке обов'язково супроводжується диспропорцією довжин зв'язків Со-О. Нещодавні експерименти в сильних магнітних полях [259–261], в яких виявлено метамагнітний перехід вище 50 Т, дають важливу підказку щодо характеру режиму проміжних температур. Як вказано авторами статті [261], збільшення критичного поля h_c з температурою T є протиінтуїтивним, враховуючи той факт, що підвищення температури сприяє заселенню магнітних станів.

У цьому підрозділі показується, що рухливість IS збуджень на фоні LS, аспект, відсутній у існуючих теоріях, відіграє важливу роль у LaCoO₃. Оцінки, засновані на першопринципних розрахунках, показують, що, хоча збудження HS, по суті, є нерухомими, ширина зони дисперсії IS є порядку декількох 100 меВ. Отже, найнижче за енергією збудження в твердому тілі може мати інший характер, ніж найнижче одноіонне збудження, як зображено на рис. 5.1. Характер низькоенергетичних збуджень може бути зондований переходом, що індукується зовнішнім магнітним полем. Нерухомі збудження сприяють формуванню УСС. З іншого боку, рухливі збудження призводять до утворення однорідного екситонного конденсату (EK; *excitonic condensate* (EC)). Хоча і УСС, і ЕК можуть бути індуковані магнітним полем, показується, що їх залежність $h_c(T)$ має протилежні нахили.

У цьому підрозділі використовується ДТСП для аналізу мінімальної

теоретичної моделі, що дозволяє вивчити переходи між спіновими станами [262]. Показується, що і УСС, і ЕК можуть бути індуковані зовнішнім магнітним полем і обчислюються температурні залежності критичного поля $h_c(T)$ разом з іншими відповідними фізичними величинами в околі фазових переходів. Щоб продемонструвати доцільність сценарію ЕК, використовується теорія функціоналу електронної густини для оцінки дисперсії збуджень IS та HS у реальному матеріалі.

Модель. Розглянемо двоорбітальну модель Габбарда на квадратній ґратці, яка дозволяє враховувати як нестабільність до утворення УСС, так і ЕК [262]. У зовнішньому магнітному полі *h* гамільтоніан має наступний вигляд:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \sum_{\langle ij \rangle\sigma} (c^{\dagger}_{i\alpha\sigma} c_{j\beta\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i\alpha\sigma} (h\sigma - \mu_{\alpha}) n_{i\alpha\sigma}, + \sum_{i} \mathcal{H}^{(i)}_{\text{int}}$$
(5.1)

де $c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}(c_{i\alpha\sigma})$ – ферміонні оператори народження (знищення), що діють на вузлі ґратки $i, \alpha = \{a, b\}$ представляє собою орбітальний індекс, $\sigma = \{1/2, -1/2\}$ позначає проекцію спіну електронів на вісь магнітного поля (в одиницях $\hbar = 1$), 2×2 симетрична матриця $t_{\alpha\beta}$ складається з амплітуд для звичайних (внутрішньоорбітальних, $\alpha = \beta$) та перехресних (міжорбітальних, $\alpha \neq \beta$) процесів тунелювання, а позначення $\langle ij \rangle$ вказує підсумовування лише по найближчих сусідніх вузлах. Доданок з локальною взаємодією $\mathcal{H}_{int}^{(i)}$ обрано таким чином, щоб мати лише внески типу густина-густина,

$$\mathcal{H}_{\rm int}^{(i)} = U \sum_{\alpha} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + (U - 2J) \sum_{\sigma} n_{ia\sigma} n_{ib-\sigma} + (U - 3J) \sum_{\sigma} n_{ia\sigma} n_{ib\sigma}, \quad (5.2)$$

а в останньому доданку $\mu_{a,b} = \mu \pm \Delta/2$, де μ зафіксовано таким чином, щоб давати середню заселеність у два електрони на вузол ґратки, а Δ позначає розщеплення рівнів кристалічним полем

Для опису моделі (5.1) використовується ДТСП (див. підрозділ 1.3.5) з розкладанням по гібридизації у домішковому розв'язувачі алгоритмом кванто-

вих обчислень Монте-Карло на вісі неперервного часу [104,263]. Обирається так зване сегментне представлення, модифіковане для включення позадіагональних гібридизацій, важливих для врахування екситонної нестабільності [262, 264]. Такий підхід дозволяє отримати функції Гріна для електронів у задачі домішки, тому дає доступ до спектральних характеристик та відповідних локальних величин, наприклад, кореляторів $\langle c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}c_{i\beta\sigma'}\rangle$, які надають інформацію про намагніченість (шляхом взяття елементів з $\alpha = \beta$) та параметрами порядку ЕК ($\alpha \neq \beta$). В однорідному випадку (одинична комірка) достатнім буде зосередитись на параметрах ЕК типу $\phi^+ = \langle c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}c_{ib\downarrow}\rangle$ і $\phi^- = \langle c_{ia\downarrow}^{\dagger}c_{ib\uparrow}\rangle$ і намагніченості $M = \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} \sigma n_{i\alpha\sigma}$ з $n_{i\alpha\sigma} = \langle c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}c_{i\alpha\sigma}\rangle$. У випадку УСС також визначимо різницю заселеностей *а*-орбіталі на двох сусідніх вузлах *i* та *j*, $d_a = \sum_{\sigma} |n_{ia\sigma} - n_{ja\sigma}|$.

Спочатку проаналізуємо фазову діаграму ЕК у зовнішньому магнітному полі. Почнемо з параметрів роботи [264], де для моделі (5.1), але при фіксованих $\Delta = 3.4~\mathrm{eB}$ і h = 0 встановлено можливість конденсації екситонів при $T \approx 850$ К. Кристалічне поле змінюється таким чином, щоб температура відповідно фазового переходу пригнічувалась, див. рис. 5.2(a). Відповідно до цього, амплітуда кристалічного поля Δ обирається такою, щоб система була в нормальній ПМ (LS) фазі, але близька до фазового переходу. Потім додається зовнішнє магнітне поле *h*. Після досягнення критичного значення поля *h*_c система зазнає переходу до феромагнітного екситонного конденсату, який характеризується ненульовим значенням $|\phi^+| > |\phi^-|$ при позитивних значеннях h. Відповідні криві намагніченості, наведені нижче на рис. 5.3(a), демонструють лінійне збільшення з h при низьких полях і мають нахил (сприйнятливість), що збільшується з температурою. Екситонна конденсація проявляється змінами поведінки в кривих M(h,T) в околі $h_c(T)$ при постійній температурі. Повна hT фазова діаграма на рис. 5.2(б) безпосередньо вказує на збільшення h_c зі збільшенням температури.

Поведінку цієї моделі легко зрозуміти, якщо розглянути границю сильного зв'язку. При T = 0 і h = 0 спектр збуджень описується екситонною



Рис. 5.2. Залежність амплітуди параметра порядку ϕ^+ від розщеплення кристалічного поля при h = 0 (а) та від магнітного поля h при $\Delta = 3.68$ (б). Обраховану критичну температуру T_c позначено суцільною лінією. Інші параметри: $U = 4, J = 1, t_{aa} = 0.4118, t_{bb} = -0.1882$ і $t_{ab} = 0.05$.

зоною, відокремленою від вакуумного стану вузькою щілиною (див. рис. 5.1). У ненульовому полі h екситонна зона зазнає розщеплення Зеємана, таким чином, як тільки щілина закривається, починає розвиватися бозе-конденсація. При ненульовій температурі T для формування ЕК потрібне більше критичне значення h_c для подолання вищої ентропії нормальної фази, див. рис. 5.3. Різниці ентропії ΔS обчислюються відповідно до термодинамічних співвідношень

$$\Delta S(h) = \int_0^h \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_{h'} dh', \quad \Delta S(T) = \frac{E(T)}{T} - \int_{T_0}^T \frac{E(T')}{T'^2} dT',$$

де E – внутрішня енергія, T_0 – значення температури, відносно якого проводиться відлік. Збільшення магнітної сприйнятливості в нормальній фазі з температурою відповідає одноіонній фізиці термального заселення спінових станів. Слід зауважити, що навіть за наявності зовнішнього магнітного поля екситонна конденсація є фазовим переходом у термодинамічному сенсі, оскільки вона порушує спіно-обертальну симетрію навколо напрямку зовнішнього поля (вісі



Рис. 5.3. Залежності намагніченості M і ΔS від магнітного поля (верхній рядок) та внутрішньої енергії E і ΔS від температури при постійному магнітному полі (нижній рядок). Інші параметри обрано такими ж, як на рис. 5.2.

z у цій моделі).

Для того, щоб продемонструвати, що індукований полем перехід не пов'язаний із будь-якими суттєвими змінами чи закриттями одночастинкової щілини, обчислюються відповідні спектральні густини вище та нижче критичного значення h_c . Спектри на рис. 5.4 показують, що зеєманівське розщеплення електронних зон на порядок менше величини відповідної щілини.

Далі розглянемо альтернативний сценарій упорядкування спінових станів. З цією метою візьмемо асиметричні амплітуди тунелювання з роботи [257] і кристалічне поле Δ , близьке до округлої ділянки на рис. 5.5(а), для якого перехід до УСС з'являється, а потім зникає зі збільшенням температури, а ЕК пригнічується [266]. Границя сильного зв'язку забезпечує простим розумінням поведінки з таким повторним входженням [257]. Починаючи з чисто LS стану при T = 0, атоми в стані HS генеруються випадковим чином із підвищенням



Рис. 5.4. Одночастинкова спектральна густина станів $A(\mathbf{k}, \omega)$ (кольоровий градієнт у довільних одиницях), обчислена методом максимальної ентропії [265] у ПМ (ліворуч) та ЕК (праворуч) фазах на рис. 5.2(б) при T = 290 K, h = 0.02 eB/ $\mu_{\rm B}$ i h = 0.05 eB/ $\mu_{\rm B}$, відповідно.

температури. При нижньому значенні T_c концентрація станів HS стає настільки високою, що HS-HS відштовхування [266] приводить систему в упорядкований стан, який з часом плавиться на верхній границі T_c . У зовнішньому магнітному полі h тверда фаза УСС розширюється. Це особливо яскраво виражено при нижньому переході по температурі від нормальної до твердої фази, для якої T_c стає більш пригніченим із збільшенням поля h, як показано на рис. 5.5(б). Знак dh_c/dT пов'язаний з тим, що перехід від низькотемпературної (нормальної) до середньотемпературної (УСС) фази визначається внутрішньою енергією, але не ентропією.

Температурні шкали переходів до станів УСС і ЕК контролюються у двоорбітальній моделі Габбарда (5.1) значеннями параметрів $t_a^2 + t_b^2$ і $t_a t_b$ відповідно [262]. Отже, залежно від співвідношення t_a/t_b можна керувати розмахом фаз УСС і ЕК [266, 267]. Хоча ця модель і охоплює основну фізику переходу, що індукується магнітним полем, вона є надто спрощеною для надання кількісних оцінок температур переходу для реального матеріалу. Зокрема, орбітальна виродженість в реальних матеріалах та нелокальні флуктуації, що не враховуються в рамках ДТСП, знижують критичну температуру переходу



Рис. 5.5. Залежність температури переходу між однорідними фазами ПМ та диспропорційними фазами HS-LS (УСС) від розщеплення кристалічного поля при h = 0 (a) та від магнітного поля h при $\Delta = 3.434$ (б). Інші параметри: $U = 4, J = 1, t_{aa} = 0.45, t_{bb} = 0.05$ і $t_{ab} = 0$.

до стану ЕК.

Особливості сполуки. Основна відмінність реального LaCoO₃ від вивченої моделі – це орбітальне виродження, яке породжує збуджені стани як з S = 1(IS), так і з S = 2 (HS). При низьких температурах, коли концентрація збуджень низька, ключовою відмінністю збуджень IS і HS є їх рухливість на фоні LS. Спочатку оцінимо амплітуду розповсюдження збудження IS, задану процесом тунелювання в другому порядку теорії збурень, показаним на рис. 5.1. Зосередимось на збудження IS з орбітальною симетрією T_{1g} , які мають меншу енергію збудження та більшу мобільність, ніж їх аналоги T_{2g} [268, 269]. Збудження T_{1g} може розглядатися як пов'язана пара t_{2g} дірки та e_g електрону з функціями Ваньє подібної форми, що обернені на 45° відносно одна одної, тобто $xy \otimes x^2 - y^2$, $yz \otimes y^2 - z^2$ і $zx \otimes z^2 - x^2$. Ця геометрія робить збудження T_{1g} рухливими в площинах відповідних орбіталей та практично нерухливими в перпендикулярних напрямках.

Амплітуда тунелювання IS T_{1g} екситонів між найближчими атомами в

площині може бути оцінена як

$$t_{\text{IS-LS}} = \frac{2t_t t_e}{\tilde{U}}.$$
(5.3)

Тут $t_t = -0.45$ eB i $t_e = -0.16$ eB – електронні $xy \leftrightarrow xy$ i $x^2 - y^2 \leftrightarrow x^2 - y^2$ амплітуди тунелювання в напрямках x або y. Числові значення отримано з функцій Ваньє для суто d орбіталей, обчислених в ідеалізованій кубічній структурі за допомоги першопринципної теорії функціоналу електронної густини [270–272]. Параметр \tilde{U} приблизно дорівнює U - 2J; відповідні оцінки дають, що його значення для d-орбітальної моделі знаходиться в діапазоні 2– 4 eB. Це призводить до значень $t_{\rm IS-LS}$ в діапазоні 36–72 мeB i зонної ширини дисперсії IS, позначеної на рис. 5.1(б) (з огляду на чотири найближчих сусіда в площині) в діапазоні 290–580 мeB. Відсутність конденсованого стану при h = 0передбачає цілину для збуджень і приводить енергію збудження атомного стану IS принаймні до половини ширини зони, тобто $4t_{\rm IS-LS}$. Ця оцінка узгоджується з експериментальними спостереженнями [273] і дозволяє розмістити енергію збудження атомного стану HS на 100-150 мeB ниж че енергії збудження атомного стану IS, але все ще вище нижньої частини оціненої екситонної дисперсії IS.

Нарешті, проаналізуємо можливість конденсації НS біекситонів. З цією метою розглянемо стан HS як пов'язану пару двох станів IS T_{1g} з різними орбітальними складовими. Це призводить до того, що кожен з трьох орбітальних станів HS має значне тунелювання лише вздовж однієї з кубічних осей з амплітудою, приблизно оціненою співвідношенням

$$t_{\rm HS-LS} = \frac{\sqrt{2}t_{\rm IS-LS}^2}{\epsilon_{\rm HS} + \epsilon_{\rm LS} - 2\epsilon_{\rm IS}}.$$
(5.4)

Верхнє граничне значення для $t_{\text{HS-LS}} = \frac{1}{2\sqrt{2}} t_{\text{IS-LS}}$ отримується, припускаючи, що $\epsilon_{\text{HS}} = \epsilon_{\text{IS}}$ і $\epsilon_{\text{IS}} - \epsilon_{\text{LS}} = 4t_{\text{IS-LS}}$, що продиктовано необхідною стійкістю нормального стану за відсутності зовнішнього поля. Це дає зонну ширину дисперсії HS

порядку $4\sqrt{2}$ разів меншою, ніж для IS. Більш реалістичне припущення $\epsilon_{\rm HS} \approx \epsilon_{\rm LS}$ дає різницю у порядок величини між відповідними ширинами зон IS та HS. Якщо перехід, спричинений полем, включає більш вагомий внесок біекситонів HS, їх низька рухливість робить EK малоймовірним конкурентом з УСС, що обумовлене великою амплітудою HS-HS відштовхування порядку 70 меВ [254].

Отже, представлені результати пропонують картину LaCoO₃ як газу рухомих екситонів IS на фоні основного стану LS через взаємодію тяжіння, що призводить до утворення нерухомих біекситонів, станів HS. Висока рухливість IS екситонів дозволяє хвилеподібним станом IS бути найнижчими збудженнями в системі, незважаючи на ймовірний порядок розташування атомних енергій $\epsilon_{\rm LS} < \epsilon_{\rm HS} < \epsilon_{\rm IS}$. Хвильоподібний характер збудження з низькою енергією може пояснити відсутність диспропорційних спінових станів (та довжин зв'язку Со-О) у діапазоні проміжних температур. Те, що ці збудження не несуть заряду, відповідає ізоляційній поведінці в цьому режимі. Зі зростанням термічно індукованої концентрації збуджень IS утворюються біекситони, стани HS. При переході до металевого стану слід розглядати плавлення екситонів у вільні електрони та дірки, але кількісний аналіз цього сценарію виходить за межі поставлених цілей дослідження. Побудована теорія є першою, що враховує високу мобільність збуджень IS. Зокрема, ДТСП обчислення [254,255] не включають мобільність IS у нормальному стані, оскільки це належного врахування нелокальних (близькосусідніх) двочастинкових кореляцій. Тим не менш, ДТСП може описувати конденсацію екситонів, індуковану полем, коли кореляції стають статичними.

5.2. Низькотемпературні фази в моделі кобальтитів із празеодимом

Мотивація досліджень. Близькість іонних станів Co³⁺ у LaCoO₃ та споріднених сполуках до переходу між спіновими станами породжує низку незвичайних фізичних властивостей, які продовжують привертати увагу вже понад 50 років. Невелика енергетична щілина, що відокремлює спінові збудження від синглетного (низькоспінового (LS)) основного стану іона Co^{3+} , призводить до пирокого кросоверу в LaCoO₃ від немагнітного ізолятора до парамагнітного ізолятора Кюрі-Вейса і, зрештою, до металевого стану із підвищенням температури. Теплова заселеність збуджених атомних мультиплетів Со залишає численні відбитки в спектроскопії, наприклад, у валентній фотоемісії [274], при поглинанні рентгенівських променів [273], або призводить до аномального розширення зв'язків Co-O. Як правило, прийнято, що при підвищенні температурі атомні стани кобальту LS, високого спіну (HS) або проміжного спіну (IS) починають змінювати відносні заселеності. У матеріалах, де перехід у між спіновими станами проходить з повною конвертацією відповідних заселеностей, він зазвичай першого типу і супроводжується різкою зміною об'єму [275]. У деяких випадках повна зміна заселеностей спінових станів супроводжується одночасним переходом метал-ізолятор [276–278].

Матеріали з сімейства $(\Pr_{1-y} \operatorname{Ln}_y)_x \operatorname{Ca}_{1-x} \operatorname{CoO}_3$ (РССО), де Ln – тривалентний іон (Ln=Y, Sm, Gd і т.п.), зазнають переходу від високотемпературного металу Кюрі-Вейса до низькотемпературного ізолятора без ознак формування локальних моментів на атомах Co при $x \ge 0.5$. На відміну від широкого кросовера у LaCoO₃, різкий пік питомої теплоємності явно вказує на колективний характер переходу в РССО [279–281]. Високотемпературна фаза РССО відповідає сильно легованому кобальтиту з формальною валентністю Co 3 + x. Валентний перехід з \Pr^{3+} до \Pr^{4+} , який спостерігається одночасно з іншими змінами фізичних характеристик, ставить низькотемпературну фазу набагато ближче до формальної валентності Co³⁺. У переходах РССО відсутня аномальна зміна довжин зв'язку Co-O [282] і деякі ознаки спінового кросовера у рентгенівському поглинанні [283], що спостерігаються у кристалах LaCoO₃. Найголовніше, що низькотемпературна фаза РССО порушує симетрію по відношенню до обернення часу, як це спостережено в розщепленні дублету Крамерса порушенням симетрії.

У недавніх теоретичних дослідженнях [269] було запропоновано, що РССО зазнає конденсацію спінових екситонів, схожу на екситонний магнетизм [286–289], запропонований для d^4 рутенатів [290]. У матеріалі з синглетним *атомним* основним станом та невеликою енергією збудження найнижчого спінового мультиплету процеси міжатомного обміну породжують *глобальний* основний стан із спонтанно порушеною симетрією – екситонний конденсат (ЕК). У такому бозе-конденсаті низькоенергетичні атомні стани утворюють когерентну суперпозицію, що відрізняє його від нормального стану з фракційними заселеностями атомних станів через теплові збудження. Розрахунки динамічної теорії середнього поля (ДТСП) для спрощеної двоорбітальної моделі та матеріало-орієнтовані розрахунки за допомогою наближення локальної густини з додаванням кулонівської взаємодії U (LDA+U) [269] виявились спроможними описати основи фізики РССО, включаючи перехід метал-ізолятор, зникнення відгуку Кюрі-Вейса іонів Со, зв'язок з валентним переходом Рт та розщеплення дублету основного стану Pr⁴⁺.

Кінцевим доказом сценарію ЕК для РССО можуть слугувати спектри двочастинкових збуджень. У роботі [291] було спостережено екситонну нестабільність і обчислено спектри спінових збуджень в реалістичній п'яти-орбітальній моделі, використовуючи в границі слабкого зв'язку середньопольовий підхід Хартрі-Фока та наближення випадкових фаз. У роботі [292] отримано середньопольову фазову діаграму та спектр збуджень з використанням лінійного спіново-хвильового наближення в границі сильного зв'язку в двоорбітальної моделі Габбарда. Експериментальні дослідження, таким чином, стають дуже бажаними.

Нещодавно експерименти з використанням сильних магнітних полів для

кристалів РССО [293,294] виявили, що низькотемпературна фаза пригнічується магнітним полем. У підрозділі 5.1 та роботі [267] ефект магнітного поля вивчався в рамках двоорбітальній моделі Габбарда в околі фазового переходу до стану ЕК, і було показано, що досить сильне магнітне поле викликає бозе-конденсацію екситонів (у відповідності до експерименту [261] у LaCoO₃). Однак, для РССО проведене експериментальне спостереження, як може здаватися, суперечить сценарію ЕК в якості низькотемпературної фази. Мета цього підрозділу – показати, що це не так.

Модель та обчислювальний метод. Для того, щоб зосередитись на важливій фізиці, а також зменшити обчислювальні зусилля в цьому підрозділі, використовується мінімальна дводіапазонну модель Габбарда на квадратній ґратці. Численні дослідження такої моделі виявили екситонну нестабільність для відповідних параметрів при половинному заповненні зони, n = 2 [266, 292, 295–299]. Легування пригнічує фазу EK [264,288,300] і призводить до переходу в парамагнітний метал при деякій критичній густині заряду. Додаючи електрони або дірки далі, можна врешті-решт досягнути феромагнітної (ФМ) фази. Ця фаза адіабатично пов'язана з режимом подвійного обміну при заповненні n = $1 + \delta$. Помірними змінами параметрів моделі, що досліджена у роботі [264] (збільшення амплітуди взаємодії U та асиметрії зон) екситонні та феромагнітні області можуть бути розширені таким чином, що вони можуть вступити у контакт. Це і буде режим параметрів, який буде детально проаналізовано.

Іони празеодиму відіграють важливу роль у фізиці РССО, забезпечуючи резервуар заряду для активних зон кобальту. Саме тонкий баланс між валентними станами Pr³⁺ і Pr⁴⁺ фіксує хімічний потенціал для *d*-електронної оболонки Co.

Будемо виходити з тієї ж самої моделі, як і у підрозділі 5.1, а сама двоорбітального гамільтоніану Фермі-Габбарда (5.1), де у цілях подальшої зручності інтенсивність магнітного поля позначена B (замість h), а хімічний потенціали орбіталей a та b визначаються як $\mu_a = \mu$ та $\mu_b = \mu - \Delta$, відповідно. Усі інші величини мають той самий зміст та позначення, як і в формулі (5.1).

Для опису використовується ДТСП (див. підрозділ 1.3.5) з розкладанням по гібридизації у домішковому розв'язувачі алгоритмом квантових обчислень Монте-Карло на вісі неперервного часу [104, 263]. Обирається так зване сегментне представлення, модифіковане для включення позадіагональних гібридизацій, важливих для врахування екситонної нестабільності [262, 264].

Фаза екситонного конденсату, що вивчається, характеризується просторово-однорідним параметром порядку $\phi = \sum_{\sigma\sigma'} \tau_{\sigma\sigma'} \langle c_{ia\sigma}^{\dagger} c_{ib\sigma'} \rangle$, де $\tau = (\tau^x, \tau^y, \tau^z)$ – матриці Паулі. З наведеним обмеженням взаємодій по типу густина-густина параметр порядку ϕ обмежений у площині xy, таким чином обчислюємо його поворотні компоненти $\phi^+ = \langle c_{ia\uparrow}^{\dagger} c_{ib\downarrow} \rangle$ і $\phi^- = \langle c_{ia\downarrow}^{\dagger} c_{ib\uparrow} \rangle$. Крім того, аналізується поведінка намагніченості $m = \sum_{\sigma\alpha} \sigma \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle$ та густина електронів $n = \sum_{\sigma\alpha} \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle$. Слід зазначити, що орієнтація магнітного поля вздовж осі z узгоджується з орієнтацією параметра порядку ϕ орієнтується перпендикулярно зовнішньому полю, аналогічно поведінці антиферомагнітної поляризації (тобто формуючи нахилену конфігурацію) в магнітному полі.

Результати для низькотемпературних фаз. Спочатку обговоримо фазову діаграму за відсутності зовнішнього магнітного поля, що показана на рис. 5.6. Крім нормальної парамагнітної (ПМ) фази, спостерігаються дві окремі фази ЕК – полярний (ПЕК) та феромагнітний (ФМЕК) екситонні конденсати [301,302], а також звичайна феромагнітна фаза. Мають місце безперервні фазові переходи на границях ФМ-ФМЕК та ПЕК-ПМ. Перехід ПЕК-ФМЕК є переходом першого роду через ефект поділу заряду (для деталей див. також роботу [264]). Це відображається на колапсі контурів постійної густини в єдину лінію на рис. 5.6. Стрибок густини заряду n і намагніченості m при фазовому переході показано на рис. 5.7(а). Ступінчаста зміна намагніченості спостерігається також на переходах ПМ-ФМ і ПМ-ФМЕК, див. рис. 5.7(б). Лінії постійної густини на рис. 5.6 означають, що при постійному хімічному потенціалі електронна



Рис. 5.6. Фазова діаграма моделі, що включає полярну ЕК (ПЕК), феромагнітну ЕК (ФМЕК), феромагнітну (ФМ) та парамагнітну (ПМ) фази за відсутності магнітного поля. Залежність $n(\mu, T)$ показана за допомогою контурних ліній. Границі фаз нижче 97 К отримані шляхом екстраполяції. Параметри Габбарда (наведені в одиницях eB): $\Delta = 3.2, U = 5, J = 1, t_{aa} = 0.4284, t_{bb} = -0.1466$ і $t_{ab} = 0.02$.



Рис. 5.7. Залежності електронної густини n і намагніченості m від хімічного потенціалу μ при T = 193 K (а) та залежності намагніченості при різних μ від температури T (б). Інші параметри Габбарда обрано такими ж, як на рис. 5.6.

густина зростає з $T \to 0$ на злегка легованій (правій) стороні, тоді як поведінка протилежна на сильно легованій (лівій) стороні діаграми. Це походить від різних фізичних вимог до оптимальних рівнів легування: фаза ПЕК є найбільш стійкою при цілочисловому наповненні (n = 2), тоді як фаза ФМ вимагає великої кількості мобільних носіїв, необхідних для стабілізації механізму подвійного обміну ($n \leq 1.5$). Тому в проміжному (ФМЕК) режимі спостерігаються відповідні зміни температурної поведінки ліній постійної густини.

Обговорюючи аспекти симетрії фазової діаграми на рис. 5.6, доцільно припустити, що модель має повну SU(2) спіново-обертальну симетрію. Порушення безперервної симетрії має помітні наслідки в збудженнях Намбу-Голдстоуна між різними фазами. Відповідно до робіт [292, 303, 304], фаза ПЕК має залишкову симетрію U(1) і виключає два генератори симетрії, комутатор між якими дорівнює нулю. Фаза ФМЕК не має залишкової безперервної симетрії і, таким чином, виключає всі три генератори одним ненульовим комутатором (точніше, матриця комутаторів має ранг 2). Фаза ФМ має залишкову симетрію U(1) і виключає два генератори з ненульовим значенням математичного очікування їх комутатора. Тому існують два режими збуджень Намбу-Голдстоуна з лінійною дисперсією у фазі ПЕК, одне збудження з лінійною та одне з квадратичною у фазі ФМ та одне з квадратичною дисперсією у фазі ФМ [304].

Далі обговоримо вплив магнітного поля *B*. Розрахунки проводилися для кількох хімічних потенціалів μ , близьких до границі фази ПЕК. При низьких температурах спостерігається фазовий перехід першого роду від фази ПЕК' до фази ФМЕК' (що не відрізняються симетрією при $B \neq 0$) зі збільшенням поля *B* з подальшим безперервним переходом до нормального стану, див. рис. 5.8. Цей перехід відбувається зі зміною симетрії при будь-яких *B*. Перехід першого роду супроводжується стрибкоподібним збільшенням *m* і зменшенням електронної густини *n*, а також вузьким гістерезисом, див. рис. 5.9. Перехід від ФМЕК' до нормальної фази викликає лише помірну зміну в залежностях *m*(*B*) і *n*(*B*). При більш високих температурах перехід ПЕК'-ФМЕК' перетворюється



Рис. 5.8. *BT* фазові діаграми для трьох значень хімічного потенціалу: $\mu = 2.42$ eB (a), $\mu = 2.44$ eB (б) і $\mu = 2.48$ eB (в). Інші параметри Габбарда обрано такими ж, як на рис. 5.6.



Рис. 5.9. Залежності намагніченості m, електронної густини n та ЕК параметрів порядку ϕ^{\pm} при сталій температурі (T = 145 K) та різних значеннях хімічного потенціалу ($\mu = 2.42, 2.44, 2.46$ eB). Інші параметри Габбарда обрано такими ж, як на рис. 5.6.



Рис. 5.10. Залежності намагніченості m при різних температурах для двох обраних значень хімічного потенціалу: $\mu = 2.42 \text{ eB}$ (a) та $\mu = 2.44 \text{ eB}$ (б). Інші параметри Габбарда обрано такими ж, як на рис. 5.6.

на кросовер, як показано на рис. 5.10. Аналогічно до експерименту [294], спостерігається зменшення критичного поля з температурою на $dB_c/dT < 0$.

Нарешті, коротко прокоментуємо форму кривих намагніченості. Увігнута залежність m(B) при слабому магнітному полі особливо ясна, коли критичне значення B_c є малим, на відміну від поведінки ізольованого атома з основним станом LS та термічно заселеними станами HS, що призводить до опуклої залежності m(B) (вона стає майже лінійною при температурах, порівнянних з енергією збуджень HS). Хоча можливі й інші пояснення, наприклад, поверхневий чи домішковий магнетизм, слід вказати, що подібні нелінійності також можна помітити в експериментальних даних [294].

Спрощена модель обов'язково має обмеження в описі реальних кристалів РССО. Зокрема, розміри фази або наявність ФМЕК перебільшена. Використання більш реалістичної (і обчислювально більш вимогливої) форми гамільтоніана, включаючи внески доданків спін-фліпу та парної зміни орбіталі (див. підрозділ 4.4), може зменшити розміри фази ФМЕК, можливо, встановивши перехід першого порядку безпосередньо між фазами ПЕК і ФМ. Відгук з боку ґратки, що присутній в реальному матеріалі, ймовірно, має посилити гістерезисну поведінку. Однак, наступні два спостереження мають загальний характер. По-перше, зовнішнє магнітне поле пригнічує фазу ЕК з такими наслідками, як початок металевої провідності. По-друге, пригнічення ЕК в системі з фіксованим хімічним потенціалом призводить до суттєвої зміни електронної густини. Тому є прогнозованим, що індукований полем перехід у РССО супроводжується валентним переходом з \Pr^{4+} до \Pr^{3+} конфігурації. Хоча аналогічна поведінка спостерігається і при температурному переході, це передбачення є нетривіальним. Це тому, що магнітне поле, що діє на іони празеодиму при фіксованому полі ліганду, призводить до протилежного ефекту, тобто воно надає перевагу спіновому стану \Pr^{4+} , а не \Pr^{3+} з синглетним основним станом.

5.3. Екситонний магнетизм у $LaSrCoO_4$

досліджень. Перовскітні кобальтити Мотивація З сімейства La_{1-x}Sr_xCoO₃ привертають велику увагу завдяки своїм особливим магнітним і транспортним властивостям. Зокрема, фізика представника x 0 з формальною валентністю Co³⁺ залишається предметом дискусій. У підрозділі 5.1 запропоновано, що рухливість проміжноспінових (IS) збуджень відіграє важливу роль у фізиці LaCoO₃ і що матеріал є близьким до нестабільності екситонної конденсації (ЕК) [286, 287, 305]. Сценарій ЕК також обговорюється як джерело експериментально спостережуваного фазового переходу [280] в матеріалах сімейства $\Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO_3$, див підрозділ 5.2 та роботи [267, 269, 291, 292]. Шаруваті кобальтити La_{2-x}Sr_xCoO₄ значно менше вивчені, хоча вони можуть виявляти подібну фізику. Батьківська сполука $\rm La_2CoO_4$ з формальною валентністю $\rm Co^{2+}$ є антиферомагнітним ізолятором з температурою Нееля 275 К [306]. Легування дірками пригнічує температуру Нееля, і при x > 1/3 з'являється незбалансовані магнітні впорядкування.

248

Діапазон легування 1/3 < x < 1/2 особливо цікавий завдяки спектру магнітних збуджень у формі пісочного годинника [307], що викликає схожість з надпровідниками на основі міді. У той же час, сполука LaSrCoO₄ з формальною валентністю Co³⁺ порівняно менш вивчена через труднощі в підготовці зразків.

Оптичні [308] і транспортні вимірювання [309, 310] для LaSrCoO₄ показують, що сполука є хорошим ізолятором із зарядовою щілиною близько 1 eB. Зворотня магнітна сприйнятливість має увігнуту форму з квазілінійною температурною залежністю нижче 150 K, що відповідає $\mu_{eff} = 2.3 - 2.6 \,\mu_B$ і досить низьку температуру Вейса від 27 K [310, 311] до 30 K [309]. Автори роботи [311] повідомили про магнітну аномалію при 7 K, яку вони інтерпретували як утворення спінового скла. Конкретні дані про питому теплоємність вказують лише на незначну зміну ентропії в розмірі 0.06*R* при передбачуваному переході. Теоретичні дослідження LaSrCoO₄ ще більш обмежені. У роботі [312] було застосовано необмежений підхід Хартрі-Фока до моделі сильного зв'язку із взаємодією Габбарда з метою вивчення різних моделей спінового стану та визначено, що впорядкування спінових станів по типу високий-низький спін (HS-LS) є найбільш вірогідним основним станом системи.

У цьому підрозділі на основі параметрів сильного зв'язування, отриманих за допомоги аналізу теорії функціоналу електронної густини (DFT) для LaSrCoO₄ [20], використовується розкладання в границі сильного зв'язку для отримання низькоенергетичної ефективної моделі в просторі Гільберта, що охоплює стани LS, IS і HS. Проводиться її детальне порівняння з аналогічною моделлю LaCoO₃. Аналогічно наведеним результатам для LaCoO₃, знаходяться ознаки стабільного ЕК основного стану для реалістичних параметрів локальної взаємодії. Порівняння з LaCoO₃ показує, що для тих же параметрів взаємодії відповідна екситонна щілина є меншою або зникає у LaSrCoO₄, що означає, що LaSrCoO₄ знаходиться ближче до екситонної нестабільності або екситонний конденсат фактично реалізується в системі навіть за відсутності зовнішніх полів. Особливості розкладання в границі сильного звязку. Відправною точкою поточного аналізу в границі сильного зв'язку є гамільтоніан Габбарда для електронної *d* оболонки атому кобальту

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i} \hat{\mathcal{H}}_{at}^{(i)} + \sum_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{H}}_{t}^{(\mathbf{r})}, \qquad (5.5)$$

де

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{at}}^{(i)} = \sum_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^{ii} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{i\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{i\beta}^{\dagger} \hat{c}_{i\gamma} \hat{c}_{i\delta}, \qquad (5.6)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{t}^{(\mathbf{r})} \equiv \hat{\mathcal{H}}_{t}^{(ij)} = \sum_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^{ij} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j\beta}, \ i \neq j,$$
(5.7)

i та j – індекси вузлів ґратки (тут враховуються тільки локальні i = jта близькосусідні внески), які відповідають певному індексу зв'язку **r** для $i \neq j$, а $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ – індекси внутрішнього стану (поєднані орбітальні та спінові індекси). Локальні матриці та матриці тунелювання до найближчих сусідів $h_{\alpha\beta}^{ij}$ обраховуються проекцією зонної структури в наближенні локальної густини на орбіталі Ваньє. Для цього використовуються числові теоретичні підходи wien2wannier [271] і wannier90 [272]. Для внутрішньоатомної електрон-електронної взаємодії $U_{\alpha\beta\gamma\delta}$ використовується параметризація Слейтера в термінах двох параметрів, амплітуди взаємодії \tilde{U} і зв'язку Гунда \tilde{J} , фіксуючи співвідношення інтегралів Слейтера $F_4/F_2 = 0.625$.

При діагоналізації локального гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_{at}^{(i)}$ отримуються атомні власні енергії $E_{\gamma}^{(q)}$ та власні стани $|\Psi_{\gamma}^{(q)}\rangle$, де q – кількість електронів на dоболонці, а γ – індекс стану. Далі використовується набір з найнижчих 25 станів конфігурації d^6 , що містять LS, IS і HS як активний простір, а нелокальні доданки $\hat{\mathcal{H}}_t^{(\mathbf{r})}$ розглядаються як збурення. Виконуючи перетворення Шріффера-Вольфа (див. підрозділ 1.3.3) до другого порядку, приходимо до наступного бозонного гамільтоніану:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \sum_{ij,\,\alpha\beta} \left(\varepsilon_{1\alpha\beta}^{ij} \hat{d}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{j\beta} \hat{s}_i \hat{s}_j^{\dagger} + \varepsilon_{2\alpha\beta}^{ij} \hat{d}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{j\beta}^{\dagger} \hat{s}_i \hat{s}_j \right) + \text{H.c.} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}.$$
(5.8)

Тут стан LS розглядається як бозонний вакуум, $|\emptyset\rangle_i = \hat{s}_i^{\dagger} |0\rangle$, а інші стани з низькоенергетичного набору конфігурації d^6 – як різні бозонні компоненти α , що характеризуються відповідними операторами народження (знищення) $\hat{d}_{i\alpha}^{\dagger}$ $(\hat{d}_{i\alpha})$ на вузлі ґратки *i*.

У формулі (5.8) відокремлено три типі доданків. Перший з амплітудою ε_1 відповідає *перенормованій* енергії бозонів на вузлі (для i = j),

$$\varepsilon_{1\alpha\beta}^{ii} = E_{\alpha}^{(6)}\delta_{\alpha\beta} + \sum_{\mathbf{r},vw,\nu=\pm 1} \mathcal{M}_{\alpha\beta,wv,\alpha\beta}^{(\mathbf{r})(6+\nu)} / \mathcal{E}_{\alpha\beta,wv}^{(6+\nu)}, \qquad (5.9)$$

та їх амплітуди тунелювання на фоні LS (для $i \neq j$),

$$\varepsilon_{1\alpha\beta}^{ij} = \frac{1}{2} \sum_{vw,\nu=\pm 1} \left(\frac{1}{\mathcal{E}_{\emptyset\beta,wv}^{(6+\nu)}} + \frac{1}{\mathcal{E}_{\alpha\emptyset,wv}^{(6+\nu)}} \right) \mathcal{M}_{\emptyset\beta,wv,\alpha\emptyset}^{(ij)(6+\nu)}.$$
(5.10)

Другий член з амплітудою ε_2 відповідає нелокальним процесам утворення пари бозонів,

$$\varepsilon_{2\alpha\beta}^{ij} = \frac{1}{2} \sum_{vw,\nu=\pm 1} \left(\frac{1}{\mathcal{E}_{\emptyset\emptyset,wv}^{(6+\nu)}} + \frac{1}{\mathcal{E}_{\alpha\beta,wv}^{(6+\nu)}} \right) \mathcal{M}_{\emptyset\emptyset,wv,\alpha\beta}^{(ij)(6+\nu)}, \tag{5.11}$$

де

$$\mathcal{M}_{\gamma\delta,wv,\gamma'\delta'}^{(\mathbf{r})(6\pm1)} = \langle \Psi_{\gamma'}^{(6)} \Psi_{\delta'}^{(6)} | \, \hat{\mathcal{H}}_{t}^{(\mathbf{r})} | \Psi_{v}^{(6\pm1)} \Psi_{w}^{(6\mp1)} \rangle \, \langle \Psi_{v}^{(6\pm1)} \Psi_{w}^{(6\mp1)} | \, \hat{\mathcal{H}}_{t}^{(\mathbf{r})} | \Psi_{\gamma}^{(6)} \Psi_{\delta}^{(6)} \rangle \,, \quad (5.12)$$

і $\mathcal{E}_{\gamma\delta,wv}^{(6\pm1)} = E_{\gamma}^{(6)} + E_{\delta}^{(6)} - E_{v}^{(6\pm1)} - E_{w}^{(6\mp1)}$. Останній доданок $\hat{\mathcal{H}}_{int}$ у рівнянні (5.8) характеризує всі інші процеси з ненульовими амплітудами, які з'являються внаслідок перетворення Шріффера-Вольфа. Зауважимо, що основний внесок у цей доданок походить від взаємодії (по типу густина-густина та магнітно-орбітального обміну) між різними бозонними компонентами. Включення ефекту $\hat{\mathcal{H}}_{int}$ на дисперсію екситонів є нетривіальним завданням і виходить за межі поточної роботи.

Тут ми зосередимо увагу на екситонній нестабільності нормального основного стану, який має переважно характер LS. Невелика амплітуда ϵ_2 дозволяє знехтувати густиною *d*-бозонів у основному стані, а також у найнижчих збуджених станах. Тому елементарні збудження добре описуються білінійною частиною гамільтоніану (5.8), що відповідає нехтуванню доданками вищого порядку (з трьома і чотирма операторами \hat{d}_{α}), які входять до $\hat{\mathcal{H}}_{int}$. Використовуючи той самий аргумент, можна опустити обмеження жорсткого ядра (*engl. – hard-core constraint*) на *d* бозони і використати лінеаризований спіновохвильовий підхід, див. підрозділ 1.3.2 та роботу [313], який забезпечує доступ до імпульсних залежностей збуджень бозонів (IS і HS) в ґратці. Спектр збуджень, отриманий таким чином, відповідає однобозонним збудженням нормального основного стану, таким чином, не може враховувати наслідки, що виникають від теплової заселеності станів IS і HS.

Результати для низькотемпературних фаз. Розрахунки електронної структури для La_{2-x}Sr_xCoO₄ виконано в рамках теорії функціоналу електронної густини за допомоги наближення локальної густини, для деталей див. роботу [20]. Структура La_{2-x}Sr_xCoO₄ складається з окремих шарів октаедрів CoO₆ зі суспільними кутами, розділених випадковим розподілом іонів La та Sr (див. рис. 5.11(а)). Для імітації сполуки LaSrCoO₄ було використано наближення віртуального кристала, яке встановлює атомне число La на 56.5, для деталей див. [20]. Одиничні вектори комірок, що показані на рис. 5.11(а), відповідають структурним параметрам a = 6.8019 Å, b = 6.8019 Å, c = 5.3796 Å, $\alpha = \pi/2$, $\beta = \pi/2$ і $\gamma = 2.3284$. Зона Бріллюена відбирається з однорідною сіткою $4 \times 4 \times 4$ у просторі квазіімпульса k. Маффін-тін радіуси (у борах) такі: 2.50 для La,



Рис. 5.11. (а) Елементарна комірка La₂CoO₄. (б) Спінові конфігурації найнижчих атомних мультиплетів La₂CoO₄ і (в) зміни їх енергій з \tilde{J} при $\zeta = 56$ меВ.

1.91 для Со, і 1.65 для О. Для відсікання плоскої хвилі встановлено параметр $R_{mt}K_{max} = 6.$

На рис. 5.11(б) показано набір власних енергій $E_{\gamma}^{(6)}$ гамільтоніану (5.6), що відповідають найнижчим атомним мультиплетам LaSrCoO₄ як функціям зв'язку Гунда \tilde{J} . Три стани $d_{xy} \otimes d_{x^2-y^2}$ (IS₂) мають найвищі атомні енергії серед 25 найнижчих станів в області реалістичних значень зв'язку Гунда \tilde{J} за рахунок кубічного кристалічного поля ($\Delta = 1.594 \,\mathrm{eB}$) та додаткових тетрагональних розщеплень станів t_{2g} та e_g (0.103 eB та 0.384 eB, відповідно). Це, здається, запобігає конденсації станів IS₂. Однак, як показується далі, перенормування локальної енергії завдяки процесам віртуального тунелювання обертає порядок атомних мультиплетів, тобто при розміщенні на ґратці збудження IS₂ мають менші енергії, ніж IS₁.

Далі обчислюються амплітуди (5.9)–(5.11) і діагоналізується білінейна частина ефективного гамільтоніану (5.8) згідно з методологією, наведеною у підрозділі 1.3.2. На рис. 5.12(а)–(ґ) показано дисперсії елементарних (IS- та


Рис. 5.12. (а)–(ґ) Дісперсійні характеристики збуджень IS і HS при різних \widetilde{U} та \widetilde{J} ($\zeta = 56$ меВ). (д) Відповідна фазова діаграма, обрахована з умови зникнення екситонної щілини.

HS-подібних) збуджень моделі (5.8), отриманих для різних значень \tilde{U} і \tilde{J} . Хоча збудження IS можуть рухатися на фоні LS, збудження HS не може, а відхилення зон HS від повністю плоского виду обумовлено змішуванням HS-IS через спін-орбітний зв'язок. Зауважимо, що спін-орбітальний характер збудження залишається приблизно фіксованим уздовж окремих гілок завдяки збереженню орбітальних та спінових компонентів у процесах кінетичного обміну з найближчим сусідом. Невелика змішаність і, отже, імпульсна залежність виникає внаслідок спін-орбітального зв'язку.

Параметри взаємодії були обрані таким чином, щоб розв'язок знаходився на межі екситонної нестабільності, тобто нормальні рішення з крихітною щілиною, зникання якої визначає фазову границю на рис. 5.12(д). Варіація \tilde{J} входить переважно через зміни енергій атомних мультиплетів на рис. 5.11(в). Варіація \tilde{U} впливає як на амплітуди тунелювання (ширину зони), так і на перенормування локальних енергій (зсув зон). Перенормування різних станів по-різному масштабуються з \tilde{U} залежно від кількості та амплітуд процесу віртуального тунелювання для даного стану на фоні LS.



Рис. 5.13. Дісперсійні характеристики збуджень IS і HS для LaSrCoO₄ (ліворуч) і LaCoO₃ з ідеальною кубічною структурою (праворуч) при $\tilde{U} = 1.96$ eB, $\tilde{J} = 0.62$ eB і $\zeta = 56$ мeB. Вставка: дисперсія екситонних збуджень IS₂ з внеском процесів подвійного народження (суцільні лінії) та без них (пунктирні лінії).

Вплив доданку створення пари показано на вставці рис. 5.13. Завдяки бозонному характеру збуджень цей доданок ефективно діє як «тяжіння» між зонами $\epsilon_{\gamma}(\mathbf{k})$ та їх дзеркальними зображеннями $-\epsilon_{\gamma}(\mathbf{k})$. Тільки коли їх розділення стає порівняним або меншим, ніж характерні амплітуди, визначені рівнянням (5.11), процеси створення або знищення пар набувають важливого значення. Ці амплітуди для досліджуваних випадків, як правило, мають порядок декілька меВ, тому ефект стає помітним близьким до мінімуму дисперсії енергії IS₂.

Для порівняння з LaCoO₃ повторимо аналіз для гіпотетичної кубічної структури, що розглянута в роботі [314], і тих же значень \tilde{U} і \tilde{J} , див. рис. 5.13. Виявляємо, що щілина для збуджень більша в кубічній структурі за рахунок більш вузької зони IS. Більше того, збудження HS в шаруватій структурі розташовані при значно вищих енергіях, ніж у його кубічному аналозі. Це тому, що позаплощинні процеси тунелювання до найближчого сусіда, які сприяють перенормуванню локальних енергій HS в кубічній структурі, відсутні в шаруватої системі. Подібні процеси відіграють незначну роль для збудження IS₂, тому перенормування в кубічних та шаруватих структурах можна порівняти. Більш екстенсивний чисельний аналіз підтверджує загальну тенденцію, що при постійному зменшенні параметрів \tilde{U} і \tilde{J} екситонна конденсація спочатку виникає в шаруватій сполуці, а вже потім у LaCoO₃.

5.4. Впорядкування багатоелектронних спінових станів у Sr₂CoO₃F, зумовлене зовнішнім тиском

Теоретично вивчено низькотемпературні фази нещодавно синтезованої сполуки Sr₂CoO₃F під тиском. Аналіз, що поєднує наближення локальної густини з динамічною теорією середнього поля та ефективну модель, виведену в граничному випадку сильного зв'язку, вказує на існування не тільки нормальних парамагнітних та антиферомагнітних режимів, але і фази впорядкування спінових станів електронів у певному діапазоні прикладеного тиску та низької температури. Це впорядкування характеризується змінним розташуванням різних спінових станів атомів кобальту в ґратці по типу шахової дошки.

Загальні властивості сполуки. Тривалентні оксиди кобальту з перовскітною структурою мають низку незвичайних фізичних властивостей, що виникають внаслідок наявності декількох низькоенергетичних мультиплетів в атомному спектрі октаедрично-координованих іонів Со³⁺ [315]. Основна сполука LaCoO₃ привертає увагу з 1950-х років завдяки термічно-індукованому кросоверу ізолятор-метал [316]. Легування дірками, як у $La_{1-x}Sr_xCoO_3$, призводить до утворення кластерів з великими магнітними моментами і, зрештою, до переходу до феромагнітного металу зі збільшенням концентрації дірок [317,318]. Феромагнетизм спостерігається також у розтягнутих плівках LaCoO₃ [319, 320], хоча ізолюючий характер таких систем вказує на те, що там діють інші фізичні механізми. У шаруватому перовскіті LaSrCoO₄ при низьких температурах з'являються властивості притаманні спіновому склу [311]. Сполуки типу $(\Pr_{1-y}Y_y)_x \operatorname{Ca}_{1-x}\operatorname{CoO}_3$ демонструють "прихований" порядок, що порушує симетрію по відношенню до обернення часу, але не проявляє впорядкованих моментів при температурах, що досягають 130 К [280, 284]. Розуміння зв'язку між іонами Со має важливе значення для відповідного опису цих різноманітних

явищ. Нещодавні експерименти з резонансним непружним рентгенівським розсіюванням на LaCoO₃ [21] показали, що у фізиці кобальтитів важливою є не тільки магнітна взаємодія спінових моментів, але й мобільність екситонів зі спіновими ступенями вільності. Дослідження на спрощених моделях [262, 292, 298], а також сполуко-орієнтовані розрахунки середнього поля на кобальтитах [291, 314, 321] виявили ряд можливих упорядкованих фаз поблизу спінового кросовера включаючи антиферомагнетик (AΦM), упорядковання спінових станів (УСС), що характеризується статичним розташуванням атомів у різних спінових станах по типу шахової дошки, або екситонний конденсат. Зокрема, останній породжує своєрідний магнетизм, що було предметом інтенсивних досліджень останнім часом [289, 290, 322].

Зовнішній тиск дозволяє експериментально контролювати розщеплення кристалічного поля та відносну енергію мультиплетів на комірці йону Со. Врешті-решт, тиск може переводити атомний стан з високим спіном (HS) у низькоспіновий (LS). Тривалентні сполуки типу RCoO₃ (R=La, Pr, Y) вже під атмосферним тиском мають низькоспіновий стан Co³⁺, таким чином, кросовер до впорядкування спінових станів не може бути індукований збільшенням тиску. На відміну від цього, нещодавно синтезована сполука Sr₂CoO₃F [323], містить іони Co³⁺ з високим спіном, які впорядковані антиферомагнітним чином нижче $T_N = 323$ K при атмосферному тиску [324]. На відміну від свого шаруватого аналога LaSrCoO₄ [311], Sr₂CoO₃F не містить істотних структурних дефектів. При збільшенні тиску конфігурація основного стану змінюється з високого спіну на низький. При кімнатній температурі повне перетворення до низькоспінового стану закінчується приблизно при 12 ГПа [325].

Таким чином, нижче вивчається керований тиском кросовер у Sr₂CoO₃F та досліджуються можливі впорядковані фази. Для цього використовується комбінація першопринципних (*ab initio*) та числових підходів середнього поля. Результати відтворюють експериментальні спостереження високоспінової антиферомагнітної фази при низькому тиску та низькоспінового стану при високому тиску. Крім того, при проміжному тиску прогнозується поява фази впорядкування спінових станів. Також порівнюється електронна структура Sr₂CoO₃F з ізоелектронним LaCoO₃ та його шаруватим аналогом LaSrCoO₄ [20,311].

Аналіз базується на багатозонній моделі Габбарда, що враховує вплив електронних кореляцій в досліджуваному матеріалі. Розрахунки проводяться в кілька етапів. Використовуючи теорію функціоналу електронної густини (DFT), обчислюються параметри для білінійної частини гамільтоніана Габбарда за допомоги проекції ґраткового гамільтоніану на Co-3*d* ваньєрівські орбіталі. Для включення електронних кореляцій додається локальна кулонівська взаємодія, параметризована слетерівськими інтегралами F_0 , F_2 та F_4 . Для одного і того ж набору вхідних параметрів застосовуються два теоретичні підходи: розкладання сильного зв'язку з подальшим аналізом ефективної моделі за допомоги середньополевого наближення (див. підрозділ 1.3.4) та динамічна теорія середнього поля (ДТСП, див. підрозділ 1.3.5).

Наближення локальної густини та параметри білінійної частини гамільтоніану Габбарда. Обчислення електронної структури проводяться в рамках теорії функціоналу електронної густини з наближенням локальної густини (LDA) [326, 327] до потенціалу обмінної взаємодії електронів. Просторова конфігурація сполуки Sr₂CoO₃F складається з шарів зсунутих CoO₃F октаедрів розділених атомами Sr, див. рис. 5.14(а). Сталі ґратки взяті з дослідження [323]: a = 3.83145 Å і c = 13.3201 Å при атмосферному тиску. Згідно з роботою [325], просторова група I4/mmm зберігається незмінною протягом усього досліджуваного діапазону тиску. Розрахунки проведено за допомогою програми wien2k [270]. Мафін-тін радіуси становлять 2.22 для Sr, 1.90 для Co, 1.63 для O і 2.18 для F в атомних одиницях. Для зони Бріллюена обрано сітку 10 × 10 × 10 у просторі квазіімпульсу **k**.

Параметри білінійної частини гамільтоніану Габбарда для 3d зони атомів кобальту отримані шляхом проектування ґраткового гамільтоніану на базис



Рис. 5.14. (а) Кристалічна структура Sr_2CoO_3F . (б) Зонна структура, обчислена теорією функціоналу електронної густини, що зображена разом з ваньєрівськими функціями на Co-3d оболонці (жовтий колір) та питомими густинами станів (DOS) при P = 6.4 ГПа.

орбіталей Ваньє [271, 272]. Таким чином, систему можна описати п'ятиорбітальною моделлю Габбарда (5.5) з відповідним розділенням на локальні (5.6) і нелокальні (5.7) частини. Амплітуду спін-орбітальної взаємодії $\zeta = 56$ меВ для 3*d*-орбіталей іонів кобальту, що використовується нижче, обчислено для сполуки LaSrCoO₄ в роботі [20]. Розщеплення енергетичних рівнів кристалічним полем збільшується з тиском *P*, як наведено на рис. 5.15(а). При визначенні матричних елементів локальної взаємодії $U_{\kappa\lambda\mu\nu}(F_0, F_2, F_4)$, фіксуються $F_0 =$ 3.0 eB [258] та $F_4/F_2 = 0.625$ [89, 328], а гундівський зв'язок $J = (F_2 + F_4)/14$ вважається змінним параметром теоретичного опису.

Підхід сильного зв'язку та наближення середнього поля. Набір \mathcal{L} атомних станів системи з найнижчою енергією може бути виділено при діагоналізації локального гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}_{at}^{(i)}$. Відповідні мультиплети зображені на рис. 5.15(б). Важливою особливістю параметризації Слейтера-Кондона локальної кулонівської взаємодії є те, що стани IS₁ і HS₁ мають менші енергії, ніж IS₂ і HS₂, відповідно. Це контрастує з більш простою (густина-густина або Слейтер-Канаморі) параметризацією взаємодії, або з границею невзаємодіючих електронів, де IS₂ і HS₂ стають нижчими завдяки тетрагональному розщеплен-



Рис. 5.15. (а) Діагональні елементи $h_{\kappa\kappa}^{ii}$ локальної частини гамільтоніану як функції тиску для Sr₂CoO₃F. Ті ж величини для інших двох споріднених сполук наведені для порівняння. (б) Спінові конфігурації найнижчих атомних мультиплетів Sr₂CoO₃F за відсутності спін-орбітальної взаємодії.

ню кристалічного поля.

Далі застосовуємо перетворення Шріффера-Вольфа (див. підрозділ 1.3.3) з точністю до другого порядку за збудженням $\hat{\mathcal{H}}_t^{(ij)}$ і зберігаємо члени, що відповідають лише процесам між найближчими комірками, див. також роботу [20]. Для кожного значення тиску *P* вищевказана процедура призводить до ефективного гамільтоніана, який охоплює кінцевий набір найнижчих атомних станів, див., наприклад, рис. 5.15(б). Використовуючи представлення бозонів Швінгера, ефективний гамільтоніан може бути записаний у вигляді

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\mathbf{e}=\pm\mathbf{a},\pm\mathbf{b}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\in\mathcal{L}} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(\mathbf{e})} \left(\hat{d}_{\mathbf{i}\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{\mathbf{i}\beta} \right) \left(\hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{e}\gamma}^{\dagger} \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{e}\delta} \right), \qquad (5.13)$$

де $\hat{d}_{{\bf i}\alpha}^{\dagger}$
 $(\hat{d}_{{\bf i}\alpha})$ – оператор народження (знищення) бозону, який відповідає атомно-

му стану α на вузлі **і**. Умова неможливості існування більше ніж одного бозону на одному вузлі $\sum_{\alpha} \hat{d}^{\dagger}_{i\alpha} \hat{d}_{i\alpha} = \hat{1}$ має задовольнятися для усіх фізичних станів системи.

Через складність моделі (5.13) для точного розв'язку застосовується підхід середнього поля в локальному базисі. Обчислення обмежено двома підґратками, що дозволяє враховувати як спіново-впорядкованого, так і антиферомагнітно-впорядкованого стану. Доступ до локальних величин типу $\langle \hat{d}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{i\beta} \rangle$ дає доступ до вивчення станів, що мають суперпозицію декількох мультиплетів, наприклад, екситонних конденсатів [266].

Спектр збуджень для моделі (5.13) може бути отриманий узагальненим підходом спінових хвиль [20, 313] з використанням перетворень Боголюбова. Маючи намір проаналізувати можливість екситонної нестабільності, цей метод застосовується у низькоспіновій фазі. Слід зазначити, що у такому підході α = LS є вакуумним станом. Члени у рівнянні (5.13), які містять три або чотири оператори з $\alpha \neq$ LS, що описують взаємодію між збудженнями, опущені. Тому аналіз спінових хвиль обмежується низькотемпературною областю, де тепловою популяцією збуджених станів можна знехтувати.

Обчислення динамічної теорії середнього поля проводяться за допомогою програмного пакету [236] квантового розв'язувача Монте-Карло для моделі домішок Андерсона з повною кулонівською параметризацією взаємодії $U_{\kappa\lambda\mu\nu}$. Для підвищення ефективності обчислень використовується алгоритм вибірки суперстанів [329]. При цьому, для простоти нехтуються малі недіагональні елементи матриці гібридизації, що виникають через деформації хвильових функцій атома Со. Після досягнення сходимості динамічної теорії середнього поля обчислюються спектральні функції вздовж осі реальної частоти за допомоги аналітичного продовження з використанням методу максимальної ентропії [236,330]. Для вивчення спіново-впорядкованих та антиферомагнітних фаз використовується елементарна комірка, що містить два атоми кобальту. Розрахунки проводяться при T = 290 К.

Основні результати. При високому тиску (границя великого розщеплення кристалічного поля) глобальний основний стан Sr₂CoO₃F відповідає конфігурації зі всіма атомами у низькоспіновому стані. Домінуючий ефект тиску полягає у зміні розщеплення кристалічного поля, див. також Рис. 5.15(а). Із зменшенням тиску різниця енергій між низькоспіновими та іншими станами [високого та проміжного спіну (IS)] зменшується. Коли енергія атомних збуджень наближається до енергії низькоспінових станів, глобальний основний стан змінюється. Це – так званий режим спінового кросоверу, де взаємодія між збудженнями та їх рухливістю набуває важливого значення.

Збудження з високими спінами відштовхуються, коли займають близькосусідні комірки ґратки. Причиною цього є обмінний механізм. Високоспіновий стан, оточений атомами з низьким спіном, може знизити енергію за допомогою ряду віртуальних процесів стрибків. На відміну від цього, коли два високоспінові атоми в однакових орбітальних і спінових станах займають близькосусідні комірки, віртуальні стрибки блокується за принципом Паулі. Таким чином, взаємодія є відштовхуючою (у Sr₂CoO₃F вона обчислюється приблизно в розмірі 0.2 eB на з'єднання). Для високоспінових станів з різними спіновими проекціями або формою орбіталей блокування Паулі не є повним і, таким чином, близько-сусідні відштовхування є слабкішим. Слід зауважити, що навіть в антиферомагнітній разом із антифероорбітальною (АФО) конфігурації два високоспінові стани, як і раніше, відштовхуються на близько-сусідніх з'єднаннях (типові значення – близько 30 меВ на з'єднання). Матричні елементи, що відповідають взаємодії проміжноспінових станів, мають більш різноманітну структуру, починаючи від слабкого відштовхування та закінчуючи слабким тяжінням, залежно від проекції спіну, типу орбіталі та орієнтації з'єднання.

Зі зменшенням тиску скорочується енергетична щілина між низькоспіновим та збудженими станами. Якщо найнижчі збудження локалізовані, але сильно взаємодіють на близько-сусідніх зв'язках, очікується розташування цих та низькоспінових станів по типу шахової дошки [257, 258]. Однак, як тільки



Рис. 5.16. (а) d_{z^2} функції Ваньє електронної оболонки Со, обчислені в рамках dмоделі з відповідними вагами («ваньерівськими хвостами») на сусідніх атомах, що намальовані як ізоповерхні, де червоний (синій) колір відповідає позитивній (негативній) амплітуді. (б) Енергії збуджень, отримані в границі сильного зв'язку зі спіново-хвильовим аналізом при P = 12.2 ГПа, J = 0.62 eB та $\zeta = 56$ мeB.

деякі низькоенергетичні збудження мають рухомість, нестабільність системи у напрямку екситонної конденсації стає важливою [18,20,266].

Теоретичний аналіз розпочинається у низькоспіновій фазі при високому тиску. Щоб вивчити сценарій екситонної конденсації у сполуці Sr_2CoO_3F , використовується спіново-хвильовий підхід (див. підрозділ 1.3.2). Він виявляє плоскі зони для найнижчих збуджень, див. рис. 5.16(б). Тільки збудження IS_4 мають суттєву дисперсію. Плоска дисперсія збуджень IS_1 та IS_2 походить від невеликої амплітуди тунелювання між найближчими сусідами для d_{z^2} – d_{z^2} електронних станів. Для порівняння, амплітуда тунелювання для d_{z^2} – d_{z^2} дорівнює 147 меВ [21] і 133 меВ [20] в LaCoO₃ і LaSrCoO₄, відповідно, тоді як у Sr₂CoO₃F вона в середньому становить 14 меВ у досліджуваному діапазоні прикладеного тиску, тобто на порядок менший. Це можна зрозуміти, враховуючи форму ваньєрівських орбіталей d_{z^2} , показаних на рис. 5.16(а). Асиметрична гібридизація з атомами O і F на верхівках спричиняє нахили



Рис. 5.17. Фазові діаграми у відсутності спін-орбітальної взаємодії (ліворуч) та з $\zeta = 56$ меВ (праворуч) при різних температурах. Горизонтальні лінії відповідають верхнім та нижнім границям для параметра J, щоб відповідати експериментальним спостереженням. У (в), області з P = 6.4 ГПа та P =15 ГПа позначені додатково – у позначених інтервалах нижче проводяться кількісні порівняння з динамічною теорією середнього поля.

хвостів Ваньє на комірках О, що знаходяться в площинні. Як результат, хвости сусідніх орбіталей Ваньє d_{z^2} є майже ортогональні. Навпаки, $d_{x^2-y^2} \otimes d_{xy}$ IS₄ екситони мають дисперсію, що утворює широку зону, схожу на LaCoO₃ [21]. Тим не менш, велика енергія кристалічного поля для стану $d_{x^2-y^2}$ породжує щілину 0.7 eB, що виключає будь-яку екситонну нестабільність.

Для обчислення фазових діаграм сполуки Sr₂CoO₃F під тиском, використовується підхід середнього поля для ефективної бозонної моделі. Відповідні результати наведені на Рис. 5.17. Спостерігаються наступні фази: (i) немамгнітна, або термічно-індукована парамагнітна LS фаза; (ii) парамагнітна спіново-



Рис. 5.18. *JT* фазові діаграми (верхній рядок) та порівняння двох теоретичних підходів при тисках P = 6.4 ГПа (ліворуч) та P = 15 ГПа (праворуч), T = 290 K (в)–(д), та $\zeta = 0$.

впорядкована фаза; (iii) антифероомагнітна високоспінова фаза (з додатковою присутністю атомів у проміжноспінових станах). Спін-орбітальна взаємодія лише незначною мірою змінює загальну структуру фазових діаграм. При низьких температурах, див. рис. 5.17(а) та (б), вона знімає додаткове антифероорбітальне впорядкування антифероомагнітної високоспінової фази. Воно також стабілізує фазу впорядкування спінових станів при низьких температурах, призводячи до ширших діапазонів її спостереження в PJ площинах. З ростом температури впорядкування спінових станів стає чутливішим до термальних флуктуацій у присутності спін-орбітальної взаємодії, див. рис. 5.17(в)–(д).

Помітне розширення фази впорядкування спінових станів з температурою на рис. 5.17(a), (в) та (ґ), а також риси додаткового повернення ПМ-УСС- ПМ на рис. 5.17(г) при фіксованому $J \in [0.6, 0.75]$ еВ нагадують модель Блуме-Емери-Ґріффіса [331]. Дійсно, JT фазові діаграми на рис. 5.18(а) та (б) мають таку ж форму, як і зазначена спрощена модель [266, 332]. У сполуці Sr₂CoO₃F зв'язок Гунда J контролює розщеплення між низькоспіновими та високоспіновими станами, тобто він відіграє таку саму роль, що і член одноіонної анізотропії у моделі Блуме-Емери-Ґріффіса. Зменшення площі, займаної спіново-впорядкованою фазою як при низьких, так і при високих температурах, виникає внаслідок подвійної ролі температури. З одного боку, температура індукує більшу заселеність ґратки високоспіновими станами, що необхідні для формування фази впорядкування спінових станів. З іншого боку, термальні флуктуації руйнують впорядкування спінових станів, коли температура занадто висока. Слід зауважити, що переходи ПМ-УСС та ПМ-АФМ є безперервними, тоді як перехід УСС-АФМ є першого порядку, як у сполуці Sr₂CoO₃F, так і в моделі Блуме-Емери-Ґріффіса.

Задля підтвердження надійності результатів підходу сильного зв'язку, проводиться порівняння локальних величин, обчислених двома методами: розкладання сильного зв'язку та динамічною теорією середнього поля у двох режимах параметрів системи (див. інтервали, позначені на рис. 5.17(в)), див рис. 5.18(в)–(д). Параметри змінної намагніченості та впорядкування спінових станів визначаються наступним чином:

$$M = \sum_{i=1,2} (-1)^{i} \sum_{m=1}^{5} (n_{i,m\uparrow} - n_{i,m\downarrow}), \qquad (5.14)$$

$$D = \sum_{i=1,2} (-1)^{i} [n_{i,\mathrm{HS}_{1}} - (n_{i,\mathrm{LS}} + n_{i,\mathrm{IS}_{1}})], \qquad (5.15)$$

де *i* та m – індекси підґратки та орбіталі, відповідно та $n_{i\alpha} \equiv \langle \hat{d}_{i,\alpha}^{\dagger} \hat{d}_{i\alpha} \rangle$. У підході ДТСП, параметр впорядкування спінових станів D обчислюється тільки приблизним чином, базуючись на густині електронів на e_g і t_{2g} орбіталях та обмежуючись підпростором трьох найнижчих мультиплетів: LS, IS₁ та HS₁.

Результати показують, що підхід сильного зв'язку можна розглядати як достатній метод для оцінки границь фаз для досліджуваної системи. У той же час, як і очікувалося, він завищує величини параметрів порядку в фазах з порушеною симетрією (і, швидше за все, значення критичних температур). Тим не менше, згідно з додатковим аналізом, він є більш точним у порівнянні із загальновживаним обмеженням взаємодії по типу густина-густина. Крім того, метод розкладання в границі сильного зв'язку з подальшим використанням статичного середньопольового підходу дозволяє проводити відповідні фізичні спостереження у ширшому діапазоні температур та безпосередньо включити вплив спін-орбітальної взаємодії.

Хоча головним рушійним механізмом формування фази впорядкування спінових станів є сильне відштовхування між близько-сусідніми високоспіновими станами кобальту на ґратці, в цій сполуці є значний внесок проміжноспінових станів. На рис. 5.19(а) та (б) показані відповідні ваги атомних станів, обчислені за допомоги двох підходів. У фазі впорядкуввання спінових станів відносна вага проміжноспінових станів збільшується зі збільшенням Jза рахунок заміщення низькоспінових станів на проміжноспінові таким чином, що в околі переходу УСС-АФМ стан стає швидше типу HS-IS, ніж типу HS-LS. Використовуючи метод максимальної ентропії для аналітичного продовження розв'язків динамічної теорії середнього поля, можна порівняти одночастичні спектральні функції Sr₂CoO₃F різних фаз, що зображені на рис. 5.19(в)–(г). Спектри обчислені при двох тисках, P = 6.4 ГПа і P = 15 ГПа, та обмінній взаємодії Гунда J = 0.64 еВ, що найкраще відповідає експериментальним

Розраховані щілини для антиферомагнітної, спіново-впорядкованої та низькоспінової фаз становлять відповідно 0.25, 0.21 та 1.35 еВ. Спектральні ваги вище енергії Фермі $E_{\rm F}$ станів $d_{x^2-y^2}$ і $d_{xz/yz}$ у антиферомагнітній (спін \uparrow) та спіново-впорядкованій (перша підґратка) фазах, відповідно, підтверджують суттєвий внесок станів IS₁, які також видно на рис. 5.19(а) та (б). Оскільки



Рис. 5.19. Ваги атомних станів, обчислені методом розкладання в границі сильного зв'язку з середньопольвим підходом (а) та динамічною теорією середнього поля (б) при P = 6.4 ГПа, $\zeta = 0$, та T = 290 К. Спектральні функції, що отримані в АФМ (в) та УСС (г) фазах при тиску P = 6.4 ГПа й у низькоспіновій фазі (г) при P = 15 ГПа та T = 290 К.

вимірювання фотоемісії неможливі під тиском, експериментальне спостереження впорядкування спінових станів, ймовірно, має покладатися на локальні вимірювання, які здатні виявити утворення двох різних станів кобальту на двох різних комірках ґратки. Такими методами є раманівська або мессбауерівська спектроскопія, або техніка ядерно-магнітного резонансу.

5.5. Дисперсія екситонів у LaCoO₃: теорія та експерименти

Мотивація досліджень. Понад 50 років тому було запропоновано, що тяжіння між електронами та дірками може приводити напівпровідники з вузькими щілинами або напівметали до нової фази – екситонного ізолятору. Експериментальне підтвердження існування цього стану речовини в гомогенних матеріалах (не гетероструктурах) залишається досить невловимим. У сильно корельованих ізоляторах близькість фази екситонного ізолятора проявляється наявністю дисперсійних збуджень електронно-діркового характеру з невеликою щілиною над синглетним основним станом [333]. У підрозділі 5.1 такий спектр збудження було запропоновано реалізувати в оксиді перовскіту LaCoO₃. Мета цього підрозділу – перевірити таку аргументацію для більш реалістичного випадку та провести пряме порівняння експериментами, де використовується резонансне непружне рентгенівське розсіювання (*engl. – resonant inelastic x-ray scattering* (RIXS)).

При низьких температурах LaCoO₃ є немагнітним ізолятором з іонами Со в основному стані з низьким спіном (LS, $S = 0, t_{2g}^6 e_g^0$). При нагріванні ця сполука зазнає кросоверу до парамагнітного ізолятора Кюрі-Вейса ($T \sim 100$ K) і, врешті, до металу Кюрі-Вейса ($T \sim 500$ K) [273, 334–339]. Традиційно кросовер спінового стану описується термічним заселенням збуджених атомних мультиплетів. Незважаючи на свою тривалу історію, точки зору стосовно характеру першого збудженого мультиплету Co³⁺ залишаються роздвоєними між високоспіновим (HS, $S = 2, t_{2g}^4 e_g^2$) [273, 315, 340] та проміжноспіновим (IS, $S = 1, t_{2g}^5 e_g^1$,) [251] станами. Обидва сценарії нібито підтримуються експериментами, див., наприклад, [273, 341, 342] і [247, 274, 343–345] для першого та другого, відповідно. Очікується, що співіснування іонів Со у збуджених (IS або HS) та основних (LS) станах призведе до значної диспропорційності довжин зв'язків Со-О. Однак цього ніколи не спостерігали, незважаючи на значні експериментальні зусилля.

Екситонний сценарій базується на спостереженні, що не тільки спінові, але й мультиплетні компоненти (LS, IS та HS) підкорюються обміну з найближчим сусідом через механізм суперобміну. Процеси міжатомного обміну, такі як $|LS, IS\rangle \leftrightarrow |IS, LS\rangle$, див. рис. 5.20(a), $|LS, HS\rangle \leftrightarrow |IS, IS\rangle$ або $|IS, HS\rangle \leftrightarrow |HS, IS\rangle$, як виявляється, мають значні амплітуди на близькосусідніх зв'язках. При низьких температурах, де в глобальному стані системи переважають атомні стани LS, має суттєве значення лише перший процес. Цей процес породжує розповсюдження збуджень IS (екситонів) на фоні LS. Як зазвичай в просторово-



Рис. 5.20. (а) Схематичне зображення тунелювання електронів, що призводить до руху IS та відповідна орбітальна структура збудження ${}^{3}T_{1g}$. (б) Схема атомних енергій та дисперсії IS (${}^{3}T_{1g}$) станів відповідно до LS вакууму. (в) Експериментальна геометрія та визначення кута розсіювання φ . Зразок може обертатися навколо вісі *a*. Напівкулі позначають атоми Со. (г) Визначення вектору переносу імпульсу $\mathbf{q} = \mathbf{k}_{out} - \mathbf{k}_{in}$.

періодичних системах, елементарні збудження IS мають форму плоскої хвилі з енергією, залежною від квазіімпульсу **q**, див. рис. 5.20(б).

Низькоенергетичні IS-екситони бувають у двох орбітальних симетріях: ${}^{3}T_{1g} (d_{xy} \otimes d_{x^{2}-y^{2}}, d_{zx} \otimes d_{z^{2}-x^{2}} i d_{yz} \otimes d_{y^{2}-z^{2}}) i {}^{3}T_{2g} (d_{xy} \otimes d_{z^{2}}, d_{zx} \otimes d_{y^{2}} i d_{yz} \otimes d_{x^{2}}).$ Завдяки своїй геометрії, екситони ${}^{3}T_{1g}$ мають меншу локальну енергію (сильне з'єднання) та більшу рухливість, сконцентровану у відповідних площинах. Збудження HS поводяться інакше. Близькосусідній обмін HS-LS є процесом четвертого порядку по тунелюванню електронів і, таким чином, має значно меншу амплітуду, ніж обмін IS-LS, який є процесом другого порядку. Збудження HS можна приблизно розглядати як нерухому зв'язану пару (бі-екситон) двох IS-екситонів з різними орбітальними структурами.

Наявність дисперсійних низькоенергетичних збуджень має глибокі наслідки. Їх теплова популяція не призводить до статичного розподілу збуджених атомних станів і, отже, не викликає деформацій ґратки. Коли щілина для збуджень закривається, наприклад, шляхом застосування сильного магнітного поля [261], збудження з **q**-векторами в області мінімуму відповідної зони зазнають бозе-ейнштейнівської конденсації. Розрахунки за допомогою першопринципної теорії функціоналу електронної густини [314] виявили, що LaCoO₃ є близьким до конденсаційної нестабільності. Метамагнітний перехід, що спостерігається у сильних полях [261], має температурну залежність, яка відповідає конденсації екситону, але є протилежною до впорядкування спінових станів HS-LS, див підрозділ 5.1. Властивості низькотемпературної фази споріднених сполуках ($\Pr_{1-y}R_y$)_xCa_{1-x}CoO₃ послідовно пояснюються конденсацією екситону, див. підрозділ 5.2. Незважаючи на ці непрямі прояви, однозначний доказ екситонної фізики в LaCoO₃ відсутній. Зрештою, це може бути забезпечено шляхом прямого спостереження за дисперсією IS. У цьому підрозділі наводяться теоретичні розрахунки дисперсії IS збуджень, що підтверджуються відповідними експериментальними спостереженнями за допомогою техніки RIXS.

Особливості резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах. Теоретичний розрахунок спектрів RIXS є нетривіальним завданням. Будемо виходити з формулювання, наведеного у роботі [346], яке факторизує переріз RIXS наступним чином:

$$\frac{\delta^2 \sigma}{\delta \Omega \delta \omega} \propto \operatorname{Im} \sum_{\gamma, \gamma'} R^{\dagger}_{\gamma'}(\mathbf{q}, \omega_{\rm in}) G_{\gamma', \gamma}(\mathbf{q}, \omega_{\rm loss}) R_{\gamma}(\mathbf{q}, \omega_{\rm in}),$$

де $R_{\gamma}(\mathbf{q}, \omega_{\text{in}})$ – амплітуда поглинання або випромінювання рентгенівських променів та $G_{\gamma',\gamma}(\mathbf{q}, \omega_{\text{loss}})$ – електронно-дірковий пропагатор,

$$G_{\gamma',\gamma}(\mathbf{q},\omega_{\text{loss}}) = \langle d_{\gamma'}(\mathbf{q}) | (\omega_{\text{loss}} + E_{\text{LS}} - \mathcal{H}_{\text{eff}} + i\delta)^{-1} | d_{\gamma}(\mathbf{q}) \rangle.$$
(5.16)

У той час як перша величина визначає інтенсивність (видимість) різних мультиплетних збуджень γ у спектрах RIXS, лише останній визначає їх дисперсію. Тут $\omega_{\rm in}$ – енергія фотона, що падає, а $\omega_{\rm loss}$ – передача енергії. $R_{\gamma}(\mathbf{q}, \omega_{\rm in}) = \langle \gamma | V_{\epsilon_{\rm out}}(\omega_{\rm in} + E_{\rm LS} - \mathcal{H} + i\Gamma)^{-1} V_{\epsilon_{\rm in}} | \text{LS} \rangle$, де оператори $V_{\epsilon_{\rm in}}(V_{\epsilon_{\rm out}})$ описують взаємодію електрон-фотон. Досить точна оцінка амплітуд $R_{\gamma}(\mathbf{q}, \omega_{\text{in}})$ надається атомномодельним розрахунком для Co³⁺, який включає експериментальну геометрію, що входить у $V_{\epsilon_{\text{in}}}(V_{\epsilon_{\text{out}}})$ оператори, повною мультиплетною формою 3d-3d i 2p-3d кулонівської взаємодії, кристалічним полем і спіново-орбітальним зв'язком в оболонках Co 3d i 2p, див. роботу [21] для отримання більш детальної інформації.

Частинково-дірковий пропагатор $G_{\gamma',\gamma}(\mathbf{q},\omega_{\mathrm{loss}})$, див. формулу (5.16), що визначає дисперсію збуджень, є ключовою теоретичною величиною, що вивчається в цьому підрозділі. Його оцінка, як правило, є складною задачею, яка потребує використання наближень. Ізоляційний основний стан LaCoO₃ [249, 347, 348], який можна розглядати як сукупність атомів LS, дозволяє усунути локальні флуктуації заряду та використовувати низькоенергетичну ефективну модель, де лише збережено кілька атомних мультиплетів та обмін між ними з найближчими сусідами. Далі опис можна далі спростити у випадку низьких температур ($T \leq 20$ K), де можна знехтувати тепловими збудженнями та використовувати узагальнений спіново-хвильовий підхід (див. підрозділ 1.3.2), який описує збудження як невзаємодіючі бозони, що розповсюджуються у гратці.

Ефективна спінова модель та характеристики збуджень. Побудова моделі починається з теорії функціоналу електронної густини для ідеалізованої кубічної структури перовскіту (a=3.8498 Å) [270]. Відповідно до техніки проекцій власних станів гамільтоніану з теорії функціоналу електронної густини на локалізовані функції Ваньє [271,272], отримується ефективна модель Габбарда, що охоплює 3*d*-подібні орбіталі Со, див. рівняння (5.5)–(5.7). За відсутності спін-орбітального зв'язку, такий підхід дає локальну матрицю $h_{\alpha\beta}^{ii}$, що має тільки діагональні елементи ($\alpha = \beta$), які вироджуються відносно станів t_{2g} або e_g . Кубічне розщеплення кристалічного поля між станами t_{2g} та e_g становить 1.666 еВ. Спін-орбітальний зв'язок має амплітуду $\zeta_d = 56$ меВ і додає відповідні недіагональні елементи до локальної матриці $h_{\alpha\beta}^{ii}$. Матриці тунелювання однакові для спінових секторів (z – вісь квантування спіну), які мають майже діагональну структуру в орбітальному просторі. Нижче використовується порядок $\{e, t\}$ з $e = \{z^2, x^2 - y^2\}$ та $t = \{xy, yz, zx\}$,

$$h_e^{(\hat{\mathbf{x}})} = \begin{pmatrix} -0.147 & 0.269\\ 0.269 & -0.458 \end{pmatrix}, \quad h_e^{(\hat{\mathbf{y}})} = \begin{pmatrix} -0.147 & -0.269\\ -0.269 & -0.458 \end{pmatrix},$$

 $h_t^{(\hat{\mathbf{x}})} = \text{diag}(-0.159, -0.071, -0.159), h_t^{(\hat{\mathbf{y}})} = \text{diag}(-0.159, -0.159, -0.071)$ і $h^{(\hat{\mathbf{z}})} = \text{diag}(-0.614, -0.008, -0.071, -0.159, -0.159)$ з величинами наданими в одиницях eB. У гамільтоніані взаємодії використовуєтья параметризація Слейтера внутрішньоатомної електрон-електронної взаємодії $U_{\alpha\beta\gamma\delta}$ з двома вхідними параметрами, середньою взаємодією U і зв'язком Гунда J, при цьому відношення інтегралів $F^4/F^2 = 0.625$ обирається фіксованим. Амплітуди U та J трактуються як регульовані параметри розробленої теорії.

Далі, проводиться розкладання в границі сильного зв'язку (див. підрозділ 1.3.3) з метою виведення низькоенергетичної ефективної моделі, що охоплює LS, HS (${}^{5}T_{2g}$) і IS (${}^{3}T_{1g}$ і ${}^{3}T_{2g}$) стани. Спіно-орбітний зв'язок також враховується, але нехтується ромбоедричною деформацією реальної структури LaCoO₃. Це все ще складна модель багатьох частинок, яка включає 34 стани на одиничному вузлі Со. Значне спрощення досягається при низьких температурах, коли система перебуває в основному стані, що може бути наближеним як добуток станів LS на кожному вузлі. Решта 33 станів можна розглядати як бозонні збудження, які можуть поширюватися між вузлами з можливою зміною стану.

У таблиці 5.1 для наочності та за відсутності спін-орбітального зв'язку надаються лише декілька характерних значень для амплітуд, а також атомних $E_{\rm at}$ і перенормованих локальних енергій $h_{\gamma\gamma}^{ii} = E_{{\rm at},\gamma} + \sum_{\bf r} [a_{\gamma\gamma}^{({\bf r})} - a_{\emptyset\emptyset}^{({\bf r})}]$, де $a_{\gamma\gamma}^{({\bf r})} = \varepsilon_{1\gamma\gamma}^{ii({\bf r})}, \Delta_{\gamma\gamma}^{({\bf r})} = \varepsilon_{2\gamma\gamma}^{ij({\bf r})}, \emptyset = \text{LS. Слід зауважити, що значення для станів інших$ орбітальних типів можна отримати відповідними перестановками базиснихвекторів.

Спін-орбітальна взаємодія, через свою помітну амплітуду (оцінюється

Таблиця 5.1. Характерні амплітуди ефективної моделі Бозе-Габбарда (в одиницях eB) при U = 2.1 eB, J = 0.66 eB i $\zeta_d = 0$. Амплітуди для процесів народження/знищення пар не є загальними і відображені лише для станів $S_z = 0$ через їх залежність від проекції спіну (процес підкоряється правилу збереження, тобто внесок вносять лише пари IS з протилежними m_s).

Стан	$E_{\rm at}$	$a^{(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})}_{\gamma\gamma}$	$a_{\gamma\gamma}^{(\hat{\mathbf{z}})}$	$h^{ii}_{\gamma\gamma}$	$h_{\gamma\gamma}^{ij(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})}$	$h_{\gamma\gamma}^{ij(\hat{\mathbf{z}})}$	$\Delta_{\gamma\gamma}^{ij(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})}$	$\Delta^{ij(\hat{\mathbf{z}})}_{\gamma\gamma}$
LS	0.000	-0.003	-0.003	0.000		_		_
HS_z	0.879	-0.148	-0.137	0.034	0.000	0.000	0.000	0.000
$\mathrm{IS}_{xy} (T_{1g})$	0.879	-0.136	-0.006	0.344	0.062	0.001	0.003	0.000
$\mathrm{IS}_{xy} (T_{2g})$	1.324	-0.078	-0.210	0.613	0.024	0.044	0.001	0.003

як $\zeta_d = 56$ меВ), впливає на перелічені досліджувані фізичні величини, а отже, і на дисперсійні особливості збуджень. Наявність спін-орбітального зв'язку враховується в числовій процедурі, але робить матриці h і Δ щільними, заважаючи простому аналізу характерних значень, подібних до показаних у таблиці 5.1.

Обмежуючись нульовою густиною d-збуджень в гамільтоніані (5.8), тобто, нехтуючи гамільтоніаном взаємодії між бозонами \mathcal{H}_{int} , їх дисперсію можна отримати в рамках узагальненого спіново-хвильового підходу, див. підрозділ 1.3.2. Цей теоретичний підхід й дозволяє детально проаналізувати всі відповідні дисперсійні характеристики процесу RIXS у LaCoO₃, як обговорювалося вище.

Порівняння теорії та експериментів. Спектри збуджень, що зображені на рис. 5.21, отримано для U=2.1 eB i J=0.66 eB. Ці значення приводять до найкращого узгодження з наявними даними RIXS при 20 K на додаток до наступних експериментальних обмежень: (1) основний стан при 20 K є ізоляційним синглетним станом [249, 347, 348], що не виявляє жодного порушення



Рис. 5.21. Питома спектральна густина збуджень частинка-дірка для різних атомних мультиплетів: (a) IS (${}^{3}T_{1g}$), (б) HS (${}^{5}T_{2g}$) і (в) IS (${}^{3}T_{2g}$). Спектри були штучно розширені лоренціаном з шириною 10 меВ. Амплітуди взаємодії – U=2.1 еВ і J = 0.66 еВ, а також амплітуда спін-орбітального зв'язку $\zeta_{d}=56$ меВ.

симетрії; (2) енергія найнижчого збудження HS потрапляє в діапазон 10–20 меВ, згідно з дослідженнями непружного розсіювання нейтронів [341, 342]. Згідно з додатковими розрахунками, обчислені спектри досить чутливі до зміни U і J, що має комплексний ефект, одночасно змінюючи положення центрів зон і ширини зон усіх збуджень. Тому існування параметрів, що відповідають усім експериментальним обмеженням, є більш ніж тривіальним підбором параметрів. При порівнянні з параметрами взаємодії, що використовуються в інших дослідженнях, слід пам'ятати, що U та J сильно залежать від обраного базису. Тому наявні значення можна порівняти з дослідженнями, заснованими суто на 3d моделях [258], але не зі значеннями, що використовуються в LDA+U підходах або моделях, де явно використовуються 2p-стани O.

На рис. 5.21 показані внески різних атомних мультиплетів в обчислену

дисперсію елементарних збуджень. Значна дисперсія гілки IS ${}^{3}T_{1g}$, що описує поширення єдиного стану IS ${}^{3}T_{1g}$ на фоні LS, походить від процесів, таких як зображені на рис. 5.20(а). Обрахований мінімум зони в точці R – простий наслідок амплітуд тунелювання електронів t_{e_g} і $t_{t_{2g}}$ до найближчих сусідів (див. рис. 5.20(а)), що має однаковий знак [314], і є загальною особливістю структури перовскітів. Посилена низькоенергетична інтенсивність IS ${}^{3}T_{1g}$ навколо точки R частково пояснюється слабкими процесами створення або знищення пари на сусідніх вузлах $|\text{LS}, \text{LS}\rangle \leftrightarrow |\text{IS}, \text{IS}\rangle$, див. таблицю 5.1 та підрозділ 5.3. Спін-орбітальна взаємодія індукує розщеплення станів IS ${}^{3}T_{1g}$, що добре видно вздовж напрямку R-Г, див. рис. 5.21(а) і рис. 5.22(в).

Збудження HS у цьому наближенні не розповсюджуються на фоні LS. В результаті вони утворюють майже плоскі зони з центрами приблизно 20, 45 і 90 меВ, розщеплені і частково змішані з IS спін-орбітальною взаємодією. Ці енергії узгоджуються з іншими дослідженнями [341, 342, 349].

Включення амплітуд переходу $R_{\gamma}(q, \omega_{\rm in})$ сильно пригнічує внесок станів HS (${}^{5}T_{2g}$) до спектрів RIXS, див. рис. 5.22(а) та 5.22(б). Обчислені інтенсивності RIXS по лініях високої симетрії в кубічній зоні Бріллюена разом з експериментальними позиціями піків ${}^{3}T_{1g}$ і ${}^{3}T_{2g}$ показані на рис. 5.22(в). Спостерігається дуже хороший збіг в експериментально доступній частині зони Бріллюена вздовж напрямків Γ -X і Γ -R.

Найцікавіша область навколо точки R знаходиться поза можливостями експериментальної техніки. Через домінуючий характер близькосусідніх тунелювань екситонів форма дисперсії значною мірою визначається структурою ґратки. Знання дисперсії у значній частині зони таким чином ставить екстраполяцію на тверду основу.

Без експериментальних даних про детальний спектр збуджень навколо точки *R* можна міркувати про два можливі сценарії: (і) найменше збудження є переважно IS типу, маючи на увазі, що при закритті щілини для збуджень можлива бозе-конденсація екситонів, наприклад, що індукується магнітним



Рис. 5.22. Обраховані спектральні інтенсивності процесу RIXS (а,в) крізь високосиметричні точки зони Бріллюена. (б) Тривимірний графік, що показує повну спектральну густину збуджень частинка-дірка $\rho_{\rm ph}$. Експериментальні точки на графіку (в) узяті з робіт [21] (білі квадрати з індикаторами похибок) і [350] (концентричні круги).

полем, як обговорювалося в підрозділі 5.1 для деякого інтервалу малих концентрацій IS; (іі) найнижчим збудженням є переважно HS, але наявність рухливих збуджень IS запобігає впорядкуванню спінових станів (HS-LS) за рахунок |HS, LS⟩ ↔ |IS, IS⟩ флуктуацій.

Висновки до розділу 5

Результати досліджень, представлених у даному розділі, опубліковано в статтях [18–22]. Серед основних результатів в якості висновків можна виділити наступні:

• Для моделювання впливу зовнішнього магнітного поля на фазовий пе-

рехід в околі спінового кросовера в LaCoO₃ використано двоорбітальну модель Габбарда. Виявлено, що експериментально спостережений нахил $dh_c/dT > 0$ в даній сполуці відповідає конденсації спін-триплетних екситонів і є несумісним з упорядкуванням спінових станів. Показано, що індукований полем перехід відповідає типу ізолятор-ізолятор. Оцінено дисперсію збуджень IS та HS на фоні основного стану LS та виявлено значну ширину зони для збуджень IS порядку декількох 100 меВ, тоді як відповідна ширина зони збуджень HS на порядок менша. Зроблено висновок, що індукований полем перехід є Бозе-Ейнштейнівською конденсацією екситонів зі спіном 1. Мобільні збудження IS є ключовою властивістю режиму низьких температур, який необхідно враховувати при описі LaCoO₃.

• Вивчено пригнічення екситонного конденсату (ЕК) магнітним полем у двозонній моделі Габбарда. Спостережувана поведінка якісно узгоджується з експериментами в сполуках оксидів кобальту типу РССО. Показано, що індукований полем фазовий перехід при фіксованому хімічному потенціалі супроводжується істотною зміною електронної густини. Наведено аргументи, що кероване полем пригнічення стану екситонного конденсату в РССО призводить до валентного кросовера між іонними станами \Pr^{4+} та \Pr^{3+} .

• Для сполуки LaSrCoO₄ виявлено, що стан екситонного конденсату є стабільним із загальною енергією, меншою, ніж у парамагнітного стану, на значній частині досліджуваної фазової діаграми UJ. Стабільні рішення ЕК мають орбітальну симетрією $d_{xy} \otimes d_{x^2-y^2}$. Порівняння з LaCoO₃ в рамках спіново-хвильового підходу для ефективної моделі в границі сильного зв'язку дозволяє припустити, що шаруватий кобальтит є ближчим до нестабільності ЕК або, що конденсація вже має місце за відсутності зовнішніх полів. Експериментальні дослідження поведінки такої сполуки під тиском та у сильних магнітних полях [261], таким чином, є дуже бажаними.

• Проведено теоретичне дослідження шаруватого кобальтиту Sr_2CoO_3F під тиском за допомоги підходів розкладання сильного зв'язку та динамічної те-

орії середнього поля. На відміну від ізоелектронних сполук LaCoO₃ і LaSrCoO₄, виявлено, що мобільні проміжноспінові збудження не грають важливої ролі у фізиці низьких енергій Sr₂CoO₃F. Мобільні $d_{x^2-y^2} \otimes d_{xy}$ IS₄ збудження мають щілину понад 0.5 eB через тетрагональне розщеплення кристалічного поля, тоді як інші проміжноспінові збудження включають внески d_{z^2} орбіталі, що має низьку рухливість завдяки асиметричній гібридизації між атомами Co і верхівковими атомами O і F.

• Показано, що фізика низьких енергій сполуки Sr₂CoO₃F визначається близькосусідньою взаємодією між атомними мультиплетними збудженнями, а модель сильного зв'язку зводиться до узагальненої моделі Блуме-Емери-Ґріффіса. Як і в останній [331,332], між низькоспіновою та антиферомагнітними фазами утворюється фаза впорядкування спінових станів. Результати підходу в границі сильного зв'язку підтверджуються відповідністю до результатів динамічної теорії середнього поля. Існування підґраток з двома різними станами атомів кобальту у фазі впорядкування спінових станів робить її виявлення прямолінійним. Наприклад, очікується значна диспропорція довжини з'єднань Со-О [248].

• Для кристалів LaCoO₃ теоретично обчислено дисперсійні характеристики збуджень та проведено пряме порівняння з експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння при 20 К [21, 350]. Експериментальні дані добре узгоджуються з теоретичними розрахунками в експериментально доступній частині зони Бріллюена, а їх екстраполяції вказують на важливу роль збуджень IS у фізиці низьких енергій матеріалу. Дисперсія, в якій переважають процеси обміну між найближчими атомами кобальту, дозволяє здійснити надійну екстраполяцію. Поліпшення енергетичної роздільної здатності та поляризаційного аналізу дозволило б зменшити опору на теоретичну модель і тому є дуже бажаним. Результати напряму вказують, що односкладові відповіді на традиційне питання, яке збудження – HS чи IS є найнижчим у LaCoO₃, не є коректними для розуміння фізики системи. Хоча мало сумнівів, що найнижчим атомним збудженням є HS, рухливість станів IS на ґратці змінює картину в розширеній системі. Тому LaCoO₃ слід розглядати не як статичну колекцію іонів у конкретних атомних станах, а як газ рухливих бозонних екситонів IS над LS вакуумом. Високоспінові стани відіграють роль сильно пов'язаних і, по суті, нерухомих бі-екситонів. Запропонована картина дає природне пояснення, чому впорядкування спінових станів, що супроводжується диспропорцією довжин зв'язків Co-O, не спостерігається в LaCoO₃, незважаючи на низьку енергію збуджень HS.

• Упорядкування спінових станів було запропоновано в контексті LaCoO₃ досить давно [257, 258, 351], але експериментально досі не спостерігалося. Згідно з результатами даного розділу, вважається, що причиною тому є мобільні низькоенергетичні збудження проміжноспінових станів. Відсутність або присутність їх у сполуках Sr₂CoO₃F та LaCoO₃, відповідно, можуть пояснити їх різні магнітні властивості – антиферомагнітне впорядкування у сполуці Sr₂CoO₃F проти феромагнітних кореляцій у кристалі LaCoO₃ [352] і феромагнітного впорядкування в натягнутих плівках LaCoO₃ [319, 353]. Теоретично досліджені сполуки оксидів кобальту та отримані результати, таким чином, забезпечують важливу систему відліку для розуміння фізики Co³⁺ перовскітів.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено важливу задачу теоретичної фізики, а саме: узагальнено та успішно застосовано першопринципні та середньополеві підходи до опису близькокритичних явищ у таких квантових системах багатьох частинок як розріджені гази лужних або лужно-земельноподібних атомів в оптичних пастках при можливій наявності додаткових просторово-періодичних потенціалів та взаємодіючих квантових газах вироджених електронів в кристаличних структурах оксидів кобальту.

Основні результати дисертаційної роботи, усі з яких отримано вперше, сформульовані в наступних пунктах:

1. Розроблено теоретичний підхід, що дозволив отримати аналітичні вирази для залежностей хімічних потенціалів ідеальних квантових газів від температури, що можуть застосовуватись з достатньою точністю на всьому інтервалі температур.

2. Виявлено оптимальні фільтраційні характеристики газів атомів лужних металів у стані конденсації при пропусканні сигналів оптичного діапазону слабкої інтенсивності.

3. Передбачено ефект прискорення релятивістських частинок та показано можливість визначення спектральних характеристик атомів лужних металів на основі детектування черенковского випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом.

4. Узагальнено динамічну теорію середнього поля та показано, що двокомпонентні фермі-гази з різними амплітудами тунелювання компонент мають переваги з точки зору досягнення магнітно-впорядкованих фаз.

5. Здобуто низькотемпературні фази газів атомів, що мають як різні амплітуди тунелювання, так й різну густину компонент в оптичних ґратках.

6. Встановлено критичні температури переходів між три- та двопідгратковими антиферомагнітно-впорядкованими станами в SU(3)-симетричній моделі Габбарда.

7. Теоретично розраховано ефекти впливу спінових симетрій на феромагнітне впорядкування в дво- та триорбітальній моделі Габбарда.

8. Запропоновано теорію бозе-конденсації спін-триплетних екситонів в кристалах оксидів кобальту в зовнішньому сталому магнітному полі.

9. Отримано низькотемпературні фазові діаграми оксидів кобальту з домішками кальцію, стронцію, та елементів групи лантану.

10. Теоретично обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень, що добре узгоджуються з наявними експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Таким чином, усі поставлені завдання виконані, і мета дисертаційної роботи досягнута.

Одержані результати доповнюють і розширюють наявні уявлення про квантові гази і, зокрема, близькокритичні ефекти в таких системах. Результати, що відносяться до ультрахолодних атомів у зовнішніх полях можуть бути використані при розробці та побудові високоточних оптичних приладів та розробці універсальних квантових симуляторів. Останні можуть бути застосовані для точного вивчення більш складних твердотільних систем задля посилення таких ефектів як високотемпературна надпровідність, колосальний магнетоопір, орбітальне та магнітне впорядкування тощо. Результати з близькокритичних явищ у кобальтитах можуть бути використані у спінтрониці та магнітних пристроях, що потребують високої стійкості по відношенню до термічних флуктуацій та зовнішніх полів.

Подяки

Представлення дисертаційної роботи неможливо б було уявити без всебічної підтримки мого наукового консультанта, доктора фіз.-мат. наук, професора, академіка НАН України Юрія Вікторовича Слюсаренка. Я глибоко вдячний йому не тільки за безцінний внесок з наукової точки зору, але також за збереження і розвиток здорової професійної атмосфери у відділі, керівником якого він є, та в інституті теоретичної фізики в цілому.

Ключові складові дисертації були б неможливими без багатобічної підтримки закордонних професорів – керівників дослідницьких проектів, у яких я брав участь як виконавець. Це стосується як Prof. Walter Hofstetter, так і Prof. Jan Kuneš, з якими мені пощастило плідно працювати.

Також виражаю подяку своїм співавторам: D. Cocks, M. Snoek, A. Golubeva, A. Cichy, A. Hariki, J. Fernández Afonso, R.-P. Wang, F. de Groot, K.-H. Ahn, N. Darkwah Oppong, Y. Zambrano, O.C. Пелетминському, С.В. Пелетминському, М.С. Булахову, К.В. Середі та Д.М. Распоповій за плідну співпрацю, участь в постановці наукових проблем та обговоренні результатів.

Я щиро вдячний всім співробітникам інституту теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, фізико-технічного факультету ХНУ ім. В.Н. Каразіна, інституту теоретичної фізики університету ім. Гете, інституту фізики чеської академії наук, інституту фізики твердого тіла технічного університету Відня та інститутів і університетів, де мені випало честь виступати з науковими семінарами, за корисні дискусії по темі дисертації.

Наостанок, виражаю особливу подяку великій родині близьких та родичів. Це стосується представників старшого покоління, які підтримували увесь час та стимулювали проведення наукової діяльності (й, насамперед, завершення цієї роботи), у тому числі, вивільняючи час та беручи частину сімейних обов'язків на себе, та яким у ці непрості часи приходиться найтяжче. Мене дуже підтримувала зацікавленість представників мого покоління у моїй професійній діяльності – коханої дружини, сестер і братів з подружжями, друзів, а також студентів, яких мені пощастило навчати або консультувати. І, безсумнівно, без особливого натхнення, що дарувало зовсім молоде покоління (навіть цього не усвідомлюючи), робота не була би такою, якою вона вийшла. Саме у ці часи стає очевиднішим, що їм не залишено іншого вибору крім робити отриманий у спадок цивілізаційний світ більш досконалим.

* * *

Скарлет була розумною, але самотньою дівчинкою. Її мама викладала англійську в університеті дистанційного навчання. Тато навчав фізики елементарних частинок, але, як Ніх дізнався від Скарлет, охочих слухати цю науку було мабуть навіть менше тих, хто волів її викладати. Тому родині доводилося переїздити з одного міста з університетом до іншого, де тато сподівався отримати постійну посаду, але щоразу даремно.

– А що таке фізика елементарних частинок? – запитав хлопчик Ніх. Скарлет знизала плечима.

– Ну, – почала вона, – ми всі складаємося з атомів, таких маленьких штучок, що їх навіть неможливо побачити. А вони складаються з іще менших штук, от їх і вивчає фізика елементарних частинок.

Ніх кивнув, але подумав, що тато Скарлет, либонь, цікавиться чимось цілковито уявним.

Ніл Гейман, «Книга кладовища» (2008).

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- Feynman R. P. Simulating physics with computers. *Int. J. Theor. Phys.* 1982.
 Vol. 21, No. 6. P. 467–488.
- Сотников А. Г. Теория замедления электромагнитных волн слабой интенсивности в бозе-конденсате газа атомов щелочных металлов: Дисс. кандидата наук / Национальний научный центр «Харьковский физикотехнический институт». Харьков, 2010. 131 с.
- Sotnikov A. G., Sereda K. V., Slyusarenko Y. V. Chemical potentials and thermodynamic characteristics of ideal Bose- and Fermi-gases in the region of quantum degeneracy. *Low Temp. Phys.* 2017. Vol. 43, No. 1. P. 144–151.
- Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G. Feasibility of using Bose-Einstein condensates for filtering optical pulses. *Low Temp. Phys.* 2010. Vol. 36. P. 671– 676.
- Sotnikov A. Magnetic field dependence and the possibility of filtering ultraslow light pulses in atomic gases with Bose–Einstein condensates. *Phys. Scr.* 2010. Vol. T140. P. 014061.
- Sotnikov A. G. On some peculiarities of propagation of weak electromagnetic pulses in Bose-Einstein condensates of alkali-metal atoms. *Opt. and Spectr.* 2011. Vol. 111, No. 4. P. 639–646.
- Слюсаренко Ю. В., Сотніков А. Г. Унікальні ефекти відгуку ультрахолодних газів атомів лужних металів у стані з Бозе-Ейнштейнівським конденсатом на збудження електромагнітним полем. *Вісн. Нац. Акад. Наук Укр.* 2016. Т. 7. С. 19–26.

- Slyusarenko Y., Sotnikov A. Propagation of relativistic charged particles in ultracold atomic gases with Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 83. P. 023601.
- Sotnikov A., Cocks D., Hofstetter W. Advantages of mass-imbalanced ultracold fermionic mixtures for approaching quantum magnetism in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 065301.
- Sotnikov A., Snoek M., Hofstetter W. Magnetic phases of mass- and populationimbalanced ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2013. Vol. 87. P. 053602.
- Golubeva A., Sotnikov A., Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. A.* 2015. Vol. 92. P. 043623.
- Sotnikov A. Perspectives of optical lattices with state-dependent tunneling in approaching quantum magnetism in the presence of the external harmonic trapping potential. *Phys. Lett. A.* 2016. Vol. 380, No. 11–12. P. 1184–1188.
- Sotnikov A., Hofstetter W. Magnetic ordering of three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 89. P. 063601.
- Sotnikov A. Critical entropies and magnetic-phase-diagram analysis of ultracold three-component fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2015. Vol. 92. P. 023633.
- Golubeva A., Sotnikov A., Cichy A., Kuneš J., Hofstetter W. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95. P. 125108.
- Cichy A., Sotnikov A. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. A*. 2016. Vol. 93. P. 053624.

- Sotnikov A., Cichy A., Kuneš J. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97. P. 235157.
- Sotnikov A., Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. *Sci. Rep.* 2016. Vol. 6. P. 30510.
- Sotnikov A., Kuneš J. Competing phases in a model of Pr-based cobaltites. *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 96. P. 245102.
- Afonso J. F., Sotnikov A., Kuneš J. Theoretical investigation of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. J. Phys. Condens. Matter. 2018. Vol. 30, No. 13. P. 135603.
- Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y. et al. Excitonic dispersion of the intermediate spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic x-ray scattering. *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 035149.
- Afonso J. F., Sotnikov A., Hariki A., Kuneš J. Pressure-induced spin-state ordering in Sr₂CoO₃F. *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 99. P. 205118.
- 23. Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G. Effects in the linear response of atomic Bose-Einstein condensates to an external electromagnetic perturbation. 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics: Book of abstracts (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.
- 24. Sotnikov A., Hofstetter W. Quantum phase transitions of ultracold atoms in optical lattices: dynamical mean field theory studies. 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics: Book of abstracts (August 29 September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 168–169.
- 25. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., Hofstetter W. Quantum magnetism of massimbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*:

Book of abstracts, section A 35 (Stuttgart, Germany, March 12–16, 2012). Stuttgart, 2012. P. 1.

- 26. Sotnikov A. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. 6th International Workshop "Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence": Book of abstracts (Lyon, France, June 5–8, 2012). Lyon, 2012. P. 90.
- Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G. Perspectives of Bose-Einstein condensates for filtering of light pulses and acceleration of relativistic charged particles. *4th Conference "Statistical Physics: Modern Trends and Applications"*: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2012). Lviv, 2012. P. 188.
- Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., Hofstetter W. Quantum magnetism of massimbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts (Hannover, Germany, March 18–22, 2013). Hannover, 2013. P. 2.
- Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., Hofstetter W. Quantum magnetism of massimbalanced fermionic mixtures. *International Conference "The New Generation* of Strongly Correlated Electron Systems": Book of abstracts (Sestri Levante, Italy, July 1–5, 2013). Sestri Levante, 2013. P. 22.
- 30. Golubeva A., Sotnikov A., Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 34 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 2.
- 31. Sotnikov A., Hofstetter W. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. DPG Spring Meeting of the Section AMOP: Book of abstracts, section A 50 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 1.
- 32. Cichy A., Sotnikov A., Hofstetter W. Real-Space Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric fermionic Hubbard model and its extensions. Magnetic

orderings and Hund's coupling. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section Q 15 (Heidelberg, Germany, March 23–27, 2015). Heidelberg, 2015. P. 4.

- Sotnikov A. G. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. VI International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics": Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 2–5, 2015). Kharkiv, 2015. P. 46.
- 34. Cichy A., Sotnikov A., Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the Two-Band Hubbard Model. Magnetic orderings and Hund's coupling. *The International Workshop FINESS-2015: Finite-Temperature Non-Equilibrium Superfluid Systems*: Book of abstracts (Sopot, Poland, September 14–18, 2015). Sopot, 2015. P. 44.
- 35. Cichy A., Golubeva A., Sotnikov A., Hofstetter W. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical Mean-Field Approach. DPG Spring Meeting of the Section AMOP: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.
- 36. Golubeva A., Cichy A., Sotnikov A., Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric Fermi-Hubbard model and its extensions. DPG Spring Meeting of the Section AMOP: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.
- Sotnikov A., Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. DPG Spring Meeting of the Section SKM: Book of abstracts, section MA 68 (Dresden, Germany, March 19–24, 2017). Dresden, 2017. P. 1.
- Sotnikov A. Field-induced exciton condensation in d⁶ perovskites. NGSCES 8th International Conference: Book of abstracts (Barcelona, Spain, September 4–8, 2017). Barcelona, 2017. P. 64.
- 39. Sotnikov A. Influence of continuous symmetries on magnetic ordering in the Hubbard model with multiple spin and orbital components. *FOR1807 Winter*
School "Numerical Methods in Strongly Correlated Quantum Systems": Book of abstracts (Marburg, Germany, February 19–23, 2018). Marburg, 2018. P. 33.

- 40. Cichy A., Sotnikov A. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 5 (Erlangen, Germany, March 4–9, 2018). Erlangen, 2018. P. 1.
- Fernández Afonso J., Sotnikov A., Kuneš J. Theoretical investigation of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. DPG Spring Meeting of the Section SKM: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 146.
- 42. Sotnikov A., Kuneš J. Competing phases in the model of Pr-based cobaltites. DPG Spring Meeting of the Section SKM: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 199.
- 43. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y. et al. Excitonic dispersion of the intermediate-spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic X-ray scattering. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 205.
- 44. Cichy A., Sotnikov A. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. 42th International Conference of Theoretical Physics: correlations and coherence on different scales, CCDS 2018: Book of abstracts (Ustroń, Poland, September 9–14, 2018). Ustroń, 2018. P. 105.
- 45. Zambrano Y., Cichy A., Sotnikov A. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 18.

- 46. Cichy A., Sotnikov A., Zambrano Y. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 42–43.
- 47. Fernández Afonso J., Sotnikov A., Hariki A., Kuneš J. Pressure-induced spinstate ordering in Sr₂CoO₃F. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 6.
- Cichy A., Sotnikov A. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Magnetism Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 37.
- 49. Raspopova D. M., Sotnikov A. G. Slowing of electromagnetic pulses in the proximity of phase transition to Bose-Einstein condensate in ultracold atomic gases. X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019. P. 153.
- 50. Sotnikov A. G. Orbital ordering of ultracold fermionic mixtures in optical lattices. X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019. P. 157.
- Sotnikov A., Kuneš J. Ferromagnetism of LaCoO₃. 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2019). Lviv, 2019. P. 68.
- 52. Cichy A., Sotnikov A., Zambrano Y. Low-temperature phases in the twoband Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. XIX National Conference on Superconductivity: Book of abstracts (Bronisławów, Poland, October 6–11, 2019). Bronisławów, 2019. P. 42.

- Bose S. N. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. Z. Phys. 1924. Vol. 26.
 P. 178–181.
- 54. Einstein A. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 1925. Vol. 1. P. 3–14.
- Fermi E. Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico. *Rendiconti Lincei*.
 1926. Vol. 3. P. 145–149.
- 56. Dirac P. A. M. On the theory of quantum mechanics. *Proc. R. Soc. Lond. A.* 1926. Vol. 112, No. 762. P. 661–677.
- 57. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: учебное пособие для вузов в 10 т. М.: Физматлит, 2002. Т. V. Статистическая физика. Часть 1.
- 58. Reif F. Fundamentals of Statistical and Thermal Physics. Waveland Press, 2009.
- 59. Pathria R. K., Beale P. D. Statistical mechanics. Burlington: Elsevier, 2011.
- 60. Ketterle W. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. *Rev. Mod. Phys.* 2002. Vol. 74. P. 1131–1151.
- Baker G. A., Graves-Morris P. Padé Approximants. Encyclopedia of Mathematics and its Applications. 2 edition. Cambridge University Press, 1996.
- Pethick C. J., Smith H. Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- Pitaevskii L. P., Stringari S. Bose-Einstein Condensation. Oxford: Clarendon Press, 2003.
- 64. Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V. Second quantization method in the presence of bound states of particles. J. Math. Phys. 2005. Vol. 46, No. 2. P. 022301.
- 65. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: учебное пособие для вузов в 10 т. 6-е, испр. изд. М.: Физматлит, 2004. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория).

- Anderson M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., Cornell E. A. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*. 1995. Vol. 269, No. 5221. P. 198–201.
- Davis K. B., Mewes M. O., Andrews M. R., van Druten N. J., Durfee D. S., Kurn D. M., Ketterle W. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 75, No. 22. P. 3969–3973.
- Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977.
- Bloch I., Dalibard J., Zwerger W. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* 2008. Vol. 80. P. 885–964.
- Esslinger T. Fermi-Hubbard Physics with Atoms in an Optical Lattice. Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2010. Vol. 1, No. 1. P. 129–152.
- 71. Grimm R., Weidemüller M., Ovchinnikov Y. B. Optical dipole traps for neutral atoms. Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2000. Vol. 42. P. 95 170.
- Jaksch D., Bruder C., Cirac J. I., Gardiner C. W., Zoller P. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 81. P. 3108–3111.
- Chin C., Grimm R., Julienne P., Tiesinga E. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* 2010. Vol. 82. P. 1225–1286.
- 74. Lieb E. H., Wu F. Y. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.* 1968. Vol. 20. P. 1445–1448.
- van Dongen P. G. J. Thermodynamics of the extended Hubbard model in high dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol. 67. P. 757–760.
- 76. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. Спиновые волны. М.: Наука, 1967.

- 77. Xiao M.-w. Theory of transformation for the diagonalization of quadratic Hamiltonians. *arXiv e-prints.* 2009. 0908.0787.
- Schrieffer J. R., Wolff P. A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Phys. Rev.* 1966. Vol. 149. P. 491–492.
- MacDonald A. H., Girvin S. M., Yoshioka D. ^t/_U expansion for the Hubbard model. *Phys. Rev. B.* 1988. Vol. 37. P. 9753–9756.
- Lee P. A., Nagaosa N., Wen X.-G. Doping a mott insulator: Physics of hightemperature superconductivity. *Rev. Mod. Phys.* 2006. Vol. 78. P. 17–85.
- Fazekas P. Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism. Singapore: World Scientific, 1999.
- 82. Metzner W., Vollhardt D. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 62. P. 324–327.
- B3. Georges A., Kotliar G. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*. 1992. Vol. 45. P. 6479–6483.
- Anderson P. W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.* 1961. Vol. 124.
 P. 41–53.
- Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J. Dynamical meanfield theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* 1996. Vol. 68. P. 13–125.
- Caffarel M., Krauth W. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity. *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 72. P. 1545–1548.
- 87. Bulla R., Hewson A. C., Pruschke T. Numerical renormalization group calculations for the self-energy of the impurity Anderson model. J. Phys.: Condens. Matter. 1998. Vol. 10, No. 37. P. 8365.

- Kotliar G., Savrasov S. Y., Haule K., Oudovenko V. S., Parcollet O., Marianetti C. A. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Rev. Mod. Phys.* 2006. Vol. 78. P. 865–951.
- Pavarini E., Koch E., Lichtenstein A., Vollhardt D. E. The LDA+DMFT approach to strongly correlated materials. Forschungszentrum Jülich GmbH, 2011. Vol. 1 of Schriften des Forschungszentrums Jülich: Modeling and Simulation.
- Harris S. E. Electromagnetically induced transparency. *Phys. Today*. 1997.
 Vol. 50, No. 7. P. 36–42.
- 91. Hau L. V., Harris S. E., Dutton Z., Behroozi C. H. Light speed reduction to 17 metres per second in an ultracold atomic gas. *Nature*. 1999. Vol. 397. P. 594– 598.
- 92. Steck D. A. Sodium D Line Data. *eprint*. 2000. http://steck.us/alkalidata.
- Cornish S. L., Claussen N. R., Roberts J. L., Cornell E. A., Wieman C. E. Stable
 ⁸⁵Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions. *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85. P. 1795–1798.
- 94. Kasevich M. A., Riis E., Chu S., DeVoe R. G. rf spectroscopy in an atomic fountain. *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 63, No. 6. P. 612–615.
- Hofstetter W., Cirac J. I., Zoller P., Demler E., Lukin M. D. High-temperature superfluidity of fermionic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 89. P. 220407.
- 96. Jördens R., Tarruell L., Greif D., Uehlinger T., Strohmaier N., Moritz H. et al. Quantitative determination of temperature in the approach to magnetic order of ultracold fermions in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 104. P. 180401.

- 97. Taglieber M., Voigt A.-C., Aoki T., Hänsch T. W., Dieckmann K. Quantum Degenerate Two-Species Fermi-Fermi Mixture Coexisting with a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. P. 010401.
- 98. Taie S., Takasu Y., Sugawa S., Yamazaki R., Tsujimoto T., Murakami R., Takahashi Y. Realization of a SU(2) × SU(6) System of Fermions in a Cold Atomic Gas. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 190401.
- 99. Mandel O., Greiner M., Widera A., Rom T., Hänsch T. W., Bloch I. Coherent transport of neutral atoms in spin-dependent optical lattice potentials. *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 91. P. 010407.
- 100. Zwerger W. Mott-Hubbard transition of cold atoms in optical lattices. J. Opt.
 B. 2003. Vol. 5, No. 2. P. S9–S16.
- 101. Kuklov A. B., Svistunov B. V. Counterflow superfluidity of two-species ultracold atoms in a commensurate optical lattice. *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 90. P. 100401.
- 102. Altman E., Hofstetter W., Demler E., Lukin M. D. Phase diagram of twocomponent bosons on an optical lattice. New J. Phys. 2003. Vol. 5. P. 113.
- 103. Dao T.-L., Georges A., Capone M. Competing superfluid and density-wave ground-states of fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattices. *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 104517.
- 104. Gull E., Millis A. J., Lichtenstein A. I., Rubtsov A. N., Troyer M., Werner P. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.* 2011. Vol. 83. P. 349–404.
- 105. Bulla R., Costi T. A., Pruschke T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Rev. Mod. Phys.* 2008. Vol. 80. P. 395–450.
- 106. Ashcroft N. W., Mermin N. D. Solid State Physics. Orlando: Harcourt College Publishers, 1976.

- 107. Cazalilla M. A., Ho A. F., Giamarchi T. Two-Component Fermi Gas on Internal-State-Dependent Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 226402.
- 108. Werner F., Parcollet O., Georges A., Hassan S. R. Interaction-induced adiabatic cooling and antiferromagnetism of cold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 056401.
- 109. Gorelik E. V., Titvinidze I., Hofstetter W., Snoek M., Blümer N. Néel transition of lattice fermions in a harmonic trap: A real-space dynamic mean-field study. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 065301.
- 110. Gorelik E., Blümer N. Antiferromagnetism of lattice fermions in an optical trap: the dynamical mean-field perspective. J. Low Temp. Phys. 2011. Vol. 165. P. 195–212.
- 111. Staudt R., Dzierzawa M., Muramatsu A. Phase diagram of the threedimensional Hubbard model at half filling. *Eur. Phys. J. B.* 2000. Vol. 17. P. 411–415.
- 112. Fuchs S., Gull E., Pollet L., Burovski E., Kozik E., Pruschke T., Troyer M. Thermodynamics of the 3D Hubbard Model on Approaching the Néel Transition. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106. P. 030401.
- 113. Kent P. R. C., Jarrell M., Maier T. A., Pruschke T. Efficient calculation of the antiferromagnetic phase diagram of the three-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 72. P. 060411.
- 114. Sandvik A. W. Critical Temperature and the Transition from Quantum to Classical Order Parameter Fluctuations in the Three-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 5196–5199.
- 115. Talapov A. L., Blöte H. W. J. The magnetization of the 3D Ising model. J. Phys. A. 1996. Vol. 29, No. 17. P. 5727–5733.

- 116. Hubener A., Snoek M., Hofstetter W. Magnetic phases of two-component ultracold bosons in an optical lattice. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 245109.
- 117. Ş. G. Söyler, Capogrosso-Sansone B., Prokof'ev N. V., Svistunov B. V. Signalternating interaction mediated by strongly correlated lattice bosons. *New J. Phys.* 2009. Vol. 11, No. 7. P. 073036.
- 118. Helmes R. W., Costi T. A., Rosch A. Mott transition of fermionic atoms in a three-dimensional optical trap. *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. P. 056403.
- 119. Snoek M., Titvinidze I., Töke C., Byczuk K., Hofstetter W. Antiferromagnetic order of strongly interacting fermions in a trap: real-space dynamical mean-field analysis. *New J. Phys.* 2008. Vol. 10, No. 9. P. 093008.
- 120. De Leo L., Bernier J.-S., Kollath C., Georges A., Scarola V. W. Thermodynamics of the three-dimensional Hubbard model: Implications for cooling cold atomic gases in optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 83. P. 023606.
- 121. Paiva T., Loh Y. L., Randeria M., Scalettar R. T., Trivedi N. Fermions in 3D Optical Lattices: Cooling Protocol to Obtain Antiferromagnetism. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. P. 086401.
- 122. Colomé-Tatché M., Klempt C., Santos L., Vekua T. Adiabatic spin cooling using high-spin Fermi gases. New J. Phys. 2011. Vol. 13, No. 11. P. 113021.
- 123. Dalmonte M., Dieckmann K., Roscilde T., Hartl C., Feiguin A. E., Schollwöck U., Heidrich-Meisner F. Dimer, trimer, and Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov liquids in mass- and spin-imbalanced trapped binary mixtures in one dimension. *Phys. Rev. A*. 2012. Vol. 85. P. 063608.
- 124. Wang J., Guo H., Chen Q. Exotic phase separation and phase diagrams of a Fermi-Fermi mixture in a trap at finite temperature. *Phys. Rev. A.* 2013. Vol. 87. P. 041601.
- 125. von Keyserlingk C. W., Conduit G. J. Itinerant ferromagnetism in an interacting Fermi gas with mass imbalance. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 83. P. 053625.

- 126. Cui X., Ho T.-L. Phase Separation in Mixtures of Repulsive Fermi Gases Driven by Mass Difference. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. P. 165302.
- 127. Gottwald T., van Dongen P. G. J. Antiferromagnetic order of repulsively interacting fermions on optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2009. Vol. 80. P. 033603.
- 128. Wunsch B., Fritz L., Zinner N. T., Manousakis E., Demler E. Magnetic structure of an imbalanced Fermi gas in an optical lattice. *Phys. Rev. A*. 2010. Vol. 81. P. 013616.
- 129. Koetsier A., van Liere F., Stoof H. T. C. Imbalanced antiferromagnet in an optical lattice. *Phys. Rev. A*. 2010. Vol. 81. P. 023628.
- 130. Snoek M., Titvinidze I., Hofstetter W. Canted antiferromagnetic order of imbalanced Fermi-Fermi mixtures in optical lattices by dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83. P. 054419.
- 131. Winograd E. A., Chitra R., Rozenberg M. J. Phase diagram of the asymmetric Hubbard model and an entropic chromatographic method for cooling cold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 195118.
- 132. Freericks J. K., Zlatić V. Exact dynamical mean-field theory of the Falicov-Kimball model. *Rev. Mod. Phys.* 2003. Vol. 75. P. 1333–1382.
- 133. Kozik E., Burovski E., Scarola V. W., Troyer M. Néel temperature and thermodynamics of the half-filled three-dimensional Hubbard model by diagrammatic determinant Monte Carlo. *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87. P. 205102.
- 134. Stoof H. T. C., Gubbels K. B., Dickerscheid D. B. M. Ultracold Quantum Fields. Springer, 2009.
- 135. Wessel S. Critical entropy of quantum Heisenberg magnets on simple-cubic lattices. *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 052405.
- 136. Sykes M. F., Hunter D. L., McKenzie D. S., Heap B. R. Specific heat of a three dimensional Ising ferromagnet above the Curie temperature. II. J. Phys. A. 1972. Vol. 5, No. 5. P. 667.

- 137. He L., Li Y., Altman E., Hofstetter W. Quantum phases of Bose-Bose mixtures on a triangular lattice. *Phys. Rev. A*. 2012. Vol. 86. P. 043620.
- 138. Chandrasekhar B. A note on the maximum critical field of high-field superconductors. *Appl. Phys. Lett.* 1962. Vol. 1, No. 1. P. 7–8.
- Clogston A. M. Upper limit for the critical field in hard superconductors. *Phys. Rev. Lett.* 1962. Vol. 9. P. 266–267.
- 140. Lobo C., Recati A., Giorgini S., Stringari S. Normal State of a Polarized Fermi Gas at Unitarity. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97. P. 200403.
- 141. Shin Y.-I., Schunck C. H., Schirotzek A., Ketterle W. Phase diagram of a twocomponent Fermi gas with resonant interactions. *Nature (London)*. 2008. Vol. 451. P. 689.
- 142. Bakr W. S., Gillen J. I., Peng A., Folling S., Greiner M. A quantum gas microscope for detecting single atoms in a Hubbard-regime optical lattice. *Nature (London)*. 2009. Vol. 462. P. 74.
- 143. Greif D., Uehlinger T., Jotzu G., Tarruell L., Esslinger T. Short-range quantum magnetism of ultracold fermions in an optical lattice. *Science*. 2013. Vol. 340, No. 6138. P. 1307–1310.
- 144. Corcovilos T. A., Baur S. K., Hitchcock J. M., Mueller E. J., Hulet R. G. Detecting antiferromagnetism of atoms in an optical lattice via optical Bragg scattering. *Phys. Rev. A.* 2010. Vol. 81. P. 013415.
- 145. Bruun G. M., Syljuåsen O. F., Pedersen K. G. L., Andersen B. M., Demler E., Sørensen A. S. Antiferromagnetic noise correlations in optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2009. Vol. 80. P. 033622.
- 146. Jotzu G., Messer M., Görg F., Greif D., Desbuquois R., Esslinger T. Creating state-dependent lattices for ultracold fermions by magnetic gradient modulation. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 073002.

- 147. Hart R. A., Duarte P. M., Yang T.-L., Liu X., Paiva T., Khatami E. et al. Observation of antiferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms. *Nature (London)*. 2015. Vol. 519, No. 7542. P. 211–214.
- 148. Greif D., Jotzu G., Messer M., Desbuquois R., Esslinger T. Formation and dynamics of antiferromagnetic correlations in tunable optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 260401.
- 149. Haller E., Hudson J., Kelly A., Cotta D. A., Peaudecerf B., Bruce G. D., Kuhr S. Single-atom imaging of fermions in a quantum-gas microscope. *Nat. Phys.* 2015. Vol. 11, No. 9. P. 738–742.
- 150. Cheuk L. W., Nichols M. A., Okan M., Gersdorf T., Ramasesh V. V., Bakr W. S. et al. Quantum-gas microscope for fermionic atoms. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 114. P. 193001.
- 151. Parsons M. F., Huber F., Mazurenko A., Chiu C. S., Setiawan W., Wooley-Brown K. et al. Site-Resolved Imaging of Fermionic ⁶Li in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 114. P. 213002.
- 152. Edge G. J. A., Anderson R., Jervis D., McKay D. C., Day R., Trotzky S., Thywissen J. H. Imaging and addressing of individual fermionic atoms in an optical lattice. *Phys. Rev. A*. 2015. Vol. 92. P. 063406.
- 153. Omran A., Boll M., Hilker T. A., Kleinlein K., Salomon G., Bloch I., Gross C. Microscopic Observation of Pauli Blocking in Degenerate Fermionic Lattice Gases. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 263001.
- 154. Greif D., Parsons M. F., Mazurenko A., Chiu C. S., Blatt S., Huber F. et al. Site-resolved imaging of a fermionic Mott insulator. *Science*. 2016. Vol. 351, No. 6276. P. 953–957.
- 155. Batista C. D. Electronic Ferroelectricity in the Falicov-Kimball Model. *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 89. P. 166403.

- 156. Ho T.-L., Zhou Q. Obtaining the phase diagram and thermodynamic quantities of bulk systems from the densities of trapped gases. *Nat. Phys.* 2010. Vol. 6, No. 2. P. 131–134.
- 157. Carr L. D., Shlyapnikov G. V., Castin Y. Achieving a BCS Transition in an Atomic Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. P. 150404.
- Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Phys. Rev. B*. 1976. Vol. 14. P. 3438–3445.
- 159. Imriška J., Iazzi M., Wang L., Gull E., Greif D., Uehlinger T. et al. Thermodynamics and Magnetic Properties of the Anisotropic 3D Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. P. 115301.
- 160. Mermin N. D., Wagner H. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Phys. Rev. Lett.* 1966. Vol. 17. P. 1133–1136.
- 161. Jördens R., Strohmaier N., Günter K., Moritz H., Esslinger T. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature*. 2008. Vol. 455, No. 7210. P. 204– 207.
- 162. Schneider U., Hackermüller L., Will S., Best T., Bloch I., Costi T. A. et al. Metallic and Insulating Phases of Repulsively Interacting Fermions in a 3D Optical Lattice. *Science*. 2008. Vol. 322, No. 5907. P. 1520–1525.
- 163. Scarola V. W., Pollet L., Oitmaa J., Troyer M. Discerning incompressible and compressible phases of cold atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102. P. 135302.
- 164. Khatami E., Rigol M. Thermodynamics of strongly interacting fermions in twodimensional optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 84. P. 053611.

- 165. Sherson J. F., Weitenberg C., Endres M., Cheneau M., Bloch I., Kuhr S. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. *Nature (London)*. 2010. Vol. 467, No. 7311. P. 68–72.
- 166. Krauser J. S., Heinze J., Fläschner N., Götze S., Jürgensen O., Lühmann D.-S. et al. Coherent multi-flavour spin dynamics in a fermionic quantum gas. *Nat. Phys.* 2012. Vol. 8. P. 813.
- 167. Taie S., Yamazaki R., Sugawa S., Takahashi Y. An SU(6) Mott insulator of an atomic Fermi gas realized by large-spin Pomeranchuk cooling. *Nat. Phys.* 2012. Vol. 8. P. 825.
- 168. Heinze J., Krauser J. S., Fläschner N., Sengstock K., Becker C., Ebling U. et al. Engineering Spin Waves in a High-Spin Ultracold Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. P. 250402.
- 169. Krauser J. S., Ebling U., Fläschner N., Heinze J., Sengstock K., Lewenstein M. et al. Giant Spin Oscillations in an Ultracold Fermi Sea. *Science*. 2014. Vol. 343, No. 6167. P. 157–160.
- 170. Bernier J.-S., Kollath C., Georges A., De Leo L., Gerbier F., Salomon C., Köhl M. Cooling fermionic atoms in optical lattices by shaping the confinement. *Phys. Rev. A*. 2009. Vol. 79. P. 061601.
- 171. Lubasch M., Murg V., Schneider U., Cirac J. I., Bañuls M.-C. Adiabatic Preparation of a Heisenberg Antiferromagnet Using an Optical Superlattice. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. P. 165301.
- 172. Hazzard K. R. A., Gurarie V., Hermele M., Rey A. M. High-temperature properties of fermionic alkaline-earth-metal atoms in optical lattices. *Phys. Rev.* A. 2012. Vol. 85. P. 041604.
- 173. Cherng R. W., Refael G., Demler E. Superfluidity and magnetism in multicomponent ultracold fermions. *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99. P. 130406.

- 174. Rapp A., Hofstetter W., Zaránd G. Trionic phase of ultracold fermions in an optical lattice: A variational study. *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 144520.
- 175. Titvinidze I., Privitera A., Chang S.-Y., Diehl S., Baranov M. A., Daley A., Hofstetter W. Magnetism and domain formation in SU(3)-symmetric multispecies Fermi mixtures. *New J. Phys.* 2011. Vol. 13, No. 3. P. 035013.
- 176. Kanász-Nagy M., Zaránd G. Global superfluid phase diagram of a threecomponent fermion mixture with magnetic ordering. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 064519.
- 177. Rapp A., Rosch A. Ground-state phase diagram of the repulsive SU(3) Hubbard model in the Gutzwiller approximation. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 83. P. 053605.
- 178. Inaba K., Suga S.-i. Superfluid, staggered state, and Mott insulator of repulsively interacting three-component fermionic atoms in optical lattices. *Mod. Phys. Lett.* 2013. Vol. B27. P. 1330008.
- 179. Tóth T. A., Läuchli A. M., Mila F., Penc K. Three-Sublattice Ordering of the SU(3) Heisenberg Model of Three-Flavor Fermions on the Square and Cubic Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 265301.
- 180. Assaad F. F. Phase diagram of the half-filled two-dimensional SU(N) Hubbard-Heisenberg model: A quantum Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 71. P. 075103.
- 181. Paramekanti A., Marston J. B. SU(N) quantum spin models: a variational wavefunction study. J. Phys.: Condens. Matter. 2007. Vol. 19, No. 12. P. 125215.
- 182. Corboz P., Läuchli A. M., Penc K., Troyer M., Mila F. Simultaneous Dimerization and SU(4) Symmetry Breaking of 4-Color Fermions on the Square Lattice. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. P. 215301.

- 183. Cai Z., Hung H.-H., Wang L., Wu C. Quantum magnetic properties of the SU(2N) Hubbard model in the square lattice: A quantum Monte Carlo study. Phys. Rev. B. 2013. Vol. 88. P. 125108.
- 184. Honerkamp C., Hofstetter W. Ultracold Fermions and the SU(N) Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. P. 170403.
- 185. Hermele M., Gurarie V., Rey A. M. Mott insulators of ultracold fermionic alkaline earth atoms: Underconstrained magnetism and chiral spin liquid. *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 103. P. 135301.
- 186. Gorshkov A. V., Hermele M., Gurarie V., Xu C., Julienne P. S., Ye J. et al. Two-orbital SU(N) magnetism with ultracold alkaline-earth atoms. *Nat. Phys.* 2010. Vol. 6. P. 289.
- 187. Sinkovicz P., Zamora A., Szirmai E., Lewenstein M., Szirmai G. Spin liquid phases of alkaline-earth-metal atoms at finite temperature. *Phys. Rev. A*. 2013. Vol. 88. P. 043619.
- 188. Georgi H. Lie Algebras in Particle Physics. Cambridge, MA: Westview Press, 1999.
- 189. Wu C., Zhang S.-C. Sufficient condition for absence of the sign problem in the fermionic quantum Monte Carlo algorithm. *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 71. P. 155115.
- 190. Boehnke L., Hafermann H., Ferrero M., Lechermann F., Parcollet O. Orthogonal polynomial representation of imaginary-time Green's functions. *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 84. P. 075145.
- 191. Hafermann H., Patton K. R., Werner P. Improved estimators for the self-energy and vertex function in hybridization-expansion continuous-time quantum Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 85. P. 205106.
- 192. Szirmai E., Lewenstein M. Exotic magnetic orders for high-spin ultracold fermions. *Europhys. Lett.* 2011. Vol. 93, No. 6. P. 66005.

- 193. Cai Z., Hung H.-h., Wang L., Zheng D., Wu C. Pomeranchuk Cooling of SU(2N) Ultracold Fermions in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. P. 220401.
- 194. Stellmer S., Grimm R., Schreck F. Detection and manipulation of nuclear spin states in fermionic strontium. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 84. P. 043611.
- 195. Suzuki M. Quantum Monte Carlo Methods. Berlin: Springer, 1986.
- 196. Fradkin E. Field Theories Of Condensed Matter Physics. New York: Cambridge University Press, 2013.
- 197. Cazalilla M. A., Rey A. M. Ultracold Fermi gases with emergent SU(N) symmetry. *Reports on Progress in Physics*. 2014. Vol. 77, No. 12. P. 124401.
- 198. Ottenstein T. B., Lompe T., Kohnen M., Wenz A. N., Jochim S. Collisional Stability of a Three-Component Degenerate Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 101. P. 203202.
- 199. DeSalvo B. J., Yan M., Mickelson P. G., Martinez de Escobar Y. N., Killian T. C. Degenerate Fermi Gas of ⁸⁷Sr. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 030402.
- 200. Cappellini G., Mancini M., Pagano G., Lombardi P., Livi L., Siciliani de Cumis M. et al. Direct observation of coherent interorbital spin-exchange dynamics. *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 113. P. 120402.
- 201. Pagano G., Mancini M., Cappellini G., Lombardi P., Schafer F., Hu H. et al. A one-dimensional liquid of fermions with tunable spin. *Nat. Phys.* 2014. Vol. 10, No. 3. P. 198–201.
- 202. Scazza F., Hofrichter C., Höfer M., De Groot P. C., Bloch I., Fölling S. Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold SU(N)-symmetric fermions. *Nat. Phys.* 2014. Vol. 10, No. 10. P. 779–784.

- 203. Hofrichter C., Riegger L., Scazza F., Höfer M., Fernandes D. R., Bloch I., Fölling S. Direct Probing of the Mott Crossover in the SU(N) Fermi-Hubbard Model. *Phys. Rev. X*. 2016. Vol. 6. P. 021030.
- 204. Wu C. Quantum gases: Mott made easy. *Nat. Phys.* 2012. Vol. 8, No. 11.
 P. 784–785.
- 205. Wu C. Hidden symmetry and quantum phases in spin-3/2 cold atomic systems. Mod. Phys. Lett. B. 2006. Vol. 20, No. 27. P. 1707–1738.
- 206. Zhou Z., Cai Z., Wu C., Wang Y. Quantum monte carlo simulations of thermodynamic properties of SU(2n) ultracold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 90. P. 235139.
- 207. Inaba K., Koga A., Suga S.-i., Kawakami N. Finite-temperature Mott transitions in the multiorbital Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 72. P. 085112.
- 208. Blümer N., Gorelik E. V. Mott transitions in the half-filled SU(2M) symmetric Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87. P. 085115.
- 209. Hoshino S., Werner P. Electronic orders in multiorbital Hubbard models with lifted orbital degeneracy. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93. P. 155161.
- 210. Yanatori H., Koga A. Finite-temperature phase transitions in the SU(N) Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94. P. 041110.
- 211. Capponi S., Lecheminant P., Totsuka K. Phases of one-dimensional SU(N) cold atomic Fermi gases – From molecular Luttinger liquids to topological phases. Annals of Physics. 2016. Vol. 367. P. 50–95.
- 212. Decamp J., Jünemann J., Albert M., Rizzi M., Minguzzi A., Vignolo P. Highmomentum tails as magnetic-structure probes for strongly correlated SU(κ) fermionic mixtures in one-dimensional traps. *Phys. Rev. A*. 2016. Vol. 94. P. 053614.

- 213. Held K., Vollhardt D. Microscopic conditions favoring itinerant ferromagnetism: Hund's rule coupling and orbital degeneracy. *Eur. Phys. J. B.* 1998. Vol. 5, No. 3. P. 473–478.
- 214. Moritomo Y., Asamitsu A., Kuwahara H., Tokura Y. Giant magnetoresistance of manganese oxides with a layered perovskite structure. *Nature (London)*. 1996. Vol. 380. P. 141–144.
- 215. Stollhoff G., Oleś A. M., Heine V. Stoner exchange interaction in transition metals. *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 41. P. 7028–7041.
- 216. Kollar M., Strack R., Vollhardt D. Ferromagnetism in correlated electron systems: Generalization of Nagaoka's theorem. *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 53. P. 9225–9231.
- 217. Hoshino S., Werner P. Superconductivity from emerging magnetic moments.
 Phys. Rev. Lett. 2015. Vol. 115. P. 247001.
- 218. Hausoel A., Karolak M., Sasioglu E., Lichtenstein A., Held K., Katanin A. et al. Local magnetic moments in iron and nickel at ambient and Earth's core conditions. *Nat. Comm.* 2017. Vol. 8. P. 16062.
- 219. Momoi T., Kubo K. Ferromagnetism in the Hubbard model with orbital degeneracy in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. P. R567–R570.
- 220. Werner P., Millis A. J. Hybridization expansion impurity solver: General formulation and application to Kondo lattice and two-orbital models. *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74. P. 155107.
- 221. Sakai S., Arita R., Aoki H. Itinerant Ferromagnetism in the Multiorbital Hubbard Model: A Dynamical Mean-Field Study. *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99. P. 216402.
- 222. Kubo K. Variational Monte Carlo study of ferromagnetism in the two-orbital Hubbard model on a square lattice. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 020407.

- 223. Läuchli A. M., Werner P. Krylov implementation of the hybridization expansion impurity solver and application to 5-orbital models. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 235117.
- 224. Chan C.-K., Werner P., Millis A. J. Magnetism and orbital ordering in an interacting three-band model: A dynamical mean-field study. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 235114.
- 225. Peters R., Pruschke T. Orbital and magnetic order in the two-orbital Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 035112.
- 226. Peters R., Kawakami N., Pruschke T. Orbital order, metal-insulator transition, and magnetoresistance effect in the two-orbital Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83. P. 125110.
- 227. Antipov A. E., Krivenko I. S., Anisimov V. I., Lichtenstein A. I., Rubtsov A. N. Role of rotational symmetry in the magnetism of a multiorbital model. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 155107.
- 228. Parragh N., Toschi A., Held K., Sangiovanni G. Conserved quantities of SU(2)invariant interactions for correlated fermions and the advantages for quantum Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 155158.
- 229. Zhang X., Bishof M., Bromley S. L., Kraus C. V., Safronova M. S., Zoller P. et al. Spectroscopic observation of SU(N)-symmetric interactions in Sr orbital magnetism. *Science*. 2014. Vol. 345, No. 6203. P. 1467–1473.
- 230. Riegger L., Darkwah Oppong N., Höfer M., Fernandes D. R., Bloch I., Fölling S. Localized magnetic moments with tunable spin exchange in a gas of ultracold fermions. *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. P. 143601.
- 231. Zener C. Interaction between the *d*-shells in the transition metals. II.
 Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure. *Phys. Rev.* 1951. Vol. 82. P. 403–405.

- 232. Held K., Vollhardt D. Electronic correlations in manganites. *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 84. P. 5168–5171.
- 233. Imai Y., Kawakami N. Correlation effects on the double exchange model in a ferromagnetic metallic phase. J. Phys. Soc. Jpn. 2000. Vol. 69, No. 9. P. 3063– 3067.
- 234. Nagai K., Momoi T., Kubo K. Magnetic order in the double exchange model in infinite dimensions. J. Phys. Soc. Jpn. 2000. Vol. 69, No. 6. P. 1837–1844.
- 235. Georges A., de' Medici L., Mravlje J. Strong Correlations from Hund's Coupling. Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2013. Vol. 4, No. 1. P. 137–178.
- 236. Wallerberger M., Hausoel A., Gunacker P., Kowalski A., Parragh N., Goth F. et al. w2dynamics: Local one- and two-particle quantities from dynamical mean field theory. *Comp. Phys. Comm.* 2019. Vol. 235. P. 388 399.
- 237. Yin Z. P., Haule K., Kotliar G. Kinetic frustration and the nature of the magnetic and paramagnetic states in iron pnictides and iron chalcogenides. *Nat. Mat.* 2011. Vol. 10. P. 932–935.
- 238. de' Medici L., Mravlje J., Georges A. Janus-Faced Influence of Hund's Rule Coupling in Strongly Correlated Materials. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. P. 256401.
- 239. Dang H. T., Mravlje J., Georges A., Millis A. J. Electronic correlations, magnetism, and Hund's rule coupling in the ruthenium perovskites SrRuO₃ and CaRuO₃. *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 91. P. 195149.
- 240. de Gennes P. G. Effects of double exchange in magnetic crystals. *Phys. Rev.* 1960. Vol. 118. P. 141–154.
- 241. Ishihara S., Inoue J., Maekawa S. Effective hamiltonian in manganites: Study of the orbital and spin structures. *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 55. P. 8280–8286.
- 242. Kagan M., Khomskii D., Mostovoy M. Double-exchange model: phase separation versus canted spins. *Eur. Phys. J. B.* 1999. Vol. 12, No. 2. P. 217–223.

- 243. Yi H., Yu J., Lee S.-I. Suppression of ferromagnetic ordering in doped manganites: Effects of the superexchange interaction. *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 61. P. 428–431.
- 244. Ohsawa T., Inoue J.-i. Magnetic structure of low electron density manganites. *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 65. P. 134442.
- 245. Caciuffo R., Rinaldi D., Barucca G., Mira J., Rivas J., Señarís Rodríguez M. A. et al. Structural details and magnetic order of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ (x < 0.3). *Phys. Rev. B.* 1999. Vol. 59. P. 1068–1078.
- 246. Kuneš J., Křápek V., Parragh N., Sangiovanni G., Toschi A., Kozhevnikov A. V. Spin State of Negative Charge-Transfer Material SrCoO₃. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 117206.
- 247. Zobel C., Kriener M., Bruns D., Baier J., Grüninger M., Lorenz T. et al. Evidence for a low-spin to intermediate-spin state transition in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. P. 020402.
- 248. Knížek K., Jirák Z., Hejtmánek J., Novák P., Ku W. GGA + U calculations of correlated spin excitations in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 014430.
- 249. Yamaguchi S., Okimoto Y., Taniguchi H., Tokura Y. Spin-state transition and high-spin polarons in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 53. P. R2926–R2929.
- 250. Abbate M., Potze R., Sawatzky G. A., Fujimori A. Band-structure and clustermodel calculations of LaCoO₃ in the low-spin phase. *Phys. Rev. B.* 1994. Vol. 49. P. 7210–7218.
- 251. Korotin M. A. et al. Intermediate-spin state and properties of LaCoO₃. *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54. P. 5309–5316.
- 252. Knížek K., Novák P., Jirák Z. Spin state of LaCoO₃: Dependence on CoO₆ octahedra geometry. *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 71. P. 054420.
- 253. Eder R. Spin-state transition in LaCoO₃ by variational cluster approximation.
 Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. P. 035101.

- 254. Zhang G., Gorelov E., Koch E., Pavarini E. Importance of exchange anisotropy and superexchange for the spin-state transitions in $RCoO_3$ (R = rare earth) cobaltates. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 184413.
- 255. Křápek V., Novák P., Kuneš J., Novoselov D., Korotin D. M., Anisimov V. I. Spin state transition and covalent bonding in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 195104.
- 256. Bari R. A., Sivardière J. Low-spin-high-spin transitions in transition-metal-ion compounds. *Phys. Rev. B*. 1972. Vol. 5. P. 4466–4471.
- 257. Kuneš J., Křápek V. Disproportionation and Metallization at Low-Spin to High-Spin Transition in Multiorbital Mott Systems. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106. P. 256401.
- 258. Karolak M., Izquierdo M., Molodtsov S. L., Lichtenstein A. I. Correlation-Driven Charge and Spin Fluctuations in LaCoO₃. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 046401.
- 259. Altarawneh M. M., Chern G.-W., Harrison N., Batista C. D., Uchida A., Jaime M. et al. Cascade of Magnetic Field Induced Spin Transitions in LaCoO₃. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 037201.
- 260. Rotter M., Wang Z.-S., Boothroyd A. T., Prabhakaran D., Tanaka A., Doerr M. Mechanism of spin crossover in LaCoO₃ resolved by shape magnetostriction in pulsed magnetic fields. *Sci. Rep.* 2014. Vol. 4, No. 1. P. 7003.
- 261. Ikeda A., Nomura T., Matsuda Y. H., Matsuo A., Kindo K., Sato K. Spin state ordering of strongly correlating LaCoO₃ induced at ultrahigh magnetic fields. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93. P. 220401.
- 262. Kuneš J., Augustinský P. Excitonic instability at the spin-state transition in the two-band Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 89. P. 115134.
- 263. Werner P., Comanac A., de' Medici L., Troyer M., Millis A. J. Continuous-time solver for quantum impurity models. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97. P. 076405.

- 264. Kuneš J. Phase diagram of exciton condensate in doped two-band Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 90. P. 235140.
- 265. Jarrell M., Gubernatis J. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data. *Phys. Rep.* 1996. Vol. 269, No. 3. P. 133–195.
- 266. Kuneš J. Excitonic condensation in systems of strongly correlated electrons. J. Phys.: Condens. Matter. 2015. Vol. 27, No. 33. P. 333201.
- 267. Tatsuno T., Mizoguchi E., Nasu J., Naka M., Ishihara S. Magnetic field effects in a correlated electron system with spin-state degree of freedom – implications for an excitonic insulator –. J. Phys. Soc. Jpn. 2016. Vol. 85, No. 8. P. 083706.
- 268. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Jorio A. Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.
- 269. Kuneš J., Augustinský P. Excitonic condensation of strongly correlated electrons: The case of Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO₃. *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 90. P. 235112.
- 270. Blaha P., Schwarz K. Solid state calculations using {WIEN2k}. Comput. Mater.
 Sci. 2003. Vol. 28, No. 2. P. 259 273.
- 271. Kuneš J., Arita R., Wissgott P., Toschi A., Ikeda H., Held K. Wien2wannier: From linearized augmented plane waves to maximally localized Wannier functions. *Comp. Phys. Comm.* 2010. Vol. 181, No. 11. P. 1888–1895.
- 272. Mostofi A. A., Yates J. R., Pizzi G., Lee Y.-S., Souza I., Vanderbilt D., Marzari N. An updated version of wannier90: A tool for obtaining maximallylocalised Wannier functions. *Comp. Phys. Comm.* 2014. Vol. 185, No. 8. P. 2309 – 2310.
- 273. Haverkort M. W., Hu Z., Cezar J. C., Burnus T., Hartmann H., Reuther M. et al. Spin State Transition in LaCoO₃ Studied Using Soft X-ray Absorption Spectroscopy and Magnetic Circular Dichroism. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97. P. 176405.

- 274. Saitoh T., Mizokawa T., Fujimori A., Abbate M., Takeda Y., Takano M. Electronic structure and temperature-induced paramagnetism in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 55. P. 4257–4266.
- 275. Gütlich P., Goodwin H. Spin Crossover in Transition Metal Compounds II. Springer, New York, 2004.
- 276. Yoo C. S., Maddox B., Klepeis J.-H. P., Iota V., Evans W., McMahan A. et al. First-Order Isostructural Mott Transition in Highly Compressed MnO. *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 115502.
- 277. Gavriliuk A. G., Struzhkin V. V., Lyubutin I. S., Ovchinnikov S. G., Hu M. Y., Chow P. Another mechanism for the insulator-metal transition observed in Mott insulators. *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 155112.
- 278. Kuneš J., Lukoyanov A. V., Anisimov V. I., Scalettar R. T., Pickett W. E. Collapse of magnetic moment drives the Mott transition in MnO. *Nat. Mater.* 2008. Vol. 7, No. 3. P. 198–202.
- 279. Tsubouchi S., Kyômen T., Itoh M., Ganguly P., Oguni M., Shimojo Y. et al. Simultaneous metal-insulator and spin-state transitions in Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO₃. *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. P. 052418.
- 280. Tsubouchi S., Kyômen T., Itoh M., Oguni M. Electric, magnetic, and calorimetric properties and phase diagram of Pr_{1-x}Ca_xCoO₃ (0 < x < 0.55). *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 69. P. 144406.
- 281. Hejtmánek J., Jirák Z., Kaman O., Knížek K., Šantavá E., Nitta K. et al. Phase transition in pr_{0.5}ca_{0.5}coo₃ and related cobaltites. *Eur. Phys. J. B*. 2013. Vol. 86, No. 7. P. 305.
- 282. Fujita T., Miyashita T., Yasui Y., Kobayashi Y., Sato M., Nishibori E. et al. Transport and Magnetic Studies on the Spin State Transition of Pr_{1-x}Ca_xCoO₃ up to High Pressure. J. Phys. Soc. Jpn. 2004. Vol. 73, No. 7. P. 1987–1997.

- 283. Herrero-Martín J., García-Muñoz J. L., Kvashnina K., Gallo E., Subías G., Alonso J. A., Barón-González A. J. Spin-state transition in Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO₃ analyzed by x-ray absorption and emission spectroscopies. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 125106.
- 284. Hejtmánek J., Šantavá E., Knížek K., Maryško M., Jirák Z., Naito T. et al. Metal-insulator transition and the Pr^{3+}/Pr^{4+} valence shift in $(Pr_{1-y}Y_y)_{0.7}Ca_{0.3}CoO_3$. *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82. P. 165107.
- 285. Knížek K., Hejtmánek J., Maryško M., Novák P., Šantavá E., Jirák Z. et al. Spin-state crossover and low-temperature magnetic state in yttrium-doped Pr_{0.7}Ca_{0.3}CoO₃. *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 88. P. 224412.
- 286. Келдыш Л., Копаев Ю. Возможная неустойчивость полуметаллического состояния относительно кулоновского взаимодействия. Физ. тверд. тела. 1964. Т. 6. С. 2791–2803.
- 287. Halperin B., Rice T. The excitonic state at the semiconductor-semimetal transition. Solid State Physics / Ed. by David Turnbull Frederick Seitz, Henry Ehrenreich. Academic Press, New York, 1968. Vol. 21. P. 115–192.
- 288. Balents L. Excitonic order at strong coupling: Pseudospin, doping, and ferromagnetism. *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 62. P. 2346–2357.
- 289. Khaliullin G. Excitonic Magnetism in Van Vleck–type d⁴ Mott Insulators. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 111. P. 197201.
- 290. Jain A., Krautloher M., Porras J., Ryu G. H., Chen D. P., Abernathy D. L. et al. Higgs mode and its decay in a two-dimensional antiferromagnet. *Nat. Phys.* 2017. Vol. 13, No. 7. P. 633–637.
- 291. Yamaguchi T., Sugimoto K., Ohta Y. Low-energy excitation spectra in the excitonic phase of cobalt oxides. J. Phys. Soc. Jpn. 2017. Vol. 86, No. 4. P. 043701.

- 292. Nasu J., Watanabe T., Naka M., Ishihara S. Phase diagram and collective excitations in an excitonic insulator from an orbital physics viewpoint. *Phys. Rev. B.* 2016. Vol. 93. P. 205136.
- 293. Naito T., Fujishiro H., Nishizaki T., Kobayashi N., Hejtmánek J., Knížek K., Jirák Z. Suppression of the metal-insulator transition by magnetic field in (Pr_{1-y}Y_y)_{0.7}Ca_{0.3}CoO₃ (y=0.0625). J. Appl. Phys. 2014. Vol. 115, No. 23. P. 233914.
- 294. Ikeda A., Lee S., Terashima T. T., Matsuda Y. H., Tokunaga M., Naito T. Magnetic-field-induced spin crossover of Y-doped Pr_{0.7}Ca_{0.3}CoO₃. *Phys. Rev.* B. 2016. Vol. 94. P. 115129.
- 295. Bronold F. X., Fehske H. Possibility of an excitonic insulator at the semiconductor-semimetal transition. *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 74. P. 165107.
- 296. Brydon P. M. R., Timm C. Spin excitations in the excitonic spin-density-wave state of the iron pnictides. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 174401.
- 297. Kaneko T., Seki K., Ohta Y. Excitonic insulator state in the two-orbital Hubbard model: Variational cluster approach. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 85. P. 165135.
- 298. Hoshino S., Werner P. Electronic orders in multiorbital Hubbard models with lifted orbital degeneracy. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93. P. 155161.
- 299. Kaneko T., Ohta Y. Electric and magnetic multipoles and bond orders in excitonic insulators. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94. P. 125127.
- 300. Kuneš J., Geffroy D. Spontaneous Spin Textures in Multiorbital Mott Systems. *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 116. P. 256403.
- 301. Ho T.-L. Spinor Bose Condensates in Optical Traps. *Phys. Rev. Lett.* 1998.
 Vol. 81. P. 742–745.

- 302. Ohmi T., Machida K. Bose-Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases. J. Phys. Soc. Jpn. 1998. Vol. 67, No. 6. P. 1822– 1825.
- 303. Bascones E., Burkov A. A., MacDonald A. H. Theory of ferromagnetism in doped excitonic condensates. *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 89. P. 086401.
- 304. Watanabe H., Murayama H. Unified Description of Nambu-Goldstone Bosons without Lorentz Invariance. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108. P. 251602.
- 305. Mott N. F. The transition to the metallic state. *Philos. Mag.* 1961. Vol. 6, No. 62. P. 287–309.
- 306. Babkevich P., Prabhakaran D., Frost C. D., Boothroyd A. T. Magnetic spectrum of the two-dimensional antiferromagnet La₂CoO₄ studied by inelastic neutron scattering. *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82. P. 184425.
- 307. Drees Y., Li Z. W., Ricci A., Rotter M., Schmidt W., Lamago D. et al. Hourglass magnetic excitations induced by nanoscopic phase separation in cobalt oxides. *Nat. Comm.* 2014. Vol. 5. P. 5731.
- 308. Moritomo Y., Arima T., Tokura Y. Electronic Structure of Layered Perovskite LaSrMO₄ (M=Cr, Mn, Fe and Co). J. Phys. Soc. Jpn. 1995. Vol. 64, No. 11. P. 4117–4120.
- 309. Moritomo Y., Higashi K., Matsuda K., Nakamura A. Spin-state transition in layered perovskite cobalt oxides: La_{2-x}Sr_xCoO₄ (0.4≤x≤1.0). *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 55. P. R14725–R14728.
- 310. Chichev A. V., Dlouhá M., Vratislav S., Knížek K., Hejtmánek J., Maryško M. et al. Structural, magnetic, and transport properties of the single-layered perovskites $La_{2-x}Sr_xCoO_4$ (x = 1.0 1.4). *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 74. P. 134414.
- 311. Guo H., Hu Z., Pi T.-W., Tjeng L. H., Komarek A. C. Single Crystal Growth of Pure Co³⁺ Oxidation State Material LaSrCoO₄. *Crystals*. 2016. Vol. 6. P. 98.

- 312. Wang J., Zhang W., Xing D. Y. Magnetic structure of the layered perovskite LaSrCoO₄. *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 62. P. 14140–14144.
- 313. Sommer T., Vojta M., Becker K. Magnetic properties and spin waves of bilayer magnets in a uniform field. *Eur. Phys. J. B*. 2001. Vol. 23, No. 3. P. 329–339.
- 314. Afonso J. F., Kuneš J. Excitonic magnetism in d^6 perovskites. *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95. P. 115131.
- 315. Tanabe Y., Sugano S. On the absorption spectra of complex ions. I. J. Phys. Soc. Jpn. 1954. Vol. 9, No. 5. P. 753–766.
- 316. Goodenough J. B. Metallic oxides. Progress in Solid State Chemistry / Ed. by H. Reiss. Pergamon, Oxford, 1971. Vol. 5. P. 145–399.
- 317. Wu J., Leighton C. Glassy ferromagnetism and magnetic phase separation in $la_{1-x}sr_xcoo_3$. *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 174408.
- 318. Phelan D., Louca D., Rosenkranz S., Lee S.-H., Qiu Y., Chupas P. J. et al. Nanomagnetic Droplets and Implications to Orbital Ordering in La_{1-x}Sr_xCoO₃. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96. P. 027201.
- 319. Fuchs D., Pinta C., Schwarz T., Schweiss P., Nagel P., Schuppler S. et al. Ferromagnetic order in epitaxially strained LaCoo₃ thin films. *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 75. P. 144402.
- 320. Fujioka J., Yamasaki Y., Nakao H., Kumai R., Murakami Y., Nakamura M. et al. Spin-orbital superstructure in strained ferrimagnetic perovskite cobalt oxide. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 111. P. 027206.
- 321. Hsu H., Blaha P., Wentzcovitch R. M. Ferromagnetic insulating state in tensilestrained LaCoO₃ thin films from LDA + U calculations. *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 85. P. 140404.
- 322. Cao G., Qi T. F., Li L., Terzic J., Yuan S. J., DeLong L. E. et al. Novel Magnetism of Ir⁵⁺(5d⁴) Ions in the Double Perovskite Sr₂YIrO₆. *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. P. 056402.

- 323. Tsujimoto Y., Li J. J., Yamaura K., Matsushita Y., Katsuya Y., Tanaka M. et al. New layered cobalt oxyfluoride, Sr₂CoO₃F. *Chem. Commun.* 2011. Vol. 47. P. 3263–3265.
- 324. Tsujimoto Y., Sathish C. I., Hong K.-P., Oka K., Azuma M., Guo Y. et al. Crystal Structural, Magnetic, and Transport Properties of Layered Cobalt Oxyfluorides, $Sr_2CoO_{3+x}F_{1-x}$ ($0 \le x \le 0.15$). *Inorg. Chem.* 2012. Vol. 51, No. 8. P. 4802–4809.
- 325. Tsujimoto Y., Nakano S., Ishimatsu N., Mizumaki M., Kawamura N., Kawakami T. et al. Pressure-driven spin crossover involving polyhedral transformation in layered perovskite cobalt oxyfluoride. *Sci. Rep.* 2016. Vol. 6. P. 36253.
- 326. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* 1965. Vol. 140. P. A1133–A1138.
- 327. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.* 1964. Vol. 136. P. B864–B871.
- 328. Pavarini E. Electronic structure calculations with LDA+DMFT. Many-Electron Approaches in Physics, Chemistry and Mathematics, Mathematical Physics Studies / Ed. by V. Bach, L. Delle Site. Springer, 2014. P. 321.
- 329. Kowalski A., Hausoel A., Wallerberger M., Gunacker P., Sangiovanni G. State and superstate sampling in hybridization-expansion continuous-time quantum Monte Carlo. *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 99. P. 155112.
- 330. Geffroy D., Kaufmann J., Hariki A., Gunacker P., Hausoel A., Kuneš J. Collective modes in excitonic magnets: Dynamical mean-field study. *Phys. Rev. Lett.* 2019. Vol. 122. P. 127601.
- 331. Blume M., Emery V. J., Griffiths R. B. Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He³-He⁴ Mixtures. *Phys. Rev. A*. 1971. Vol. 4. P. 1071– 1077.

- 332. Hoston W., Berker A. N. Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling. *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol. 67. P. 1027–1030.
- 333. Merchant P., Normand B., Krämer K. W., Boehm M., McMorrow D. F., Rüegg C. Quantum and classical criticality in a dimerized quantum antiferromagnet. *Nat. Phys.* 2014. Vol. 10. P. 373.
- 334. Goodenough J. B. An interpretation of the magnetic properties of the perovskite-type mixed crystals La_{1-x}Sr_xCoO_{3-λ}. J. Phys. Chem. Solid. 1958. Vol. 6, No. 2. P. 287.
- 335. Heikes R., Miller R., Mazelsky R. Magnetic and electrical anomalies in LaCoO₃. *Physica.* 1964. Vol. 30, No. 8. P. 1600–1608.
- 336. Raccah P. M., Goodenough J. B. First-Order Localized-Electron \leftrightarrows Collective-Electron Transition in LaCoO₃. *Phys. Rev.* 1967. Vol. 155. P. 932.
- 337. Abbate M., Fuggle J. C., Fujimori A., Tjeng L. H., Chen C. T., Potze R. et al. Electronic structure and spin-state transition of LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 1993. Vol. 47. P. 16124.
- 338. Asai K., Yoneda A., Yokokura O., Tranquada J. M., Shirane G., Kohn K. Two Spin-State Transitions in LaCoO₃. J. Phys. Soc. Jpn. 1998. Vol. 67, No. 1. P. 290–296.
- 339. Stølen S., Grønvold F., Brinks H., Atake T., Mori H. Energetics of the spin transition in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 55. P. 14103.
- 340. de Groot F. M. F., Fuggle J. C., Thole B. T., Sawatzky G. A. 2p x-ray absorption of 3d transition-metal compounds: An atomic multiplet description including the crystal field. *Phys. Rev. B.* 1990. Vol. 42. P. 5459.
- 341. Podlesnyak A., Streule S., Mesot J., Medarde M., Pomjakushina E., Conder K. et al. Spin-State Transition in LaCoO₃: Direct Neutron Spectroscopic Evidence of Excited Magnetic States. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97. P. 247208.

- 342. Noguchi S., Kawamata S., Okuda K., Nojiri H., Motokawa M. Evidence for the excited triplet of Co³⁺ in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. P. 094404.
- 343. Maris G., Ren Y., Volotchaev V., Zobel C., Lorenz T., Palstra T. T. M. Evidence for orbital ordering in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 224423.
- 344. Ishikawa A., Nohara J., Sugai S. Raman Study of the Orbital-Phonon Coupling in LaCoO₃. *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 93. P. 136401.
- 345. Vogt T., Hriljac J. A., Hyatt N. C., Woodward P. Pressure-induced intermediate-to-low spin state transition in LaCoO₃. *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 140401.
- 346. Haverkort M. W. Theory of Resonant Inelastic X-Ray Scattering by Collective Magnetic Excitations. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 167404.
- 347. Chainani A., Mathew M., Sarma D. D. Electron-spectroscopy study of the semiconductor-metal transition in La_{1-x}Sr_xCoO₃. *Phys. Rev. B*. 1992. Vol. 46. P. 9976–9983.
- 348. Arima T., Tokura Y., Torrance J. B. Variation of optical gaps in perovskite-type 3d transition-metal oxides. *Phys. Rev. B*. 1993. Vol. 48. P. 17006–17009.
- 349. Tomiyasu K., Okamoto J., Huang H. Y., Chen Z. Y., Sinaga E. P., Wu W. B. et al. Coulomb Correlations Intertwined with Spin and Orbital Excitations in LaCoO₃. *Phys. Rev. Lett.* 2017. Vol. 119. P. 196402.
- 350. Hariki A., Wang R.-P., Sotnikov A., Tomiyasu T., Betto D., Brookes N. B. et al. Melting of excitonic dispersion in LaCoO₃: theory and experiment. ArXiv eprints. 2019. 1912.02564.
- 351. Bari R. A., Sivardière J. Low-spin-high-spin transitions in transition-metal-ion compounds. *Phys. Rev. B.* 1972. Vol. 5. P. 4466–4471.
- 352. Tomiyasu K., Nomura T., Kobayashi Y., Ishihara S., Ohira-Kawamura S., Kofu M. Emergent units of itinerant spin-state excitations in LaCoO₃. ArXiv e-prints. 2018. 1808.05888.

353. Freeland J. W., Ma J. X., Shi J. Ferromagnetic spin-correlations in strained LaCoO₃ thin films. *Appl. Phys. Lett.* 2008. Vol. 93, No. 21. P. 212501.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Slyusarenko Yu. V., Sotnikov A. G. Feasibility of using Bose-Einstein condensates for filtering optical pulses. *Low Temp. Phys.* 2010. Vol. 36. P. 671–676. Квартиль Q3 (2010).

2. Sotnikov A. Magnetic field dependence and the possibility to filter ultraslow light pulses in atomic gases with Bose–Einstein condensates. *Phys. Scr.* 2010. Vol. T140, P. 014061. Квартиль Q2 (2011).

3. Slyusarenko Y. and Sotnikov A. Propagation of relativistic charged particles in ultracold atomic gases with Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 2011. Vol. 83, P. 023601. Квартиль Q1 (2011).

4. Sotnikov A.G. On some peculiarities of propagation of weak electromagnetic pulses in Bose-Einstein condensates of alkali-metal atoms. *Opt. and Spectr.* 2011. Vol. 111, P. 675–682. Квартиль Q3 (2011).

5. Sotnikov A., Cocks D., and Hofstetter W. Advantages of mass-imbalanced ultracold fermionic mixtures for approaching quantum magnetism in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109, P. 065301. Квартиль Q1 (2012).

6. Sotnikov A., Snoek M., and Hofstetter W. Magnetic phases of mass- and population-imbalanced ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2013. Vol. 87, P. 053602. Квартиль Q1 (2013).

7. Sotnikov A. and Hofstetter W. Magnetic ordering of three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2014. Vol. 89, Р. 063601. Квартиль Q1 (2014).

8. Sotnikov A. Critical entropies and magnetic-phase-diagram analysis of ultracold three-component fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2015. Vol. 92, P. 023633. Квартиль Q1 (2015).

9. Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. A* 2015. Vol. 92, P. 043623. Квартиль Q1 (2015).

10. Sotnikov A. Perspectives of optical lattices with state-dependent tunneling in approaching quantum magnetism in the presence of the external harmonic trapping potential. *Phys. Lett. A* 2016. Vol. 380, P. 1184. Квартиль Q2 (2016).

11. Cichy A. and Sotnikov A. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. A* 2016. Vol. 93, P. 053624. Квартиль Q1 (2016).

12. Слюсаренко Ю.В., Сотніков А.Г. Унікальні ефекти відгуку ультрахолодних газів атомів лужних металів у стані з Бозе-Ейнштейнівським конденсатом на збудження електромагнітним полем. *Вісн. Нац. Акад. Наук Укр.* 2016. Т. 7, С. 19–26.

13. Sotnikov A. and Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. *Sci. Rep.* 2016. Vol. 6, P. 30510. Квартиль Q1 (2016).

14. Sotnikov A.G., Sereda K.V., and Slyusarenko Y.V. Chemical potentials and thermodynamic characteristics of the ideal Bose and Fermi gases in the region of quantum degeneracy. *Low Temp. Phys.* 2017. Vol. 43. P. 144–151. Квартиль Q3 (2017).

15. Golubeva A., Sotnikov A., Cichy A., Kuneš J., and Hofstetter W. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *Phys. Rev. B* 2017. Vol. 95. P. 125108. Квартиль Q1 (2017).

16. Sotnikov A. and Kuneš J. Competing phases in the model of Pr-based cobaltites. *Phys. Rev. B* 2017. Vol. 96. P. 245102. Квартиль Q1 (2017).

17. Fernández Afonso J., Sotnikov A., and J. Kuneš. Theoretical investigation

of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. *J. Phys.: Condens. Matter* 2018. Vol. 30, P. 135603. Квартиль Q1 (2018).

18. Sotnikov A., Cichy A., and Kuneš J. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *Phys. Rev. B* 2018. Vol. 97, P. 235157. Квартиль Q1 (2018).

19. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y., Singh A., Huang D.-J., Tomiyasu K., Du C.-H., Kuneš J., de Groot F. M. F. Excitonic dispersion of the intermediate-spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic X-ray scattering. *Phys. Rev. B* 2018. Vol. 98, P. 035149. Квартиль Q1 (2018).

20. Fernández Afonso J., Sotnikov A., Hariki A., and J. Kuneš. Pressureinduced spin-state ordering in Sr₂CoO₃F. *Phys. Rev. B* 2019. Vol. 99, P. 205118. Квартиль Q1 (2018).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

21. Slyusarenko Yu. V. and Sotnikov A. G. Effects in the linear response of atomic Bose-Einstein condensates to an external electromagnetic perturbation. 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics: Book of abstracts (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.

22. Sotnikov A. and Hofstetter W. Quantum phase transitions of ultracold atoms in optical lattices: dynamical mean field theory studies. *3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics*: Book of abstracts (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 168–169.

23. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 35 (Stuttgart, Germany, March 12–16, 2012). Stuttgart, 2012. P. 1.

24. Sotnikov A. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. 6th International Workshop "Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence":
Book of abstracts (Lyon, France, June 5–8, 2012). Lyon, 2012. P. 90.

25. Slyusarenko Yu. V. and Sotnikov A. G. Perspectives of Bose-Einstein condensates for filtering of light pulses and acceleration of relativistic charged particles. *4th Conference "Statistical Physics: Modern Trends and Applications"*: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2012). Lviv, 2012. P. 188.

26. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 29 (Hannover, Germany, March 18–22, 2013). Hannover, 2013. P. 2.

27. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *International Conference "The New Generation of Strongly Correlated Electron Systems*": Book of abstracts (Sestri Levante, Italy, July 1–5, 2013). Sestri Levante, 2013. P. 22.

28. Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 34 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 2.

29. Sotnikov A. and Hofstetter W. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 50 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 1.

30. Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Real-Space Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric fermionic Hubbard model and its extensions. Magnetic orderings and Hund's coupling. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section Q 15 (Heidelberg, Germany, March 23–27, 2015). Heidelberg, 2015. P. 4.

31. Sotnikov A.G. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *VI International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics"*: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 2–5, 2015).

Kharkiv, 2015. P. 46.

32. Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the Two-Band Hubbard Model. Magnetic orderings and Hund's coupling. *The International Workshop FINESS-2015: Finite-Temperature Non-Equilibrium Superfluid Systems*: Book of abstracts (Sopot, Poland, September 14–18, 2015). Sopot, 2015. P. 44.

33. Cichy A., Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical Mean-Field Approach. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.

34. Golubeva A., Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric Fermi-Hubbard model and its extensions. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.

35. Sotnikov A. and Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. DPG Spring Meeting of the Section SKM: Book of abstracts, section MA 68 (Dresden, Germany, March 19–24, 2017). Dresden, 2017. P. 1.

36. Sotnikov A. Field-induced exciton condensation in d⁶ perovskites. NGSCES 8th International Conference: Book of abstracts (Barcelona, Spain, September 4–8, 2017). Barcelona, 2017. P. 64.

37. Sotnikov A. Influence of continuous symmetries on magnetic ordering in the Hubbard model with multiple spin and orbital components. *FOR1807 Winter School* "Numerical Methods in Strongly Correlated Quantum Systems": Book of abstracts (Marburg, Germany, February 19–23, 2018). Marburg, 2018. P. 33.

38. Cichy A. and Sotnikov A. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 5 (Erlangen, Germany, March 4–9, 2018). Erlangen, 2018. P. 1.

39. Fernández Afonso J., Sotnikov A., and Kuneš J. Theoretical investigation

of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11– 16, 2018). Berlin, 2018. P. 146

40. Sotnikov A., and Kuneš J. Competing phases in the model of Pr-based cobaltites. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 199.

41. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y., Singh A., Huang D.-J., Tomiyasu K., Du C.-H., Kuneš J., de Groot F. M. F. Excitonic dispersion of the intermediate-spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic X-ray scattering. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 205.

42. Cichy A. and Sotnikov A. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *42th International Conference of Theoretical Physics: correlations and coherence on different scales, CCDS 2018*: Book of abstracts (Ustroń, Poland, September 9–14, 2018). Ustroń, 2018. P. 105.

43. Zambrano Y., Sotnikov A., and Cichy A. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section SAMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 18.

44. Cichy A., Sotnikov A., and Zambrano Y. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section SAMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 42–43.

45. Fernández Afonso J., Sotnikov A., Hariki A., and Kuneš J. Pressureinduced spin-state ordering in Sr_2CoO_3F . *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 6.

46. Cichy A. and Sotnikov A. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Magnetism Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 37.

47. Raspopova D.M. and Sotnikov A.G. Slowing of electromagnetic pulses in the proximity of phase transition to Bose-Einstein condensate in ultracold atomic gases. *X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP* 2019: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019. P. 153.

48. Sotnikov A.G. Orbital ordering of ultracold fermionic mixtures in optical lattices. X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019.
P. 157.

49. Sotnikov A. and Kuneš J. Ferromagnetism of LaCoO₃. 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2019). Lviv, 2019. P. 68.

50. Cichy A., Sotnikov A., and Zambrano Y. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *XIX National Conference on Superconductivity*: Book of abstracts (Bronisławów, Poland, October 6–11, 2019). Bronisławów, 2019. P. 42.