

АНОТАЦІЯ

Булахов М.С. **Роль нелокальної взаємодії в ультрахолодних бозе-газах з урахуванням спінових ступенів свободи.** — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика і наноматеріали (Галузь знань 10 – Природничі науки). — Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2023.

Дисертація присвячена дослідженню впливу нелокальності взаємодії: по-перше, на термодинамічні характеристики слабковзаємодійного бозе-газу як у верхньому околі температури переходу (вище, але близько до неї) до стану з бозе-ейнштейнівським конденсатом (БЕК), так і в стані з БЕК за нульової температури; по-друге, на ефекти, пов'язані зі спіном, а також на структуру спектру одночастинкових збуджень слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним нульовим або одиничним спіном в стані з БЕК за нульової температури.

Розділ 1 присвячено викладанню матеріалу, який склав основу й послугував точкою відліку досліджень здобувача, а саме: термодинамічної теорії збурень, теорії Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу й узагальнення канонічних перетворень Боголюбова.

Розділ 2 присвячено побудові термодинаміки бозе-газу в верхньому околі температури фазового переходу до стану з БЕК із урахуванням поправок першого і другого порядку за взаємодією до основних термодинамічних величин. Теоретичний опис побудований у рамках термодинамічної теорії збурень. Результати проаналізовано за допомогою чисельних методів для локальної й нелокальної моделей потенційної взаємодії.

У *розділі 3* аналізується система рівнянь, яка дає змогу визначити такі термодинамічні характеристики слабковзаємодійного ультрахолодного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у стані з БЕК, як: хімічний потенціал і

густину частинок конденсату. Означена система рівнянь враховує внесок від квадратичних за операторами народження й знищення доданків і дозволяє досліджувати систему для низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії. Повний аналіз проведено з використанням чисельних методів для двох нелокальних моделей потенціалу взаємодії: модель півпрозорих сфер і модель з профілем гаусового (нормального) розподілу.

У розділі 4 вивчається термодинаміка й магнітні властивості всіх можливих станів БЕК у бозе-газі частинок зі спіном $S = 1$ за наявності зовнішнього магнітного поля. На відміну від попередніх досліджень спінорних конденсатів міжатомна взаємодія вважається нелокальною. У цьому випадку відповідний гамільтоніан будується з урахуванням спінових і квадрупольних ступенів свободи, які елегантно вводяться на рівних правах крізь призму алгебри $SU(3)$. Зв'язок із зовнішнім магнітним полем забезпечується за допомогою як спінового оператора (лінійний ефект Зеемана), так і за допомогою оператора квадрупольного моменту (квадратичний ефект Зеемана).

Наукова новизна дисертаційної роботи полягає у таких її результатах:

1. застосовано термодинамічну теорію збурень для обчислення поправок першого й другого порядку за взаємодією до термодинамічних величин: тиску, хімічного потенціалу, ентропії й теплоємності за сталого об'єму — котрі характеризують слабковзаємодійний бозе-газ атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан з БЕК;
2. вдосконалено алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса за допомогою введення понять матриці й визначника Віка;
3. показано, що вплив нелокальності взаємодії на характеристики слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан із БЕК незначний, а, отже, припущення контактності взаємодії під час опису зазначеної системи є достатнім;
4. для слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у стані з БЕК розв'язана система рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату за нульової температури, з урахуванням

внеску квадратичних за операторами народження і знищення доданків та використанням низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії;

5. показано, що внесок квадратичних доданків, згаданих вище, може бути такий самий за порядком величини, як і тих доданків, які походять з s -числової частини гамільтоніану;

6. продемонстровано, що внесок квадратичних членів у хімічний потенціал призводить, загалом, до енергетичної щілини в одночастинковому енергетичному спектрі збуджень;

7. знайдено й досліджено новий режим стану з порушеною осьовою симетрією слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним одиничним спіном;

8. побудовано для згаданого режиму діаграму магнітних станів, яка заснована на їхній намагніченості;

9. в рамках теорії збурень для магнітного стану БЕК із порушеною осьовою симетрією в слабковзаємодійному бозе-газі атомів із повним одиничним спіном отримано енергетичний спектр одночастинкових збуджень за нульової температури й з урахуванням поправок, що спричинені нелокальністю взаємодії.

Щодо практичного значення отриманих результатів, то передусім вони, як можна зрозуміти з теми дисертації, допомагають сформуванню розуміння того, наскільки значною є роль нелокальної взаємодії з точки зору впливу на фізичні властивості ультрахолодного бозе-газу. Зокрема, деякі характеристики однієї й тієї ж бозе-системи залежно від того, чи знаходиться вона в стані з БЕК, чи ні, можуть як досить суттєво змінювати свою теоретично передбачувану поведінку, так і майже не зазнавати якісних змін унаслідок нелокальності взаємодії, відповідно. Вочевидь, такий факт є важливим не тільки під час планування експериментальних досліджень, а й під час тлумачення їхніх результатів.

Окремо слід звернути увагу на вдосконалення алгоритму підрахунку середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса. Цей результат стане в нагоді будь-кому, хто стикнеться з необхідністю підрахунку середніх за згаданою

теоре́мою. Саме тому таке вдосконалення має стати бажаним доповненням до курсу кінетичної теорії газоподібних систем, фізики систем багатьох частинок тощо, які викладаються студентам відповідних спеціальностей.

Підґрунтям для подальших теоретичних й експериментальних досліджень також можуть стати такі питання: експериментальне підтвердження передбаченого режиму стану з порушеною осью симетрії, щілин в отриманих спектрах одночастинкових збуджень; подальші дослідження системи рівнянь, яка визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату слабковзаємодійного бозе-газу, а також інших термодинамічних характеристик (ентропії, питомої теплоємності за сталого об'єму тощо) за ненульової температури.

Загалом, результати роботи є корисними для вивчення таких макроскопічних явищ у квантових системах, як: надплинність, надпровідність, надплинність кристалу тощо — оскільки явище БЕК стоїть за ними.

Ключові слова: квантова система, ультрахолодний бозе-газ, бозе-ейнштейнівський конденсат, фазовий перехід, термодинаміка, енергетичний спектр, теорія Боголюбова, теорія збурень, хімічний потенціал, спі́н, надплинність, надпровідність, магнітне поле, магнітна властивість, чисельний метод.

ABSTRACT

Bulakhov M.S. The role of non-local interaction in ultracold Bose gases with consideration of spin degrees of freedom. Qualification scholarly paper: a manuscript.

Thesis submitted for obtaining the Doctor of Philosophy in Natural Sciences, Speciality 105 – Applied physics and nanomaterials. – V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2023.

The dissertation is devoted to studying the effect of the nonlocality of interaction on: first, thermodynamic quantities of a weakly interacting Bose gas both in the upper neighbourhood of the transition temperature (higher, but close to it) to the state with Bose-Einstein condensate (BEC) and in the state with

BEC at zero temperature; second, spin-related effects and the structure of the single-particle excitation spectrum of a weakly interacting Bose gas of spinless or spin-1 atoms with BEC at zero temperature.

Chapter 1 deals with the presentation of the basic approaches and the reference point of the author's research: thermodynamic perturbation theory, Bogoliubov theory of a weakly interacting Bose gas, and generalization of Bogoliubov canonical transformation.

Chapter 2 is devoted to the constructing thermodynamics of a Bose gas in the upper neighbourhood of the phase transition temperature to the state with BEC taking into account the first and second order corrections in interaction to the main thermodynamic quantities. The theoretical description is based on the thermodynamic perturbations theory. The results are analyzed by using numerical methods for local and non-local models of the interaction potential.

Chapter 3 analyzes the system of equations that allows one to determine such thermodynamic characteristics of a weakly interacting ultracold Bose gas of spinless atoms with BEC as chemical potential and condensate particles density. It involves the contribution of quadratic terms in the creation and annihilation operators and enables to study the system for a number of model non-local interaction potentials. The complete analysis was carried out by employing the numerical methods for two models of non-local interaction potential: a model of semitransparent spheres and a model with Gauss (normal) distribution profile.

In *Chapter 4* the author explores thermodynamics and magnetic properties of all possible magnetic states of a Bose gas of spin-1 atoms with BEC in the presence of an external magnetic field. In contrast to previous studies of spinor condensates, the interatomic interaction is considered to be non-local. In this case, the corresponding Hamiltonian must be constructed taking into account the spin and quadrupole degrees of freedom, which are elegantly introduced on an equal footing through the prism of the $SU(3)$ algebra. The coupling with the external magnetic field is provided both by the spin operator (the linear Zeeman effect) and by the quadrupole moment operator (the quadratic Zeeman effect).

The scientific novelty of the dissertation consists in its following results:

1. the author employed the thermodynamic perturbation theory to compute the first and second order corrections in interaction to the following thermodynamic quantities: pressure, chemical potential, entropy, and heat capacity at constant volume, which characterize a weakly interacting Bose gas of spinless atoms in the upper neighbourhood of the phase transition temperature to the state with BEC;
2. the author improved the algorithm to find the averages according to the Wick-Bloch-Dominis theorem by introducing the concepts of the Wick matrix and determinant;
3. the author showed that the effect of the non-locality of interaction on the thermodynamics quantities of a weakly interacting Bose gas of spinless atoms in the upper neighbourhood of the phase transition temperature to the state with BEC is insignificant, and, therefore, it is sufficient to assume that the interaction as a contact one when describing the specified system;
4. for a number of model non-local interaction potentials, the author solved the system of equations which determines the chemical potential and the condensate density of a weakly interacting Bose gas of spinless atoms with BEC up to quadratic terms in the creation and annihilation operators.
5. the author showed that the contribution of the quadratic terms mentioned above can be of the same order of magnitude as those that originate from the c -number part of the Hamiltonian;
6. the author demonstrated that the contribution of the quadratic terms to the chemical potential leads, in general, to a gap in the energy spectrum of single-particle excitation;
7. the author found and studied the new regime of the broken-axisymmetry state of a weakly interacting Bose gas of spin-1 atoms with BEC;
8. the author constructed the diagram of magnetic states with the foregoing regime in terms of their magnetization;
9. within the perturbation theory the author obtained the energy spectrum of

single-particle excitation for the broken-axisymmetry state of a weakly interacting Bose gas of spin-1 atoms with BEC in a magnetic field at zero temperature taking into account the corrections caused by the interaction nonlocality.

As for the practical importance of the obtained results, first of all, as can be understood from the dissertation topic, they help to form the insight of how significant is the role of non-local interaction when describing the physical properties of ultracold Bose gas. In particular, due to the nonlocality of interaction, the physical characteristics of the same Bose system can either change their theoretically predicted behaviour quite significantly or undergo almost no qualitative changes depending on whether it is in a state with BEC or not, respectively. Obviously, this fact is important not only when planning an experimental study but also when interpreting its results.

In addition, it is worth stressing the result associated with the improved algorithm for averages computing according to the Wick-Bloch-Dominicis theorem. It will be helpful to anyone who deals with the indicated problem. Therefore, the obtained result should be an apt addition to the course of the kinetic theory of gaseous systems, physics of many-body systems, etc., which are taught to students of the relevant specialties.

The following issues can also become the basis for further theoretical and experimental study: experimental confirmation of the predicted regime of the broken-axisymmetry state and experimental evidence of the energy gap in the single-particle excitation spectra; the further analysis of the system of equations that determines the chemical potential and the condensate particles density of a weakly interacting Bose gas at finite temperature as well as the computation of other thermodynamic quantities (entropy, specific heat capacity at constant volume, etc.).

In general, the obtained results are useful for studying such macroscopic phenomena in quantum systems as superfluidity, superconductivity, supersolidity, etc., since their nature is closely related to BEC.

Key words: quantum system, ultracold Bose gas, Bose-Einstein condensate,

phase transition, thermodynamics, energy spectrum, Bogoliubov theory, perturbation theory, chemical potential, spin, superfluidity, superconductivity, magnetic field, magnetic property, numerical method.