

АНОТАЦІЯ

Унукович В. І. Дослідження термодинамічних властивостей та фазових станів ультрахолодних фермі-газів з високими спіновими симетріями в оптичних ґратках. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 Прикладна фізика і наноматеріали (10 Природничі науки). — Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, 2025.

Дисертація присвячена дослідженню низькотемпературних рівноважних властивостей взаємодійних фермі-газів, що знаходяться в просторово-періодичних потенціалах ґраток та мають неперервні високі симетрії в спіновому просторі; в рамках проведених теоретичних досліджень визначено вплив явного порушення неперервних симетрій та просторової анізотропії тривимірних ґраток на фазові переходи та типи магнітно-впорядкованих станів у таких системах.

У **вступі** коротко обґрунтовано актуальність теми дисертації, визначено мету та основні завдання дослідження, також об'єкт, предмет та методи дослідження. Сформульовано наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Наведено відомості про публікації, особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертації. Також приведені відомості про структуру та обсяг дисертаційної роботи.

Розділ 1 присвячено огляду та аналізу літератури за темою дисертації. У цьому розділі розглянуто фізичні аспекти квантових систем багатьох частинок і, зокрема, ультрахолодних газів, до яких розвинуто подальшу методологію теоретичного опису. Увагу приділено необхідності модифікувати підходи для врахування впливу просторово-періодичних потенціалів і надано огляд основних типів багаточастинкових станів у таких системах. Наведено основні кроки для отримання вихідної моделі Габбарда, яка необхідна для подальшого аналізу. Розглянуто формалізм теорії збурень із застосуванням перетворень Шріффера–Вольфа для випадку сильного зв'язку, а також

особливості опису без застосування теорії збурень за допомогою числового алгоритму динамічної теорії середнього поля.

Розділ 2 присвячено детальному аналізу ефектів магнітного впорядкування в $SU(4)$ -симетричних фермі-газах за низьких температур у начвертьзаповненій найнижчій зоні оптичної ґратки. Приділено увагу принципів відмінності досліджуваної системи від випадку напівзаповненої зони, де магнітне впорядкування на квадратній або кубічній ґратці не зазнає ефектів геометричної фрустрації, а магнітне впорядкування відбувається за відносно простим двопідґратковим сценарієм. У досліджуваній системі в граничному випадку нульових температур та помірних амплітуд взаємодій може відбуватись так зване плакетне магнітне впорядкування зі збільшеною елементарною коміркою порівняно з двопідґратковими типами впорядкування. З метою наведення кількісних оцінок для експериментальних реалізацій з ультрахолодними газами нейтральних атомів стронцію-87 або ітербію-173 проведено кількісний аналіз критичних значень ентропії, що необхідні для досягнення різних типів магнітно-впорядкованих станів у гармонічних потенціалах оптичних пасток, що утворюються спеціально налаштованими лазерами.

У **розділі 3** наведено результати дослідження впливу просторової анізотропії тривимірної кубічної ґратки на низькотемпературні магнітно-впорядковані фазові стани. Показано, що в граничних випадках відокремлених площин з квадратною геометрією ґратки та ізотропної кубічної ґратки може відбуватись магнітне впорядкування за різних сценаріїв. Зазначено, що не всі магнітні фази можуть бути поєднані неперервним чином за зміни амплітуди тунелювання між двовимірними площинами, тому може спостерігатись гістерезисна поведінка таких систем. Побудовано просторові розподіли густини атомів і намагніченості в гармонічному потенціалі оптичної пастки.

Розділ 4 присвячено виведенню ефективних спінових моделей та дослідженню енергетичних спектрів і термодинамічних характеристик чотирьохкомпонентних фермі-газів у випадках явного порушення спінової симетрії

$SU(4)$. Проаналізовано енергетичні стани та ефективні магнітні сталі взаємодії у випадках, коли чотири взаємодійні спінові компоненти в гамільтоніані Габбарда незалежно утворюють підгрупи симетрії типу «три на один» або «два на два» відповідно до їх амплітуд тунелювання або взаємодії, і вивчено поведінку відповідних ефективних моделей Гейзенберга в границі сильної взаємодії. Отримано та проаналізовано просторові розподіли густини спінових компонентів у гармонічній оптичній пастці для кожного випадку явного порушення симетрії.

Наукова новизна дисертаційної роботи полягає у таких її результатах:

1. Розвинено теоретичний підхід до вивчення магнітного впорядкування в $SU(4)$ -симетричних фермі-газах за низьких температур у начвертьзаповненій найнижчій зоні тривимірної оптичної ґратки за різних значень просторової анізотропії амплітуди тунелювання.
2. Обчислено критичні значення ентропії, що необхідні для досягнення різних типів магнітно-впорядкованих станів у взаємодійних фермі-газах зі спіноюю симетрією $SU(4)$, що знаходяться в гармонічних потенціалах оптичних пасток, що утворені спеціально налаштованими лазерами.
3. Показано, що в граничних випадках відокремлених площин з квадратною геометрією ґратки та ізотропної кубічної ґратки в газі з симетрією $SU(4)$ може відбуватись магнітне впорядкування різних типів, що не можуть бути поєднані неперервним чином, тим самим може спостерігатись гістерезисна поведінка в таких системах.
4. Побудовано просторові розподіли густини атомів і намагніченості в гармонічному потенціалі оптичної пастки за різних значень просторової анізотропії амплітуди тунелювання.
5. Виведено ефективні спінові моделі та досліджено енергетичні спектри і термодинамічні характеристики чотирикомпонентних фермі-газів у випадках явного порушення спінової симетрії $SU(4)$ за рахунок різних амплітуд взаємодії та різних амплітуд тунелювання спінових компонентів.
6. Отримано просторові розподіли густини спінових компонентів у гармо-

нічній оптичній пастці для випадків явного порушення симетрії в гамільтоніані Фермі–Габбарда, що описує взаємодійний чотирикомпонентний фермі-газ.

Результати даної роботи мають фундаментальне значення для покращення розуміння фізичної поведінки складних квантових систем, розвинення передових методів теоретичних досліджень, а також значення для прикладного застосування, зокрема, для розробки та створення нових пристроїв для зберігання та обробки інформації та в квантових обчисленнях.

Ключові слова: квантові гази, оптичні ґратки, спінові симетрії, спінові моделі, константи зв'язку, просторова анізотропія, теорія збурень, динамічна теорія середнього поля, домішка, густина станів, термодинамічні властивості, фазові переходи, діелектрик, провідність, антиферромагнетик.

ABSTRACT

Unukovych V.I. Study of thermodynamic properties and phases of ultracold fermionic gases with high spin symmetries in optical lattices. — Qualification scientific work printed as manuscript.

Dissertation for a Doctor of Philosophy degree in speciality 105 Applied Physics and Nanomaterials (10 Natural Sciences). – V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2025.

The dissertation is devoted to the study of low-temperature equilibrium properties of interacting Fermi gases placed in spatially periodic lattice potentials and possessing continuous high symmetries in spin space; within the framework of theoretical studies, the influence of the explicit breaking of continuous symmetries and spatial anisotropy of three-dimensional lattices on phase transitions and types of magnetically ordered states in these systems is determined.

In **introduction**, we briefly outline the relevance of the dissertation topic, define the goal and main objectives of the research, as well as the object, subject and methods of the research. The scientific novelty and practical significance of the results are formulated. Information about publications, the personal author contribution and presentations of the dissertation results on the conferences and workshops are provided. Information about the structure and scope of the thesis is also provided.

Chapter 1 is devoted to a review and analysis of the literature on the topic of the thesis. This section considers the physical aspects of quantum systems of many particles and, in particular, ultracold gases, for which a further methodology of theoretical description has been developed. Attention is paid to the need to modify approaches to take into account the influence of spatially periodic potentials and an overview of the main types of many-particle states in these systems is provided. We outline the main steps for obtaining the initial Hubbard model, which is necessary for further analysis. We show the relevance of the perturbation theory and the Schrieffer-Wolff transformations for the case of

strong coupling. We also extend description beyond the perturbation theory by introducing the dynamical mean-field theory (DMFT) numerical approach.

Chapter 2 is devoted to a detailed analysis of the effects of magnetic ordering in $SU(4)$ -symmetric Fermi gases at low temperatures in a quarter-filled lowest band of optical lattice. Attention is drawn to the fundamental difference of the studied system from the case of a half-filled band, where magnetic ordering on a square or cubic lattice is not affected by geometric frustration, and magnetic ordering develops according to a relatively simple two-sublattice scenario. For the system under study, in the limiting case of zero temperatures and moderate interaction amplitudes, the so-called plaquette magnetic ordering with an enlarged unit cell compared to two-sublattice types of ordering can develop. In order to provide quantitative estimates for experimental implementations with ultracold gases of neutral atoms of strontium-87 or ytterbium-173, we performed a quantitative analysis of the critical entropy values required to achieve different types of magnetically ordered states in the harmonic potentials of optical traps formed by specially tuned lasers.

In **chapter 3** we present results of the study of the influence of spatial anisotropy of a three-dimensional cubic lattice on low-temperature magnetically ordered phases. It is shown that in the limiting cases of decoupled planes with square lattice geometry and an isotropic cubic lattice, magnetic ordering can occur under different scenarios. It is noted that not all magnetic phases can be linked continuously with changes in the tunneling amplitude between two-dimensional planes, therefore, hysteretic behavior in these systems can be observed. We also obtain spatial distributions of atomic density and magnetization in the harmonic potential of an optical trap.

Chapter 4 is devoted to the derivation of effective spin models and the study of the energy spectra and thermodynamic characteristics of four-component Fermi gases in cases of explicit breaking of the $SU(4)$ spin symmetry. The energy states and effective magnetic couplings are analyzed in cases where the four interacting spin components in the Hubbard Hamiltonian independently form

three-by-one or two-by-two symmetry subgroups according to their tunneling or interaction amplitudes, and the behavior of the corresponding effective Heisenberg models in the strong interaction limit is studied. The spatial distributions of the density of spin components in a harmonic optical trap are obtained and analyzed for each case of explicit symmetry breaking.

Scientific novelty of the thesis lies in its following results:

1. We developed a theoretical approach to study magnetic ordering in $SU(4)$ -symmetric Fermi gases at low temperatures in the quarter-filled lowest band of a three-dimensional optical lattice for different values of the spatial anisotropy of the tunneling amplitude in different directions.
2. We calculated the critical entropy values necessary to achieve different types of magnetically ordered states in interacting Fermi gases with $SU(4)$ symmetry in the harmonic potentials of optical traps formed by specially tuned lasers.
3. It is shown that in the limiting cases of decoupled planes with square lattice geometry and an isotropic cubic lattice in a gas with $SU(4)$ symmetry, magnetic ordering of different types can develop, which cannot be linked in a continuous manner, thus hysteretic behavior can be observed in these systems.
4. We obtained spatial distributions of atomic density and magnetization in the harmonic potential of an optical trap for different values of the spatial anisotropy of the tunneling amplitude.
5. We derived effective spin models and analyzed the energy spectra and thermodynamic characteristics of four-component Fermi gases in cases of explicit breaking of the $SU(4)$ spin symmetry due to different interaction amplitudes and different tunneling amplitudes of the spin components.
6. We obtained spatial distributions of the density of spin components in a harmonic optical trap for cases of explicit symmetry breaking in the Fermi-Hubbard Hamiltonian describing an interacting four-component Fermi gas.

The results of this work are of fundamental importance for improving the understanding of the physical behavior of complex quantum systems, developing advanced methods of theoretical research, as well as for applications, in particular,

for the development and creation of new devices for storing and processing information and in quantum computing.

Keywords: quantum gases, optical lattices, spin symmetries, spin models, coupling constants, spatial anisotropy, perturbation theory, dynamical mean field theory, impurity, density of states, thermodynamic properties, phase transitions, dielectric, conductivity, antiferromagnet.