

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Унукович Владислав Ігорович

УДК 536.775, 538.9

ДИСЕРТАЦІЯ
«ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ
ТА ФАЗОВИХ СТАНІВ УЛЬТРАХОЛОДНИХ ФЕРМІ-ГАЗІВ З
ВИСОКИМИ СПІНОВИМИ СИМЕТРІЯМИ В ОПТИЧНИХ
ГРАТКАХ»

Спеціальність 105 Прикладна фізика і наноматеріали

(Галузь знань 10 Природничі науки)

Подається на здобуття ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

В.І. Унукович

Науковий керівник: Сотніков Андрій Геннадійович, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, член-кореспондент НАН України

Харків – 2025

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.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації у періодичних наукових виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus або Web of Science:

1. **Unukovych V.** and Sotnikov A. SU(4)-symmetric Hubbard model at quarter filling: Insights from the dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. B* 2021. Vol. 104. P. 245106. DOI: [10.1103/PhysRevB.104.245106](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.245106) (Q1 (2021)).
2. **Unukovych V.** and Sotnikov A. Anisotropy-driven magnetic phase transitions in SU(4)-symmetric Fermi gas in three-dimensional optical lattices. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2024. Vol. 57. P. 185301. DOI: [10.1088/1361-6455/ad6b63](https://doi.org/10.1088/1361-6455/ad6b63) (Q2 (2024)).
3. **Unukovych V.**, Litvinova S., and Sotnikov A. Explicit symmetry breaking and effective spin models for four-component interacting Fermi gases in lattice potentials. *Low Temp. Phys.* 2025. Vol. 51. P. 10. DOI: [10.1063/10.0034554](https://doi.org/10.1063/10.0034554) (Q4 (2025)).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Low-temperature phases of SU(4)-symmetric fermionic mixtures in optical lattices. *II International Advanced Study Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics”*: Abstracts (June 6 – 12, Kharkiv, Ukraine, 2021). Kharkiv, 2021. P. 213.
2. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Low-temperature phases of SU(4)-symmetric fermionic mixtures in optical lattices. *The European Conference Physics of Magnetism 2021*: Abstracts (June 28 – July 2, Poznań, Poland, 2021). Poznań, 2021. P. 70.
3. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Evolution of magnetic ordering of SU(4)-symmetric fermionic mixture within the transition from 3D to 2D-

layered optical lattice. *III International Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics”*: Abstracts (June 5 – 11, Kharkiv, Ukraine, 2023). Kharkiv, 2023. P. 199.

4. **Unukovych V.** Quantum correlations and magnetic properties of ultracold Fermi gases with $SU(4)$ spin symmetry in anisotropic cubic optical lattices *US-Ukraine Quantum Forum 2023*: Abstracts (August 28 – 31, Kharkiv, Ukraine, 2023). Kharkiv, 2023. P. 28.

5. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Effects of symmetry breaking in four component interacting Fermi gas in periodic potential. *IV International Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics”*: Abstracts (June 3 – 7, Kharkiv, Ukraine, 2024). Kharkiv, 2024. P. 220.

6. **Унукович В.І.**, Сотніков А.Г. Ультрахолодні чотирикомпонентні фермі-гази в оптичних ґратках. Вплив порушення просторової та спінової симетрій на фізичні властивості. *24-та Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини*: Збірка тез (24 – 25 жовтня 2024 р., м. Львів). Львів, 2024. С. 18.

7. Bulakhov M.S., Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., **Unukovych V.I.**, and Sotnikov A.G. Long-range correlations and magnetism of spinor ultracold atomic gases. *IEEE Magnetism “Magnetism for Ukraine Initiative” Workshop*: Abstracts (14 November, 2024, Kyiv, Ukraine). Kyiv, 2024. P. 53.

ЗМІСТ

ВСТУП	15
РОЗДІЛ 1. УЛЬТРАХОЛОДНІ ФЕРМІ-ГАЗИ В ОПТИЧНИХ ҐРАТКАХ ТА ЗАГАЛЬНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ЇХ ОПИСУ	23
1.1. Ультрахолодні квантові гази	23
1.2. Оптичні ґратки та їх експериментальні реалізації	27
1.3. Модель Габбарда	30
1.4. Границя сильного зв'язку та ефективна спінова модель	35
1.5. Динамічна теорія середнього поля	41
РОЗДІЛ 2. МАГНІТНІ ВПОРЯДКУВАННЯ В $SU(4)$ -СИМЕТРИЧНИХ ФЕРМІ-ГАЗАХ ЗА НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР У НАЧВЕРТЬЗАПОВНЕНІЙ ОПТИЧНІЙ ҐРАТЦІ	50
2.1. Фазова діаграма чотирикомпонентних фермі сумішей	50
2.2. Аналіз ентропії та відповідні просторові розподіли	57
РОЗДІЛ 3. ВПЛИВ ПРОСТОРОВОЇ АНІЗОТРОПІЇ ОПТИЧНОЇ ҐРАТКИ НА МАГНІТНІ ФАЗОВІ СТАНИ	63
3.1. Магнітні фази за різних значень анізотропії	63
3.2. Розподіл псевдоспінових компонентів у гармонічному потенціалі оптичної пастки	74
РОЗДІЛ 4. ЕФЕКТИВНІ СПІНОВІ МОДЕЛІ ФЕРМІ-ГАЗІВ З ПОРУШЕНОЮ СИМЕТРІЄЮ $SU(4)$ ТА ЇХ ФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ В ОПТИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛАХ	79
4.1. Ефективна спінова модель	80
4.1.1. Випадок заповнення зони на одну чверть	81
4.1.2. Випадок наполовину заповненої зони	92
4.2. Просторові розподіли густини частинок у гармонічних потенціалах пасток	106
4.3. Висновки до розділу 4	108

ВИСНОВКИ	111
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	115
ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ	
ДИСЕРТАЦІЇ	126

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

DMFT	– динамічна теорія середнього поля (dynamical mean-field theory)
RDMFT	– узагальнення DMFT для координатного простору (real-space dynamical mean-field theory)
АФМ	– антиферромагнетик
ПМ	– парамагнетик
$\hat{\mathcal{H}}$	– гамільтоніан (оператор Гамільтона)
$\hat{c}^\dagger$ ($\hat{c}$)	– оператор народження (знищення) ферміонів
$\hat{n}$	– оператор густини ферміонів
t	– амплітуда тунелювання
U	– амплітуда локальної взаємодії
μ	– хімічний потенціал
J	– константа магнітного зв'язку
G	– функція Гріна
ω_n	– мацубарівська частота для ферміонів
$D(\varepsilon)$	– густина станів
λ^k	– узагальнена матриця Гелл-Мана ($k = 1, \dots, 15$)
$\sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''}$	– сума за всіма індексами, що не повторюються

ВСТУП

Ультрахолодні атомні гази в просторово періодичних потенціалах слугують зручною платформою для детального дослідження звичайних систем, таких як сильнокорельовані діелектрики, магнетики, спінові рідини тощо, а також екзотичних станів матерії з високою симетрією. Зокрема, з ультрахолодними атомами стронцію-87 і ітербію-173 можна реалізувати групи високої симетрії [1–3]. Центральний об'єкт досліджень – чотирикомпонентна квантова система з високими спіновими симетріями – може бути отримана з ультрахолодними атомами шляхом видалення надмірної кількості компонентів із певними проєкціями ядерного спіну. Чотири внутрішні стани атомів, що залишаються, можна розглядати як різні кольори, аромати або *псевдоспінові компоненти*.

З експериментальної точки зору, вважається, що низькотемпературні режими в газах лужноземельних (або подібних до них) атомів стають більш доступними завдяки досягненням у методах охолодження [4, 5] та квантової газової мікроскопії [6, 7]. Це викликає важливі питання щодо того, чи залишаються фази багатьох тіл, характерні для високосиметричних моделей локалізованих спінів, стабільними з включенням процесів стрибків і теплових збуджень. Крім того, для практичних цілей необхідні не тільки якісні, але й кількісні оцінки та вибір оптимальних фізичних параметрів для досягнення конкретних корельованих режимів у квантових системах багатьох тіл.

Модель Габбарда є однією з базових моделей у квантовій фізиці багатьох частинок і описує явища, які повсюдно поширені в природі. З одного боку, це найпростіша модель, основною мотивацією створення якої була потреба в способі вирішення поведінки корельованих (а не невзаємодійних) електронів у твердих тілах. Спочатку модель була введена для пояснення мандрівного феромагнетизму в твердотільних сполуках оксидів перехідних металів, таких як залізо або нікель [8–10], але за останні 60 років її актуальність вийшла далеко за межі початкового контексту – зокрема, завдяки

розвиненню технік лазерного охолодження та утримання газів атомів, що мають додаткові внутрішні (спінові або псевдоспінові) ступені вільності.

Досі теоретичні дослідження узагальненої моделі Габбарда для випадків високих спінових симетрій з акцентами на реалізаціях в оптичних ґратках здебільшого зосереджувалися на випадку наполовину заповненої нижньої зони (див., наприклад, праці [11–15]). У той же час, через складність відповідного теоретичного аналізу (зокрема, через проблему знака у відповідних квантових моделюваннях методом Монте-Карло), випадок середнього заповнення однією частинкою на вузол є набагато менш вивченим [16–19], незважаючи на його значення. Наприклад, у випадку великої амплітуди локальної взаємодії порівняно з амплітудою тунелювання та однієї частинки на вузол ґратки високосиметрична модель Габбарда може бути перетворена у відповідну модель Гейзенберга, яка була досліджена за допомогою низки передових теоретичних підходів (див., наприклад, праці [20–22]). Згідно з деякими з них, у межі нульової температури на квадратній ґратці може розвиватися специфічне розташування атомів, яке називають *плакетним упорядкуванням*. У той же час стверджується, що з урахуванням теплових збуджень, тобто зі збільшенням ентропії, система може зазнати переходу в антиферромагнітний стан зі звичайною двосторонньою структурою антиферромагнітного впорядкування за типом шахової дошки [22].

Мета дослідження – дослідити термодинамічні властивості ультрахолодних чотирикомпонентних фермі-газів з високими спіновими симетріями в періодичних потенціалах ґраток у термодинамічній границі, тобто для однорідних нескінченних систем, а також для газів зі скінченною кількістю частинок за наявності зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки; крім того, вивчити ефекти, що пов’язані з можливою просторовою анізотропією в амплітудах тунелювання в оптичній ґратці, а також наслідки явного порушення високої спінової симетрії на ефективних моделях опису, енергетичних спектрах та просторових розподілах густини атомів газу в

оптичних пастках.

Завдання дослідження:

- провести теоретичний числовий аналіз залежностей ентропії чотирикомпонентного $SU(4)$ -симетричного фермі-газу від амплітуди локальної взаємодії за різних значень температури;
- побудувати просторові розподіли густини частинок та густини ентропії в чотирикомпонентному $SU(4)$ -симетричному фермі-газі для випадку зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки для нейтральних атомів;
- провести теоретичний числовий аналіз для отримання фазової діаграми $SU(4)$ -симетричного фермі-газу на кубічній ґратці за допомогою динамічної теорії середнього поля;
- отримати залежності критичних температур переходів до магнітно-впорядкованих станів від амплітуди тунелювання ферміонів між площинами в анізотропній кубічній ґратці;
- проаналізувати зони стабільності різних магнітно-впорядкованих станів фермі-газів у випадку додаткового зовнішнього потенціалу пастки;
- узагальнити та застосувати перетворення Шріффера–Вольфа для отримання ефективних спінових моделей у випадках явного порушення спінових симетрій у моделі Фермі–Габбарда з чотирма псевдоспіновими компонентами;
- провести числовий аналіз з порівняння енергетичних спектрів моделей Габбарда та Гейзенберга для різних випадків порушення високих спінових симетрій;
- побудувати просторові розподіли густини частинок у гармонічному потенціалі оптичної пастки для чотирикомпонентного фермі-газу нейтральних атомів з різними амплітудами взаємодії та тунелювання.

Об’єкт дослідження – чотирикомпонентний взаємодійний фермі-газ атомів, що знаходиться в періодичному потенціалі оптичної ґратки, утвореної зовнішніми лазерами за наявності або відсутності додаткового гармонічного

потенціалу оптичної пастки.

Предмет дослідження – вплив ефектів локальної взаємодії, термальних флуктуацій, просторової анізотропії ґратки, явного порушення високої спінової симетрії за рахунок різних амплітуд взаємодії або різних амплітуд тунелювання псевдоспінових компонентів чотирикомпонентних фермі-газів на низькотемпературні рівноважні багаточастинкові властивості, фазові стани та спостережувані фізичні величини.

Методи дослідження:

- метод вторинного квантування для побудови гамільтоніанів і операторів фізичних величин у термінах операторів народження і знищення частинок;
- квантовомеханічна теорія збурень з точністю до поправок другого порядку за збудженням до гамільтоніана системи;
- перетворення Шріффера–Вольфа для побудови ефективних спінових моделей з гамільтоніана Габбарда;
- динамічна теорія середнього поля;
- числовий метод точної діагоналізації гамільтоніанів у скінченновимірному гільбертовому просторі;
- узагальнення динамічної теорії середнього поля для координатного простору;
- метод арифметично-геометрично середніх при обрахуванні еліптичних інтегралів для густини станів у анізотропній ґратці;
- метод моделювання Монте-Карло при обрахуванні еліптичних інтегралів для густини станів у анізотропній ґратці;
- метод наближення локальної густини для знаходження просторових розподілів фізичних величин у гармонічних потенціалах пасток.

Наукова новизна отриманих результатів:

1. Уперше отримано залежності ентропії чотирикомпонентного $SU(4)$ -симетричного фермі-газу від амплітуди локальної взаємодії за різних значень температури в рамках підходу динамічної теорії середнього поля.
2. Уперше побудовано просторові розподіли густини частинок та густини ентропії в чотирикомпонентному $SU(4)$ -симетричному фермі-газі для випадку зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки для нейтральних атомів.
3. Уперше отримано фазову діаграму з магнітно-впорядкованими станами для $SU(4)$ -симетричного фермі-газу на кубічній ґратці за допомогою динамічної теорії середнього поля.
4. Уперше побудовано залежності критичних температур переходів до магнітно-впорядкованих станів від амплітуди тунелювання ферміонів між площинами в анізотропній кубічній ґратці.
5. Уперше отримано числові оцінки зон стабільності різних магнітно-впорядкованих станів фермі-газів у випадку додаткового зовнішнього потенціалу пастки.
6. Уперше застосовано перетворення Шріффера–Вольфа для отримання ефективних спінових моделей у випадках явного порушення спінових симетрій у моделі Фермі–Габбарда з чотирма псевдоспіновими компонентами.
7. Уперше проведено числовий аналіз з порівняння енергетичних спектрів моделей Габбарда та Гейзенберга для різних випадків порушення високих спінових симетрій у чотирикомпонентному взаємодійному фермі-газі.
8. Уперше побудовано просторові розподіли густини частинок у гармонічному потенціалі оптичної пастки для чотирикомпонентного фермі-газу нейтральних атомів з різними амплітудами взаємодії та тунелювання.

Особистий внесок здобувача. Наукові праці, покладені в основу дисертації, виконано в співавторстві. У праці [23] здобувач провів теоретичний числовий аналіз залежностей ентропії фермі-газу від амплітуди локальної взаємодії за різних значень температури та побудував відповідні просторові

розподіли густини частинок та густини ентропії для випадку зовнішнього гармонічного потенціалу оптичної пастки для нейтральних атомів. У праці [24] здобувач провів теоретичний числовий аналіз для отримання фазової діаграми $SU(4)$ -симетричного фермі-газу на кубічній ґратці за допомогою динамічної теорії середнього поля; побудував залежності критичних температур переходів до магнітно-впорядкованих станів від амплітуди тунелювання ферміонів між площинами; проаналізував зони стабільності різних упорядкованих станів у випадку додаткового зовнішнього потенціалу пастки. У праці [25] здобувач узагальнив і застосував перетворення Шріффера–Вольфа для отримання ефективних спінових моделей у випадках явного порушення спінових симетрій; провів числовий аналіз з порівняння енергетичних спектрів моделей Габбарда та Гейзенберга для різних випадків порушення симетрій; побудував просторові розподіли густини частинок у гармонічному потенціалі оптичної пастки для нейтральних атомів з різними амплітудами взаємодії та тунелювання.

Апробація матеріалів дисертації. Результати доповідалися на:

1. 2й Міжнародній конференції перспективних досліджень «Фізика конденсованого стану та низьких температур» (6 – 12 червня 2021 року, м. Харків, Україна);
2. Міжнародній конференції “The European Conference Physics of Magnetism 2021” (28 червня – 2 липня 2021 року, м. Познань, Польща);
3. 3й міжнародній конференції «Фізика конденсованого стану та низьких температур» (5 – 11 червня 2023 року, м. Харків, Україна);
4. Міжнародному форумі “US-Ukraine Quantum Forum 2023” (28 – 31 серпня 2023 року, м. Харків, Україна);
5. 4й Міжнародній конференції «Фізика конденсованого стану та низьких температур» (3 – 7 червня 2024 року, м. Харків, Україна);
6. 24й Всеукраїнській школі-семінарі молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (24 – 25 жовтня 2024 року, м. Львів,

Україна);

7. Міжнародному воркшопі “IEEE Magnetism “Magnetism for Ukraine Initiative” Workshop” (14 листопада 2024 року, м. Київ, Україна).

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, 4 розділів, загальних висновків, списку використаних джерел та 1 додатку. Обсяг загального тексту дисертації складає 127 сторінок, з них основного тексту 103 сторінки. Робота ілюстрована 16 рисунками. Список використаних джерел містить 115 найменувань.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційну роботу виконано в Навчально-науковому інституті «Фізико-технічний факультет» Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна відповідно до тематичних планів фундаментальних науково-дослідних робіт. Результати досліджень дисертаційної роботи були отримані в межах виконання науково-дослідної роботи з таких держбюджетних тем:

– «Вплив внутрішніх ступенів вільності частинок на фізичні характеристики квантових систем поблизу фазових переходів», № ДР 0120U102252 (2020–2022 рр.);

– «Магнітні властивості мезоскопічних систем із внутрішніми ступенями вільності», № ДР 0122U001575 (2022–2024 рр.).

Дослідження, що увійшли до дисертаційної роботи, виконувались в рамках відомчого замовлення Національної академії наук України на проведення наукових досліджень з атомної науки і техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Розвиток методів статистичної фізики та квантової теорії поля для дослідження проблем фізики квантових систем багатьох частинок та індукованої гравітації й калібрувальних полів у теорії (супер)струн і бран» (№ ДР 0121U108722, 2021–2025 рр.).

Дослідження також проводились в рамках науково-дослідних проєктів,

що фінансувалися за рахунок грантової підтримки Національного фонду досліджень України, за темами:

- «Просторові кореляції та впорядковані фази, обумовлені ефектами взаємодії в ультрахолодних квантових газах» (№ ДР 0120U104963, 2020–2023 рр.);

- «Новітні теоретичні підходи для всебічного опису корельованих квантових систем багатьох тіл » (№ ДР 0124U004372, 2024–2026 рр.).

Частина дисертаційної роботи була виконана за грантової підтримки закордонних дослідницьких організацій за договорами з Українським науково-технічним центром (УНТЦ):

- проєктна угода з УНТЦ № 9918 “Magnetism for Ukraine 2022”, грантонадавач – IEEE Magnetic Society (2022–2023 рр.);

- проєктна угода з УНТЦ № P800 “US–Ukraine Quantum Forum 2023”, грантонадавач – US Office of Naval Research Global (2023 р.);

- проєктна угода з УНТЦ № 9918 “Magnetism for Ukraine 2023”, грантонадавач – IEEE Magnetic Society (2023–2024 рр.).

Практичне значення отриманих результатів. Результати, що відносяться до фазових станів газів ультрахолодних атомів у зовнішніх полях можуть бути використані при розробці та побудові нових високоточних квантових сенсорів і розробці нових типів універсальних квантових симуляторів. Квантові атомарні гази 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.

РОЗДІЛ 1

УЛЬТРАХОЛОДНІ ФЕРМІ-ГАЗИ В ОПТИЧНИХ ҐРАТКАХ ТА ЗАГАЛЬНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ЇХ ОПИСУ

1.1. Ультрахолодні квантові гази

Системи нейтральних атомів, що охолоджені до ультранизьких температур (порядку мікрокельвін або нижче) демонструють багато захопливих квантових ефектів. Такі низькі температури розташовують їх глибоко в квантовому режимі і роблять їх ідеальними модельними системами для вивчення ефектів квантової механіки та квантової статистичної фізики. Експериментальний напрямок холодних атомів було започатковано Карлом Віманом, Еріком Корнеллом [26], Вольфгангом Кеттерле [27] і Ренді Гулетом [28], експериментальні групи під керівництвом яких незалежно одна від одної реалізували перші конденсати Бозе–Ейнштейна в 1995 році, приблизно через 70 років після їх передбачення Альбертом Ейнштейном. Примітно, що також пізніше була досягнута навіть бозе-конденсація фотонів [29]. Найпоширенішими елементами, які використовуються в експериментах з холодними атомами, є лужні атоми. Зокрема, стабільними бозонними ізотопами є ^7Li , ^{23}Na , ^{39}K , ^{41}K , ^{85}Rb , ^{87}Rb , ^{133}Cs . Для експериментів з ферміонами популярними є атоми ^6Li та ^{40}K [30]. Окремої уваги заслуговують також елементи другої групи та лантаноїди, завдяки замкнутій електронній оболонці з нульовим орбітальним моментом, що робить деякі з них, зокрема ^{87}Sr та ^{173}Yb , дуже хорошими кандидатами для вивчення фізики багатьох тіл з високими спіновими симетріями.

Щоб реалізувати цікаві квантові явища в системах багатьох тіл (наприклад, конденсацію Бозе–Ейнштейна або магнітне впорядкування), атомну хмару потрібно охолодити до температур, нижчих за певну характерну температуру квантового виродження. Оскільки ці температури природним чином не зустрічаються у Всесвіті, охолодження було основною перешкодою на

шляху до першого бозе-конденсату. Від першої експериментальної реалізації конденсації Бозе–Ейнштейна в 1995 році до сьогодення методи охолодження були істотно вдосконалені.

Серед експериментальних методів охолодження необхідно коротко окреслити чотири основних: доплерівське, випаровувальне, сізіфове та симпатичне охолодження. У доплерівській техніці охолодження ансамбль атомів можна охолодити шляхом вибіркового зменшення кінетичної енергії найшвидших атомів. Оптичний ефект Доплера є зручним інструментом для цього, оскільки лазер з червоним розлаштуванням частоти збуджуватиме лише атоми, які рухаються до лазера через доплерівський зсув частоти. Якщо взяти частоту, що спостерігається в системі спокою атома (беремо нерелятивістські частинки) $\omega' = (1 + v/c)\omega$, то поглинання призводить до передачі імпульсу $\Delta k = \omega'/\hbar c$, зменшуючи швидкість атомів у відповідному напрямку. Оскільки повторне випромінювання фотонів є ізотропним, буде мати місце ефективне зменшення імпульсу в напрямку руху, усереднене за багатьма процесами поглинання. Кінцевий час життя збуджених електронних станів в атомах призводить до ширини спектральних ліній, які, у свою чергу, встановлюють нижню межу температури, досяжної за допомогою лазерного (доплерівського) охолодження.

За допомогою випаровувального охолодження можна досягти ще нижчих температур, де «гаряча» частина системи, тобто високоенергетичні частинки, поступово видаляється шляхом зниження потенціалу захоплення. Лише атоми з найвищими енергіями можуть покинути пастку, тому середня енергія в системі ефективно зменшується. Після повторної термалізації температура системи знижується. Цей процес може призвести до дуже низьких температур, однак він також завжди супроводжується значною втратою кількості частинок.

Сізіфове охолодження є ще одним ефективним способом зменшення енергії хаотичного руху атомів. Його ключова ідея полягає в періодичній зміні потенціалу таким чином, щоб атоми втрачали свою кінетичну енергію,

рухаючись до вищого потенціалу. Якщо атом досягає максимуму такого потенціалу, він поглинає і випромінює фотон, після чого потенціал змінюється на протилежний, так що атом раптово опиняється в мінімумі, то такий атом може лише втратити більше кінетичної енергії, але не відновити втрачену енергію.

Сізіфове охолодження зазвичай є необхідним для однокомпонентних газів фермі-атомів, які не можуть мати двочастинкові зіткнення, а отже й досягати термодинамічної рівноваги через принцип заборони Паулі. Щоб отримати доступ і змінити температуру ферміонної хмари, додатково вводять бозонні частинки до системи, які можна охолоджувати «звичайними» лазерними способами, що описані вище. Завдяки взаємодії ферміонів з бозонами фермі-газ може охолоджуватись шляхом обміну енергіями і імпульсами з бозонним газом. Наприкінці, бозонний допоміжний компонент видаляють з системи шляхом резонансного збудження бозонів до станів, на які не діє потенціал захоплення.

Після успішного охолодження атомної хмари атоми захоплюють у пастку. Захоплення в пастку означає процес обмеження атомної хмари в певному об'ємі за допомогою потенціалу замість стінок, які могли би транспортувати тепло до хмари. Оскільки на додаток до звичайних тривимірних систем в цій дисертаційній роботі буде розглянуто також двовимірну модель як граничний випадок, доцільно згадати тут, як двовимірні системи можуть бути реалізовані в тривимірному просторі. Відповідь досить проста: атоми мають сильно утримуватись в одному з просторових вимірів. Щоб отримати квазі-двовимірну систему, потенціал захоплення має бути дуже крутим, щоб атоми змогли зосередитись у дуже тонкому шарі. Завдяки додатковому налаштуванню (зменшенню) цього утримувального потенціалу, третій просторовий вимір стає експериментально доступним, що дає змогу досліджувати також режими кросоверу між двовимірною та тривимірною просторовою геометрією пасток.

Незважаючи на популярність у підручниках і курсах статистичної

механіки, однорідну систему (тобто, пастку) важко реалізувати експериментально. Тільки згодом було проведено успішний експеримент [31] і, нарешті, фундаментальні теоретичні передбачення властивостей основного стану бозе-газів у потенціалі типу прямокутної ями можуть бути досліджені та підтверджені [32]. Однак, використання таких потенціалів є дотепер сильно обмеженим. Тому традиційно використовують потенціали з параболічним профілем, якщо ефекти не вимагають більш специфічних типів пасток. В принципі, існують два основні методи створення потенціалів для холодних атомів з відповідними перевагами та недоліками.

Зокрема, перші конденсати Бозе–Ейнштейна були захоплені в магнітні квадрупольні пастки. По суті, для створення ефективного дипольного потенціалу для атомів використовується магнітне поле двох циліндричних соленоїдів. Магнітне поле має мінімум у центрі, де атоми з орієнтацією магнітних моментів вздовж напрямку зовнішнього магнітного поля мають бути захоплені. Однак у точному центрі пастки магнітне поле зникає, що уможливорює процеси спін-фліпу, які можуть приводити до небажаних втрат атомів з системи. Щоб вирішити цю проблему, центр пастки може бути заблокований лазерним променем із синім розлаштуванням частоти відносно певного резонансного переходу. Як альтернатива, магнітне поле можна зробити скінченним скрізь, наприклад, шляхом обертання пастки.

На противагу магнітним пасткам, в оптичній дипольній пастці атоми потрапляють у сфокусований лазерний промінь завдяки ефекту Штарка. Для червоного розлаштування частоти лазера відносно певного резонансного переходу максимум електричного поля і, отже, мінімум потенціалу чітко визначені та просторово локалізовані. Крім того, потенціал не залежить від магнітних властивостей атомів. Таким чином, різні спінові стани можуть бути захоплені одночасно. Ця реалізація пасток наразі є більш поширеною та універсальною серед експериментальних дослідницьких груп, що працюють з ультрахолодними газами нейтральних атомів.

1.2. Оптичні ґратки та їх експериментальні реалізації

Приголомшливий прогрес у дослідженнях холодних атомних систем зумовлено переважною мірою розвитком новаторських експериментальних методів. Це особливо стосується оптичних ґраток, які пропонують бездефектний потенційний ландшафт для фермі-атомів, що моделюють взаємодійні електрони в кристалі [33,34]. На відміну від реальних матеріалів, кінетичну енергію та енергію взаємодії цих атомів можна вільно регулювати, змінюючи інтенсивність лазерних променів або амплітуду зовнішнього магнітного поля [35]. Такий безпрецедентний рівень контролю та гнучкості відкриває двері для експериментів з реалізаціями квантових моделей, які дуже актуальні в теорії твердого тіла. У цьому контексті на початку розвитку цих напрямів використовувалися атоми лужних металів у оптичних ґратках для створення квантової матерії, що може бути описана в рамках моделі Фермі-Габбарда, як чітко продемонстровано дослідженнями відповідної діелектричної фази Мотта [36,37]. Примітно, що подальші експерименти також спостерігали та характеризували антиферромагнітне впорядкування, що виникає при низьких температурах [38-42], де, як вважають, легована модель Фермі-Габбарда описує також надпровідні стани [43].

Наведемо коротко основну концепцію реалізації оптичних ґраток за допомогою лазерних полів. Для цього пригадаємо, як же саме нейтральний атом утримується в електромагнітних полях. У постійному електричному полі $\vec{\mathcal{E}}$ в атомі індукується дипольний момент

$$\vec{d} = \alpha \vec{\mathcal{E}}. \quad (1.1)$$

Індукований диполь, у свою чергу, взаємодіє з електричним полем. Потенційну енергію взаємодії можна записати у вигляді

$$U_{dip} = -\frac{1}{2} \vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -\frac{\alpha}{2} \mathcal{E}^2. \quad (1.2)$$

Тут α – поляризованість атома, яка у загальному випадку є комплексною величиною. Вважаючи, що зовнішнє поле змінюється в часі та просторі, $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$, вираз (1.2) можна записати як

$$U_{dip}(\vec{r}) = -\frac{1}{2}\text{Re}(\alpha(\omega))\langle\mathcal{E}^2(\vec{r}, t)\rangle. \quad (1.3)$$

Переписавши рівняння у термінах інтенсивності випромінювання I (експериментально контрольованого параметра), отримаємо силу, яка діє на нейтральний атом [44]:

$$\vec{F} = -\nabla U_{dip}(\vec{r}) = \frac{1}{2\epsilon_0 c}\text{Re}(\alpha(\omega))\nabla I. \quad (1.4)$$

Найбільш поширена геометрична конфігурація оптичних ґраток утворює просторово-періодичні структури подібні до кубічного кристалу. Щоб створити подібний потенціал, лазерні промені однакової інтенсивності та частоти спрямовують у діаметрально протилежних напрямках. Таким чином формується стояча хвиля, наприклад, вздовж осі z , яку можна записати в загальному вигляді як

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \cos(\omega t) \cos\left(\frac{\omega}{c}z\right). \quad (1.5)$$

Адаптуючи подібні міркування для лазерів, встановлених вздовж осей x та y , та провівши усереднення за часом, отримаємо просторово-періодичний потенціал такого ж самого вигляду, як і потенціал у кристалах з простою кубічною геометрією:

$$V(\vec{r}) = \sum_{i=x,y,z} V_{0,i} \cos^2\left(\frac{\omega_i}{c}i\right), \quad (1.6)$$

де $V_{0,i}$ – глибина ґратки, яку зазвичай вимірюють в одиницях енергії віддачі атома, $E_R = \hbar^2 k_i^2 / 2m$, що відповідає зміні кінетичної енергії атома внаслідок поглинання або випромінювання фотона з імпульсом $\hbar k_i$ ($k_i = \omega_i / c$).

Періодичність такого просторового потенціалу визначають сталою ґратки a_i , яка пов'язана з довжиною хвилі зовнішнього лазерного поля $a_i = \pi/k_i = \lambda_i/2$.

Зазначимо, що періодичні потенціали ґраток з іншою геометрією можна створити шляхом спеціальної орієнтації або модуляцію лазерних променів у різних напрямках. Як зазначено в попередньому підрозділі, на додаток до періодичного потенціалу ґратки існує (зазвичай гармонічний) потенціал захоплення (оптичної пастки), який утримує атоми в обмеженій ділянці простору. Вона створюється або самими пучками, що формують ґратку за рахунок гаусового профілю інтенсивності в площині, ортогональній напрямку поширення, або додатковою оптичною чи магнітною пасткою [33].

З огляду особливої уваги в роботі до лужноземельних (або подібних їм) атомів, на доданок зазначимо, що в цих системах можна реалізувати станово-залежні оптичні ґратки [45–47]. У таких спеціальних потенціалах збуджений (годинниковий) стан зазначених атомів (разом із основним) можна використовувати як орбітальний ступінь вільності, так що рухливість атомів буде сильно залежати від орбітального стану. Ферміонні ізотопи стронцію та ітербію також мають ненульовий ядерний спі́н, що природним чином призводить до спі́н-обмінних взаємодій між атомами, які знаходяться в різних спі́нових та орбітальних станах [47–49]. Таким чином численні мультиорбітальні гамільтоніани з теорії твердого тіла, наприклад, модель подвійного обміну [50] або модель ґратки Кондо [2], можна реалізувати з цим типом атомів і залежними від стану оптичними потенціалами. Зокрема, гази ітербію в станово-залежних оптичних ґратках стали зручною платформою в цьому контексті завдяки орбітальному резонансу Фешбаха в помірних магнітних полях [51–53], пропонуючи потужний інструмент налаштування для керування взаємодіями в таких газах. Ця особливість доповнюється високим рівнем експериментальної гнучкості з двома природними ферміонними ізотопами (^{171}Yb і ^{173}Yb) та сприятливими параметрами взаємодії [48, 54].

У світлі значних експериментальних знахідок, які містять платформи на базі оптичних ґраток для ультрахолодних атомів, велика кількість теоре-

тичних робіт спрямована на цю новостворену галузь на перетині статистичної, квантової та фізики конденсованого середовища. На доданок до питань екзотичних магнітних станів та просторових кореляцій, на яких зосереджена поточна робота, в інших теоретичних дослідженнях виникло також важливе питання щодо існування багаточастинкової локалізації у трансляційно-інваріантних системах без будь-якої форми статичного безладу [55–57]. У цьому контексті були запропоновані та проаналізовані різноманітні модельні системи, які на цей момент можуть бути реалізовані з ультрахолодними атомами в оптичних ґратках [58].

1.3. Модель Габбарда

Одним з напрямків досліджень, який надають оптичні ґратки, є не тільки вивчення властивостей газів у періодичному потенціалі, але й вивчення властивостей різних моделей. Однією з цікавих і багатих на властивості моделей є модель Габбарда. Ця модель була запропонована в 1960-х роках для опису поведінки електронів у кристалічних структурах твердих тіл. Атомні йони вважаються нерухомими, створюючи періодичний потенціал ґратки, на яких електрони можуть знаходитись та взаємодіяти між собою, або тунелювати між сусідніми атомами.

Для послідовності огляду наведемо основні кроки отримання моделі для довільного типу симетрії та компонент фермі-газу. Оскільки потенціал ґратки має бути періодичним $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, де $\mathbf{a}$ – вектор ґратки, та за теоремою Блоха рішенням рівняння Шредінгера є добуток плоскої хвилі $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ на періодичну функцію $u_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, яка характеризує зону Блоха з відповідним порядковим номером n . Такі стани, які можна описати функцією $\phi_{\mathbf{k}}^{(n)} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r})$, просторово делокалізовані, але мають визначене значення квазі-імпульсу і, відповідно, хвильового вектору k . Завдяки властивості, що оператори просторової координати та імпульсу спряжені, можна перейти за допомогою перетворення Фур'є до просторово локалізованих хвильових

функцій, які носять назву *функції Ваньє* [59]. Для ґратки з N вузлами функція Ваньє для i -го вузла буде мати вигляд

$$w_i^{(n)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \phi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

Гамільтоніан системи “ґратка + ферміони” можна розписати як суму кінетичного доданку $\hat{\mathcal{H}}_0$, який описує рух ферміонів у (станово-залежному) потенціалі ґратки $V_{lat,\sigma}(\mathbf{r})$ і потенціалі пастки $V_{trap}(\mathbf{r})$, та доданку, що відповідає локальній взаємодії ферміонів $\hat{\mathcal{H}}_{int}$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{\sigma} \int d^3r \, \hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{lat,\sigma}(\mathbf{r}) + V_{trap}(\mathbf{r}) \right] \hat{\phi}_{\sigma}(\mathbf{r}), \\ \hat{\mathcal{H}}_{int} &= \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{g_{\sigma\sigma'}}{2} \int d^3r \, \hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\phi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\phi}_{\sigma'}(\mathbf{r}) \hat{\phi}_{\sigma}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Тут для спрощення введено польові оператори $\hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ ($\hat{\phi}_{\sigma}(\mathbf{r})$) народження (знищення) частинок зі спіном σ у ґратці, та сталу $g_{\sigma\sigma'} = 4\pi\hbar^2 a_{s,\sigma\sigma'}/m$, яка залежить прямопропорційно від довжини s -хвильового розсіювання $a_{s,\sigma\sigma'}$ між станами σ і σ' та обернено пропорційна до маси частинок m . Оператори $\hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ та $\hat{\phi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ можна розписати у базисі функцій Ваньє за припущення, що функції Ваньє залежать від спіну ферміона, та для випадку обмеження однією (найнижчою) зоною:

$$\hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_i w_{i\sigma}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}, \quad \hat{\phi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_i w_{i\sigma}(\mathbf{r}) \hat{c}_{i\sigma}, \quad (1.9)$$

де введено оператори народження та знищення ферміона зі спіном σ на вузлі ґратки i , $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}$ та $\hat{c}_{i\sigma}$, відповідно.

Підставляючи визначення операторів (1.9) у вираз для гамільтоніана (1.8) та користуючись ортогональністю функцій Ваньє, отримаємо ком-

поненти гамільтоніана

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \int d^3r w_{i\sigma}^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{lat,\sigma}(\mathbf{r}) + V_{trap}(\mathbf{r}) \right] w_{j\sigma}(\mathbf{r}) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} \\
&= \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \left(-t_{ij,\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \int d^3r V_{trap}(\mathbf{r}) w_{i\sigma}^*(\mathbf{r}) w_{j\sigma}(\mathbf{r}) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \left(-t_{ij,\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + V_{trap}(\mathbf{r}_i) \delta_{ij} \hat{n}_{\sigma} \right), \tag{1.10}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{int} &= \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{g_{\sigma\sigma'}}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3r w_{i\sigma}^*(\mathbf{r}) w_{j\sigma'}^*(\mathbf{r}) w_{k\sigma'}(\mathbf{r}) w_{l\sigma}(\mathbf{r}) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma \neq \sigma'} U_{ijkl,\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma}. \tag{1.11}
\end{aligned}$$

Зазвичай у моделі Габбарда покладають, що ферміони можуть тунелювати тільки між сусідніми вузлами, залишаючи ненульовими множники $t_{ij,\sigma}$ для найближчих вузлів i та j , та використовують наближення сильно локалізованих функцій Ваньє, що призводить до локальної взаємодії, тобто ферміони взаємодіють один з одним за умови знаходження на одному вузлі. Також можна побачити, що найбільший внесок до кінетичного доданку дають амплітуди тунелювання між сусідніми вузлами, а тунелюваннями між більш віднесеними в просторі вузлами можна знехтувати. Ці аргументи дають змогу спростити вираз (1.10), проводячи підсумовування по парах сусідніх вузлів $\langle i, j \rangle$ у всій ґратці, та переписати доданок гамільтоніана (1.11) у термінах операторів числа частинок $\hat{n}_{i\sigma}$ та спростити амплітуду взаємодії $U_{ijkl,\sigma\sigma'} = U_{\sigma\sigma'} \delta_{ij} \delta_{ik} \delta_{il}$. Таким чином, ми приходимо до звичного вигляду гамільтоніана Габбарда, який описує поведінку ферміонів, що взаємодіють

локально, у періодичній просторовій ґратці,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{Hubb} = & - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij,\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + h.c.) + \sum_i \sum_{\sigma' > \sigma} U_{\sigma\sigma'} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'} \\ & + \sum_i \sum_{\sigma} (V_{trap,i} - \mu_{\sigma}) \hat{n}_{i\sigma}.\end{aligned}\quad (1.12)$$

Одна з головних переваг моделі Габбарда полягає у простоті гамільтоніана в записі вторинного квантування та можливості контролювано змінювати кожний з параметрів моделі окремо за умови використання газів нейтральних атомів у оптичних ґратках.

Перший доданок у гамільтоніані (1.12) – кінетичний – описує тунелювання ферміонів між сусідніми вузлами ґратки з амплітудою $t_{ij,\sigma}$, яка може залежати від напрямку тунелювання в ґратці та спінового стану σ самого ферміону. Просторову залежність амплітуди тунелювання $t_{ij,\sigma}$ можна контролювати за допомогою зміни глибини оптичного потенціалу ґратки, у той час як залежність тунелювання від спіну частинки реалізують за допомогою ефекту Зеємана, створюючи просторовий градієнт магнітного поля, чи використовуючи лазери, що налаштовані близько до таких дипольних переходів у атомах, де поляризація атома (таким чином, ефективна глибина оптичної ґратки) залежить від його спінового стану.

Другий доданок відповідає взаємодії двох ферміонів зі спінами σ та σ' на вузлі i з амплітудою $U_{i,\sigma\sigma'}$, яку можна ефективно змінювати магнітним полем поблизу резонансів Фешбаха. Амплітуда взаємодії пропорційна до довжини розсіювання, $U_{i,\sigma\sigma'} \propto a_{s,\sigma\sigma'}$, що як раз залежить від відхилення магнітного поля від значення, за котрого виникає резонанс Фешбаха [60].

Третій доданок враховує наявність потенціалу пастки $V_{trap,i}$, у якій знаходиться ґратка, що може виникати через існування просторового розподілу інтенсивності лазера. Інша ж частина цього доданку дає змогу перейти до статистичного опису в рамках великого канонічного ансамблю та керувати заповненням ґратки ферміонами за допомогою варіації хімічного

потенціалу μ_σ .

Слід зазначити, що в достатньо глибоких ґратках ($V_{0,i} \gg E_R$, див. формулу (1.6)) можна апроксимувати функції Ваньє власними станами гармонічного осцилятора, $w_{l\sigma}(\mathbf{r}) \propto e^{-\mathbf{r}^2}$. Дійсно, за великих амплітуд можна апроксимувати періодичний потенціал вздовж кожної вісі (з точністю до сталого зсуву енергії) як

$$V_{0,i} \sin^2(\pi x_i/a) \approx V_{0,i} \pi^2 x_i^2/a^2. \quad (1.13)$$

Далі, враховуючи кінетичний доданок $-\hbar^2 \nabla_i^2/2m$, власні функції гамільтоніана можна апроксимувати власними функціями гармонічного осцилятора. Останні, як відомо, можна записати в термінах поліномів Ерміта. Зокрема, основному стану такого гамільтоніана буде відповідати функція

$$\psi_0(x_i) = \left(\frac{\pi}{a^2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \right)^{1/4} e^{-\frac{\pi}{2a^2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} x_i^2}. \quad (1.14)$$

Це наближення дає змогу отримати аналітичні вирази для амплітуд тунелювання та взаємодії. Через сильне відхилення гауссового розподілу від точних функцій Ваньє можна очікувати прийнятних результатів лише для локальних членів, тобто інтегралів типу $\sim \int d^3r |w(\mathbf{r})|^4$.

Спираючись на хвильову функцію основного стану гармонічного осцилятора (1.14) як апроксимацію для функції Ваньє найнижчої зони в тривимірному просторі,

$$\int d^3r |w(\mathbf{r})|^4 \approx \prod_{i=1,2,3} \int dx_i |\psi_0(x_i)|^4 = \left(\frac{\pi}{2a^2} \sqrt{\frac{\bar{V}_0}{E_R}} \right)^{3/2}, \quad (1.15)$$

де $\bar{V}_0$ – геометричне середнє, $\bar{V}_0 = \sqrt[3]{V_{0x}V_{0y}V_{0z}}$, ми можемо обчислити

параметр Габбарда $U_{i,\sigma\sigma'}$ як

$$U_{i,\sigma\sigma'} = \frac{4\pi a_{s,\sigma\sigma'} \hbar}{m} \left(\frac{\pi}{2a^2} \sqrt{\frac{\bar{V}_0}{E_R}} \right)^{3/2}. \quad (1.16)$$

Для амплітуди тунелювання між найближчими сусідами $t_{\sigma,i} \equiv t_{ij,\sigma}$ характерні оцінки в глибоких ґратках для конкретного просторового напрямку можна отримати з одновимірної задачі, покладаючи ширину зони $W \rightarrow 4t_{\sigma,i}$ в одновимірному рівнянні Мат'є [35]:

$$t_{\sigma,i} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_{0,i}}{E_R} \right)^{3/4} e^{-2\sqrt{\frac{V_{0,i}}{E_R}}}. \quad (1.17)$$

Як легко побачити з наведених формул (1.16) і (1.17), основні параметри моделі Габбарда безпосередньо залежать від відносної глибини ґратки $V_{0,i}/E_R$, таким чином, варіюючи інтенсивність зовнішніх лазерів можна ефективно змінювати параметри моделі в широких діапазонах.

Не дивлячись на зазначену важливість і певну простоту формулювання, модель Габбарда й досі залишається не повністю вивченою в загальному випадку як з точки зору точного визначення властивостей основного стану і низькоенергетичних збуджень, так і загальних термодинамічних характеристик системи, особливо в разі двовимірного та тривимірного координатного простору.

1.4. Границя сильного зв'язку та ефективна спінова модель

З практичної точки зору, дослідження гамільтоніана Габбарда (1.12) виявляється складною задачею для числових розрахунків, оскільки розмір гільбертового простору експоненційно зростає з розмірами системи. Тому за можливості використовують спрощені ефективні моделі, які можна отримати з гамільтоніана Габбарда за різних граничних умов.

Одним з таких прикладів є ефективний гамільтоніан на границі сильно-го зв'язку, де процеси взаємодії ферміонів домінують над процесами тунелювання, $U_{i,\sigma\sigma'} \gg t_{jk,\sigma''}$. Замість класичного виводу ефективного гамільтоніана для випадку спінової симетрії $SU(2)$, що відповідає ферміонам зі спіном $1/2$, ми наведемо більш релевантне до теми дисертації виведення ефективного гамільтоніана, що описує $SU(4)$ -симетричний чотириккомпонентний фермі-газ в оптичній ґратці з середнім заповненням $n \approx 1$, використовуючи метод унітарних перетворень Шріффера–Вольфа [61].

Гамільтоніан Габбарда (1.12) у випадку спінової симетрії $SU(4)$ спрощується до наступного вигляду:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{Hubb} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=1}^4 \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i \sum_{\sigma' > \sigma=1}^4 \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'} \\ & + \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 (V_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

У цьому гамільтоніані симетрія $SU(4)$ полягає у його властивості комутувати з генераторами $SU(4)$ симетрії, тобто, $[\hat{\mathcal{H}}_{Hubb}, \hat{S}_i^k] = 0$, де відповідні локальні спінові оператори $\hat{S}_i^k = \frac{1}{2} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger (\lambda^k)_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma'}$ можна записати в термінах узагальнених матриць Гелл-Мана λ^k розміру 4×4 , де індекс $k = 1, \dots, 15$.

Для виведення ефективної спінової моделі розглянемо унітарне перетворення гамільтоніана (1.18):

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = e^{i\hat{S}} \hat{\mathcal{H}}_{Hubb} e^{-i\hat{S}}, \quad (1.19)$$

де оберемо оператор $\hat{S} \propto \frac{t}{U}$, що дає змогу розкласти вираз у ряд

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eff} = & \left(1 + i\hat{S} - \frac{\hat{S}^2}{2} + \mathcal{O}\left(\frac{t^3}{U^3}\right) \right) \hat{\mathcal{H}}_{Hubb} \left(1 - i\hat{S} - \frac{\hat{S}^2}{2} + \mathcal{O}\left(\frac{t^3}{U^3}\right) \right) \\ = & \hat{\mathcal{H}}_{Hubb} + i [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{Hubb}] - \frac{1}{2} [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{Hubb}]] + \mathcal{O}\left(\frac{t^3}{U^3}\right), \end{aligned} \quad (1.20)$$

використовуючи визначення комутатора $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Ідея методу, який було запропоновано Шріффером та Вольфом [61], полягає у знаходженні такої форми оператора $\hat{S}$, щоб значно спростити вираз ефективного гамільтоніана. Введемо позначення для кожного з доданків гамільтоніана Габбарда (1.18), $\hat{\mathcal{H}}_{Hubb} = \hat{\mathcal{H}}_t + \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{trap}$, та розіб'ємо кінетичний доданок як суму трьох частин,

$$\hat{\mathcal{H}}_t = \hat{\mathcal{H}}_{t,D} + \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-}.$$

Перший доданок $\hat{\mathcal{H}}_{t,D}$ відповідає процесам тунелювання, що не змінюють загальну енергію системи, та описується недіагональними елементами, що знаходяться у рамках кожного з блоків Жордана у матричній формі гамільтоніана. Наприклад, розглянемо два вузли ґратки, де на одному вузлі знаходяться дві частинки, одна з яких тунелює до іншого вузла з однією частинкою. При такому процесі енергія системи не змінюється, оскільки стан системи симетричний за заміни вузлів місцями. У випадку заповнення ґратки на одну чверть такі процеси не мають місця, тому внесок цього доданку одразу зникає.

Другий та третій доданки, $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$ та $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$, характеризують процеси підвищення та пониження енергії системи, відповідно. Для наочності, розглянемо дію операторів для двох вузлів, коли у середньому на кожен вузол ґратки припадає по одному ферміону. Основний стан цієї системи відповідає заповненню одним ферміоном на першому вузлі та другим ферміоном – на іншому, оскільки в моделі Габбарда такі ферміони не мають енергії взаємодії. Тоді оператор $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$ переводить систему до збудженого стану, де дві частинки знаходяться на одному з пари вузлів та взаємодіють з амплітудою U , залишивши інший вузол порожнім. У свою чергу, оператор пониження енергії, $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$, повертає систему зі збудженого до основного стану. Таким чином, можливо явно записати оператори підвищення та пониження

енергії:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{t,+} &= -t \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 (\hat{n}_{i\sigma_1} \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} + (i \leftrightarrow j)), \\ \hat{\mathcal{H}}_{t,-} &= -t \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 (\hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \hat{n}_{j\sigma_1} + (i \leftrightarrow j)).\end{aligned}\quad (1.21)$$

Тепер доведемо, що комутатор $[\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_U]$ є пропорційним самому оператору підвищення енергії:

$$\begin{aligned}[\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_U] &= -tU \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \sum_{\sigma_4 > \sigma_3=1}^4 [\hat{n}_{i\sigma_1} \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} + (i \leftrightarrow j), \hat{n}_{i\sigma_3} \hat{n}_{i\sigma_4} + \hat{n}_{j\sigma_3} \hat{n}_{j\sigma_4}] \\ &= tU \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 (\hat{n}_{i\sigma_1} \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} + (i \leftrightarrow j)) = -U \hat{\mathcal{H}}_{t,+},\end{aligned}\quad (1.22)$$

де $(i \leftrightarrow j)$ позначає усі подібні комбінації операторів народження, знищення та числа частинок, де індекси вузлів i та j поміняні місцями.

Аналогічне твердження має місце для комутатора з оператором пониження енергії, що дає змогу узагальнити цю властивість до наступного виразу:

$$[\hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}, \hat{\mathcal{H}}_U] = \mp U \hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}. \quad (1.23)$$

Таким чином, якщо обрати оператор $\hat{S} = \frac{i}{U} (\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+})$, наступні комутатори запишемо як

$$[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] = i (\hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-}), \quad (1.24)$$

$$[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U]] = -\frac{1}{U} [\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-}], \quad (1.25)$$

що дає змогу спростити вираз для Гамільтоніана ефективної моделі (1.20) до

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{trap} - \frac{1}{2U} \left[\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{t^3}{U^3} \right). \quad (1.26)$$

Оскільки кінцевий гамільтоніан має описувати систему в основному стані, то останній доданок можна спростити, залишаючи тільки процеси типу $\hat{\mathcal{H}}_{t,-} \hat{\mathcal{H}}_{t,+}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2U} \left[\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right] &= \frac{1}{U} \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \hat{\mathcal{H}}_{t,+} \\ &= \frac{t^2}{U} \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \sum_{\sigma_3 \neq \sigma_4=1}^4 (\hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \hat{n}_{j\sigma_1} + (i \leftrightarrow j)) (\hat{n}_{i\sigma_3} \hat{c}_{i\sigma_4}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_4} + (i \leftrightarrow j)) \\ &= \frac{2t^2}{U} \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 (\hat{n}_{i\sigma_2} \hat{n}_{j\sigma_1} - \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \hat{c}_{i\sigma_1}). \end{aligned} \quad (1.27)$$

Вище було використано властивості операторів народження, $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$, та знищення, $\hat{c}_{i\sigma}$, та їх антикомутаційне співвідношення:

$$\left\{ \hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \right\} = \left\{ \hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'} \right\} = 0, \quad \left\{ \hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \right\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (1.28)$$

Кожен з доданків частини гамільтоніана (1.27) описує два можливих процеси у рамках моделі Габбарда. Перший доданок відповідає процесу, коли частинки тунелювали на один вузол та повернулися у початковий стан, а другий доданок – обміну частинок між вузлами. Оскільки вихідний гамільтоніан є SU(4)-симетричним, і перетворення не порушували даної симетрії, то можна перейти від операторів народження та знищення до операторів спіну $\hat{S}_i^k = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=1}^4 \hat{c}_{i\sigma_1}^\dagger \lambda_{\sigma_1\sigma}^k \hat{c}_{j\sigma_2}$ на вузлі i , де використано узагальнені матриці Гелл-Мана $\lambda_{\sigma_1\sigma_2}^k$, генератори SU(4) симетрії, з індексом $k = 1, \dots, 15$. Легко показати, що процеси обміну ферміонів описуються операторами спіну з недіагональними матрицями ($k \neq 3, 8, 15$), а процеси без обміну місцями –

операторами з діагональними ($k = 3, 8, 15$):

$$\sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \hat{c}_{i\sigma_1} = 2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq 3,8,15}}^{15} \hat{S}_i^k \hat{S}_j^k, \quad (1.29)$$

$$\sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \hat{n}_{i\sigma_2} \hat{n}_{j\sigma_1} = \frac{3}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j - 2 \sum_{i=1,3,15} \hat{S}_i^k \hat{S}_j^k, \quad \text{де } \hat{n}_i = \sum_{\sigma=1}^4 \hat{n}_{i\sigma}. \quad (1.30)$$

Підставляючи отримані співвідношення у вираз (1.26) та опускаючи доданки вище за $\mathcal{O}\left(\frac{t^2}{U^2}\right)$, отримуємо ефективний гамільтоніан SU(4)-симетричної моделі у випадку заповненої зони на одну чверть

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{trap} + J \sum_{\langle i;j \rangle} \left(\sum_{k=1}^{15} \hat{S}_i^k \hat{S}_j^k - \frac{3}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right). \quad (1.31)$$

Уведений параметр $J = 4t^2/U$ називають сталою взаємодії між сусідніми спінами, яка є амплітудою ефективної антиферромагнітної взаємодії ($J > 0$), а відповідний доданок з цією сталою в цілому відповідає моделі Гейзенберга, яку узагальнено до спінової симетрії SU(4). Модель Гейзенберга зазвичай використовують для опису сильно корельованих систем, зокрема, магнетиків з локалізованими спінами, тому логічно, що вона проявляється при розгляданні моделі Габбарда в границі сильного зв'язку $U \gg t$. Відзначимо, що аналогічним чином можна отримати гамільтоніани для різних заповнень ґратки, включно з випадками декількох орбітальних станів, що робить можливим описувати також ферромагнітну взаємодію внаслідок домінування ефективної сталої $J' < 0$ [62]. У нашому випадку знак сталої J додатний, отже енергія багаточастинкового стану мінімізується, коли на сусідніх вузлах знаходяться частинки з різними проєкціями псевдоспіну, що і відповідає антиферромагнітній взаємодії.

1.5. Динамічна теорія середнього поля

Теоретичне дослідження термодинамічних властивостей квантових систем багатьох тіл за допомогою суто аналітичних підходів у багатьох випадках не виявляється можливим через складність та комплексність моделей, що призводить до необхідності використання обчислювальних методів. Самих числових підходів до опису систем багатьох тіл розвинено багато, як-то квантові Монте-Карло моделювання [63], теорія функціонала густини [64], методи тензорних мереж [65–68], кожний з яких має свої переваги та недоліки. Оскільки ми зацікавлені у вивченні магнітних властивостей чотириккомпонентних фермі-газів за низьких температур, то для цього є доцільним використання динамічної теорії середнього поля, *engl.* – *dynamical mean field theory* (DMFT). Нижче наведено ключові ідеї та формули для пояснення принципу алгоритму; детальне виведення певних аспектів можна знайти також у працях [69, 70].

У 1989 році В. Метцнером і Д. Вольхардтом [71] було показано, що модель Фермі–Габбарда може бути розв’язана точним чином за допомогою модифікованого середньопольового підходу в граничному випадку, де координаційне число ґратки (кількість сусідніх вузлів) прямує до нескінченності, $d \rightarrow \infty$. У цьому граничному випадку систему можна звести до локальної задачі багатьох тіл, що описується одним вузлом («домішкою»), поєднаним з «зовнішнім резервуаром», тобто просторові флуктуації стають замороженими, але інформація про часову динаміку системи залишається. Тому такий підхід називають саме *динамічною* теорією середнього поля (DMFT). Умови самоузгодженості DMFT можна вивести різними способами. Підхід, запроваджений А. Жоржесом і Г. Котляром [72], який зараз розглядається в якості стандартного, використовує модель домішок Андерсона [73] для опису одного вузла з узгодженою прив’язкою до зовнішнього резервуара.

Зробимо відображення моделі Габбарда, де частинки можуть тунелювати та локально взаємодіяти на вузлах просторової ґратки, на модель

з одним виокремленим вузлом, який контактує з зовнішнім резервуаром, що слугує ефективним відображенням інших вузлів ґратки. У цій моделі ферміони взаємодіють лише на обраному вузлі, який називають *домішкою*, у той час як резервуар відіграє усереднений вплив інших вузлів реальної ґратки за допомогою обміну частинками з домішкою. Таким чином модель, відома як домішкова модель Андерсона, *engl. – Anderson impurity model* [73], все ще описує поведінку системи багатьох тіл за умови знехтування впливу нелокальних просторових кореляцій. Гамільтоніан системи можна записати наступним чином:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_A = & - \sum_l \sum_{\sigma=1}^4 \epsilon_{l\sigma} \hat{a}_{l\sigma}^\dagger \hat{a}_{l\sigma} + \sum_l \sum_{\sigma=1}^4 V_{l\sigma} \left(\hat{a}_{l\sigma}^\dagger \hat{c}_\sigma + \hat{c}_\sigma^\dagger \hat{a}_{l\sigma} \right) \\ & - \sum_{\sigma=1}^4 \mu_\sigma \hat{n}_\sigma + \sum_{\sigma' > \sigma=1}^4 U_{\sigma\sigma'} \hat{n}_\sigma \hat{n}_{\sigma'}.\end{aligned}\quad (1.32)$$

Тут індекс l нумерує орбіталі резервуара, а $\hat{a}_{l\sigma}^\dagger$ і $\hat{c}_\sigma^\dagger$ – оператори народження частинки в стані з проєкцією псевдоспіну σ на орбіталі l та на домішці, відповідно. Аналогічні позначення введено для операторів знищення. Амплітуди $\epsilon_{l\sigma}$ і V_l є так званими параметрами Андерсона, які характеризують енергію частинок на l -ій орбіталі та амплітуду тунелювання частинок з орбіталі l на домішку. Останні два доданки напряду залишилися від гамільтоніана Габбарда (1.12) та описують середнє заселення домішки та взаємодію частинок на домішці.

Наступним кроком перейдемо до опису моделі в термінах функціональних інтегралів, вводячи уявний час τ та замінюючи ферміонні оператори на домішці змінними Грассмана, $c_\sigma^\dagger(\tau)$ та $c_\sigma(\tau)$. Таким чином можна записати

дію моделі Андерсона через змінні Грассманна:

$$S_{loc} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma=1}^4 c_\sigma^\dagger(\tau) \mathcal{G}_\sigma(\tau - \tau') c_\sigma(\tau') + \int_0^\beta d\tau \sum_{\sigma > \sigma'=1}^4 U_{\sigma\sigma'} n_\sigma(\tau) n_{\sigma'}(\tau), \quad (1.33)$$

де змінну $\beta = 1/k_B T$ визначають через сталу Больцмана k_B та температуру T . Застосовуючи перетворення Фур'є та переходячи до простору частот, можливо отримати явний вигляд фур'є-образу функції Гріна $\mathcal{G}_\sigma(\tau - \tau')$, яка описує систему невзаємодійних ферміонів. Така функція, відома як функція Вейса $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$, може бути записана наступним чином:

$$\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_l \sum_{\sigma=1}^4 \frac{|V_{l\sigma}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{l\sigma}}. \quad (1.34)$$

У цьому виразі введено ω_n – мацубарівську частоту, яку для ферміонів визначають як $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$. Вона виникає в результаті перетворення Фур'є з уявного часу та антиперіодичності відповідної функції Гріна, $\mathcal{G}_\sigma(\tau - \beta) = -\mathcal{G}_\sigma(\tau)$.

За допомогою дії моделі Андерсона (1.33) можна визначити локальну функцію Гріна на домішці як

$$G_{imp,\sigma}(i\omega_n) = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int \prod_\sigma Dc_\sigma^* Dc_\sigma [c_\sigma(i\omega_n) c_\sigma^*(i\omega_n)] e^{-S_{loc}}, \quad (1.35)$$

зі статичною сумою $\mathcal{Z} = \int \prod_\sigma Dc_\sigma^* Dc_\sigma e^{-S_{loc}}$. Ця домішкова функція Гріна $G_{imp,\sigma}(i\omega_n)$ пов'язана з функцією Вейса $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$ та самоенергією $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ рівнянням Дайсона

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - G_{imp,\sigma}^{-1}(i\omega_n). \quad (1.36)$$

З іншого боку, функції Гріна, що визначені вище, відносяться тільки до моделі Андерсона. Тому логічним припущенням для зв'язку моделей Габбарда та

Андерсона буде умова збіжності домішкової функції Гріна $G_{imp,\sigma}(i\omega_n)$ з функцією Гріна на вузлі ґратки в координатному просторі $G_{lat,\sigma}(i\omega_n)$. Фур'є-образ останньої можна записати як

$$G_{lat,\sigma}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu_\sigma - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}, \quad (1.37)$$

де $\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_j t_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$ – фур'є-образ оператора тунелювання в моделі Габбарда. Відзначимо, що у виразі для ґраткової функції Гріна має стояти самоенергія ґраткової системи, але оскільки запропонована модель Габбарда враховує суто локальні кореляції, то ця ґраткова самоенергія має збігатись з самоенергією домішки $G_{imp,\sigma}(i\omega_n)$. Ці твердження – на збіг функцій Гріна та самоенергій двох моделей – задають умову самоузгодженості та критерії збіжності алгоритму.

Таким чином отримано повний набір функціональних рівнянь, що записані в термінах функцій Гріна. На початку розрахунків ініціалізують функцію Вейса $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$ за допомогою параметрів $\epsilon_{l\sigma}$ та $V_{l\sigma}$ моделі Андерсона. Далі домішковий розв'язувач обчислює домішкову функцію Гріна $G_{imp,\sigma}(i\omega_n)$ та дає змогу визначити самоенергію $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ з рівняння Дайсона (1.36). Отримане значення самоенергії підставляють до рівняння (1.37) для обчислення ґраткової функції Гріна $G_{lat,\sigma}(i\omega_n)$. Ототожнюючи ґраткову функції Гріна з домішковою функцією Гріна, $G_{imp,\sigma}(i\omega_n) = G_{lat,\sigma}(i\omega_n)$, з рівняння Дайсона отримуємо нову функцію Вейса $\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) = G_{imp,\sigma}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_\sigma(i\omega_n)$ з оновленими значеннями параметрів Андерсона. Нова функція Вейса буде використана у якості початкової функції для домішкового розв'язувача на наступній ітерації, зациклюючи тим самим алгоритм. Самі ітерації продовжують до моменту задоволення числовим критерієм збіжності, що, як правило, накладають на різницю значень функцій Вейса на двох суміжних ітераціях алгоритму.

Подібно до чисельних підходів до задач багатьох тіл на ґратці, існує також декілька ефективних алгоритмів домішкових розв'язувачів [63, 74, 75]. У цій роботі будемо використовувати лише точну діагоналізацію, *encl.* – *exact*

diagonalisation (ED), через простоту алгоритму та достатньо високу точність отриманих результатів. Спочатку функцію Вейса (1.34) наближають виразом зі скінченною кількістю орбіталей резервуара n_s ,

$$\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) \approx i\omega_n + \mu - \sum_{l=2}^{n_s} \sum_{\sigma=1}^4 \frac{|V_{l\sigma}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{l\sigma}}, \quad (1.38)$$

що дає змогу перейти до осяжного для чисельних розрахунків розміру гільбертового простору. Цей крок дає змогу діагоналізувати гамільтоніан Андерсона (1.32) та обчислити функцію Гріна на домішці $G_{imp,\sigma}(i\omega_n)$, записану у представленні Лемана як

$$G_{imp,\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{j,j'} \frac{\langle j | \hat{c}_\sigma | j' \rangle \langle j' | \hat{c}_\sigma^\dagger | j \rangle}{i\omega_n + E_j - E_{j'}} [e^{-E_j\beta} + e^{-E_{j'}\beta}]. \quad (1.39)$$

Тут $|j\rangle$ та E_j позначають усі можливі власні стани та власні енергії гамільтоніана моделі Андерсона, що обмежена n_s орбіталями, а $\mathcal{Z} = \sum_j e^{-E_j\beta}$ – статистична сума. Відзначимо, що процес діагоналізації гамільтоніана виявляється найбільш чисельно затратним, оскільки розмір гільбертового простору експоненційно зростає з кількістю орбіталей резервуара. У свою чергу, це примушує обмежитись відносно невеликою кількістю орбіталей $n_s = 4$ на кожен псевдоспіновий стан, хоча вже за $n_s = 3$ результати можуть не суттєво відрізнятися від $n_s = 4$, залежно від шуканих величин.

Далі за описаним алгоритмом DMFT обчислюється самоенергія $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ для отримання ґраткової функції Гріна. Для неї формула (1.37) спрощується залежно від типу впорядкування на вузлах ґратки.

У найпростішому випадку, коли стан системи є трансляційно-інваріантним, ґраткова функція Гріна може бути записана як

$$G_\sigma(i\omega_n) = \int \frac{D(\varepsilon)}{i\omega + \mu - \varepsilon - \Sigma_\sigma(i\omega_n)} d\varepsilon, \quad (1.40)$$

де $D(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})$ – густина станів невзаємодійних частинок на ґратці

певної просторової геометрії.

Інший цікавий випадок виникає, коли частинки на вузлах упорядковуються двома різними варіантами. Таким чином уся ґратка умовно поділяється на дві підґратки A та B , а функція Гріна вже не задається виразом (1.37), а має бути записана як матриця

$$\mathbf{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \zeta_\sigma^A & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_\sigma^B \end{pmatrix}. \quad (1.41)$$

Знаходячи обернену матрицю, можна знайти вираз ґраткової функції Гріна для кожної з підґраток A та B :

$$G_\sigma^j(i\omega_n) = \zeta_\sigma^{\bar{j}} \int \frac{D(\varepsilon)}{\zeta_\sigma^A \zeta_\sigma^B - \varepsilon^2} d\varepsilon. \quad (1.42)$$

Тут індекс $j = A, B$ та його протилежність $\bar{j} = B, A$ позначає підґратку, а діагональні елементи $\zeta_\sigma^j = i\omega_n + \mu - \Sigma_\sigma^j$.

У більш загальному випадку, який реалізується на практиці за низьких температур і багатокомпонентних квантових газів, умов самоузгодження (1.40) або (1.42) може ставати недостатньо, оскільки ферміони на вузлах можуть упорядковуватись більш складним чином. Для цього використовується узагальнення DMFT у координатному просторі [76, 77], *engl. – real-space DMFT* (RDMFT), де загальна матриця Гріна складається з функцій Гріна для кожного вузла і знаходиться інверсією виразу

$$[\mathbf{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n)]_{jj'} = [i\omega_n + \mu - \Sigma_\sigma(i\omega_n)]\delta_{jj'} - t_{jj'}, \quad (1.43)$$

де індекси j та j' нумерують вузли ґратки, а $t_{jj'}$ – амплітуда тунелювання між вузлами j та j' , яка залежить від просторового розташування вузлів.

Невзаємодійна густина станів для кубічної геометрії ґратки. Для числового обчислення ґраткових функцій Гріна (1.40) та (1.42) необхідним

кроком є знаходження невзаємодійної густини станів $D(\varepsilon)$ для певних просторових геометрій ґратки. Тут наведемо приклад отримання густини станів у випадку ізотропної кубічної ґратки. Згідно з перетворенням Фур'є для оператора тунелювання, можна отримати дисперсійне співвідношення, якому відповідає рівняння

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}(k_x, k_y, k_z) = -2t \sum_{\alpha=x,y,z} \cos(k_\alpha). \quad (1.44)$$

Тоді за визначенням густини станів отримуємо:

$$\begin{aligned} D(\varepsilon) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{2t\pi^3} \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy \int_{-1}^1 dz \frac{\delta(\tilde{\varepsilon} + x + y + z)}{\sqrt{(1-x^2)(1-y^2)(1-z^2)}}, \end{aligned} \quad (1.45)$$

де використано заміни $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/2t$ та $x, y, z \equiv \alpha = \cos(k_\alpha)$.

Проінтегруємо далі за змінною x та отримаємо подвійний інтеграл

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{2t\pi^3} \int dz \int dy \frac{1}{\sqrt{(1-y^2)(1-z^2)(1-(\tilde{\varepsilon} + y + z)^2)}}, \quad (1.46)$$

з границею інтегрування $\max[-1; -1 - (\tilde{\varepsilon} + z)] \leq y \leq \min[1; 1 - (\tilde{\varepsilon} + z)]$ та $-1 \leq z \leq 1$. Інтеграл за змінною y можна звести до еліптичного інтеграла першого роду за допомогою додаткової заміни

$$y(\phi) = \frac{-2 + (1 + \tilde{\varepsilon} + z)(2 + \tilde{\varepsilon} + z) \sin^2 \phi}{2 + (2 + \tilde{\varepsilon} + z) \sin^2 \phi}, \quad (1.47)$$

що дає загальний вираз

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{2t\pi^3} \int dz \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \frac{1}{4} \int d\phi \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4-(\tilde{\varepsilon}+z)^2}{4} \sin^2 \phi}}. \quad (1.48)$$

Один з найелегантніших способів чисельно обрахувати еліптичний

інтеграл першого роду,

$$\mathcal{K}(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - m^2 \sin^2(\phi)}}, \quad (1.49)$$

– використати арифметично-геометричне середнє, *engl.* – *arithmetic-geometric mean* (*agm*). Для цього уявімо, що маємо дві послідовності a_n та b_n , кожна з яких визначається як середнє арифметичне та геометричне минулих членів обох послідовностей:

$$a_0 = x, \quad b_0 = y, \quad a_n = \frac{a_{n-1} + b_{n-1}}{2}, \quad b_n = \sqrt{a_{n-1}b_{n-1}}. \quad (1.50)$$

Границя обох послідовностей є одним і тим самим числом, яке називають арифметично-геометричним середнім $agm(x, y)$ двох чисел x та y , з яких стартують послідовності. Величину, що визначена за допомогою таких перетворень, явним чином записують через еліптичний інтеграл першого роду,

$$agm(x, y) = \frac{\pi}{4} \frac{x + y}{\mathcal{K}\left(\frac{x-y}{x+y}\right)}, \quad (1.51)$$

що дає змогу обернути вираз і знаходити значення еліптичного інтеграла лише розраховуючи арифметично-геометричне середнє. Найбільша перевага цього алгоритму полягає в простоті та швидкості збіжності членів послідовностей до відповідної границі.

Висновки до розділу 1

Розділ має оглядовий характер, зокрема, основну увагу в ньому приділено огляду та аналізу літератури за темою дисертації. Було розглянуто фізичні аспекти квантових систем багатьох частинок, зокрема, ультрахолодних газів нейтральних атомів у періодичних потенціалах оптичних ґраток,

до яких далі було наведено методологію теоретичного опису. Зазначено, що для врахування впливу просторово-періодичних потенціалів на фізичні характеристики квантових систем багатьох частинок необхідно використовувати сучасні підходи теоретичного опису.

Наведено основні кроки для отримання вихідної моделі Габбарда, яка далі буде необхідна для теоретичного аналізу термодинамічних властивостей і фазових станів ультрахолодних газів з високими спіновими симетріями. Розглянуто формалізм теорії збурень із застосуванням перетворень Шріффера-Вольфа для випадку сильного зв'язку, що дає змогу отримувати ефективні моделі типу спінової моделі Гейзенберга.

У розділі наведено основні кроки до опису квантових систем багатьох частинок без застосування теорії збурень за допомогою числового алгоритму динамічної теорії середнього поля. Показано також, як необхідно модифікувати теоретичний формалізм для врахування можливої просторової анізотропії тривимірних оптичних ґраток.

РОЗДІЛ 2

МАГНІТНІ ВПОРЯДКУВАННЯ В $SU(4)$ -СИМЕТРИЧНИХ ФЕРМІ-ГАЗАХ ЗА НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР У НАЧВЕРТЬЗАПОВНЕНІЙ ОПТИЧНІЙ ҐРАТЦІ

2.1. Фазова діаграма чотирикомпонентних фермі сумішей

Як зазначалося в попередньому розділі, розвиток технологій утримання атомів та поява оптичних ґраток дали можливість вивчати та симулювати різні моделі з фізики конденсованого стану, такі як модель Ізінга, Гейзенберга, Габбарда тощо. Це відкрило додаткові можливості вивчати їх фундаментальні властивості й такі унікальні явища, як надплинність, магнітні фази, колективні збудження з високим ступенем контролю та варіації основних параметрів. Одним з таких цікавих питань є вивчення високоспінових систем за низьких температур, особливо за симетрії $SU(4)$, оскільки за такої симетрії та підбору параметрів можна ще реалізувати стани валентних зв'язків або кластерів, неабелевої хіральної спінової рідини тощо.

На практиці такі симетрії виникають в експериментах з ультрахолодними газами ^{173}Yb та ^{87}Sr , які мають $N = 6$ та $N = 10$ проєкцій ядерного спіну, відповідно. За допомогою оптичного методу Штерна–Герлаха можна відокремити бажану кількість проєкцій спінів, які далі будемо називати *псевдоспіновими* компонентами.

З теоретичної точки зору, суміші квантових частинок з високою спіновою симетрією в ґраткових системах привертають значну увагу з багатьох причин. Зокрема, експериментальні реалізації систем, інваріантні при неперервних перетвореннях $SU(N)$, можуть дати корисну інформацію про механізми спонтанного порушення симетрії, які відіграють вирішальну роль у багатьох галузях фізики конденсованого стану та високих енергій. Залежно від конкретної симетрії, вважають, що ці системи мають нетривіальні фазові діаграми та унікальні фізичні характеристики, які ще не вивчені з доста-

тньою ретельністю та необхідною точністю [11–14,16,21,78–84]. Притаманною властивістю багатокомпонентних сумішей, що можуть бути описані моделлю Габбарда, є висока ємність ентропії. Це є значною перевагою для отримання низькотемпературних квантових фаз багатьох тіл з ультрахолодними атомами в оптичних ґратках.

Незважаючи на те, що характерні експериментально доступні температури та ентропії захоплених атомних газів є занадто високими для безпосереднього вивчення екзотичних низькотемпературних фаз, експерименти з багатокомпонентними ферміонними сумішами ^6Li , ^{40}K , ^{87}Sr та ^{173}Yb в оптичних ґратках вже розкрили багату фізику цих систем [3,48,85–93]. Особливу зацікавленість серед таких фаз привертають антиферромагнітно-впорядковані фази та перехід від стану металу (фермі-рідини) до діелектричного стану Мотта. У цьому контексті необхідно звернути увагу, що у випадку високої спінової симетрії (на відміну від симетрії $\text{SU}(2)$ з великою довжиною спіну S в твердих тілах) квантові флуктуації зростають зі збільшенням кількості взаємодійних ферміонних компонентів [11,94].

У відповідності до теоретичних досліджень [2,3,15], магнітна впорядкованість за типом Нееля є основною нестабільністю при половинному заповненні зони в $\text{SU}(N)$ -симетричних моделях Габбарда, коли кількість взаємодійних компонент дорівнює $N = 4$ або менше. Суміші з $N \gtrsim 6$ починають проявляти сильні тенденції до немагнітних валентно-спарених (або, більш загально, до валентно-кластерних) станів, які визначають низькотемпературну фізику цих систем. У той час як такі системи з наполовину заповненою зоною активно вивчались у науковій літературі, низькотемпературні фази та магнітні кореляції в моделі Габбарда з четвертинним заповненням зони були вивчені недостатньо.

Розглянемо випадок чотирикомпонентного фермі-газу зі спіновою симетрією $\text{SU}(4)$, який знаходиться у начвертьзаповненій оптичній ґратці. Особливо цікавим і відносно простим є випадок квазіквадратної ґратки, реалізувати який можливо у кубічній ґратці, якщо значно збільшити інтен-

сивність лазерів у одному з напрямів, щоб частинки могли тунелювати тільки у площині. Для опису термодинамічних властивостей такої системи у границі сильної взаємодії, оберемо модель $SU(4)$ -симетричну модель Фермі-Габбарда, з гамільтоніаном

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{Hubb} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=1}^4 \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i \sum_{\sigma' > \sigma=1}^4 \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'} \\ & + \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 (V_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Тут t – амплітуда тунелювання між сусідніми вузлами i та j , $c_{i\sigma}^\dagger(c_{i\sigma})$ – оператори народження (знищення) ферміона в псевдоспіновому стані σ на вузлі i . У рамках цієї моделі обмежимося тільки локальною взаємодією ферміонів, які знаходяться на одному вузлі, з амплітудою взаємодії U , незалежної від стану σ . Останній доданок описує потенціал пастки V_i , у якій знаходиться ґратка, та регулює середню густину заселення кожного вузла за допомогою хімічного потенціалу μ .

Для числового розв’язання наведеної моделі скористаємося алгоритмом DMFT з методом точної діагоналізації в якості домішкового розв’язувача та його просторовою модифікацією RDMFT (див. розділ 1.5). У відповідній моделі Андерсона (1.32) можна обмежитись випадком резервуара з $n_s = 4$ орбіталями. У випадку більшої кількості орбіталей резервуару, складність обчислень експоненційно зростає, не даючи значної переваги у точності для задачі пошуку границь фаз та обчислення ентропії.

З методу DMFT можливо отримати заселення середнє заселення кожним з чотирьох станів n_σ для кожного з вузлів оптичної ґратки. Це дає можливість побачити, що наведена система має три магнітні фази у стані діелектрика: парамагнітну (ПМ) та дві антиферромагнітні (АФМ) фази, які відрізняються упорядкуванням псевдоспінових станів (див. Рис. 2.1).

З чисто логічних міркувань легко зрозуміти, що за низьких температур система з чотирьох компонент не може мати просте періодичне упоряд-

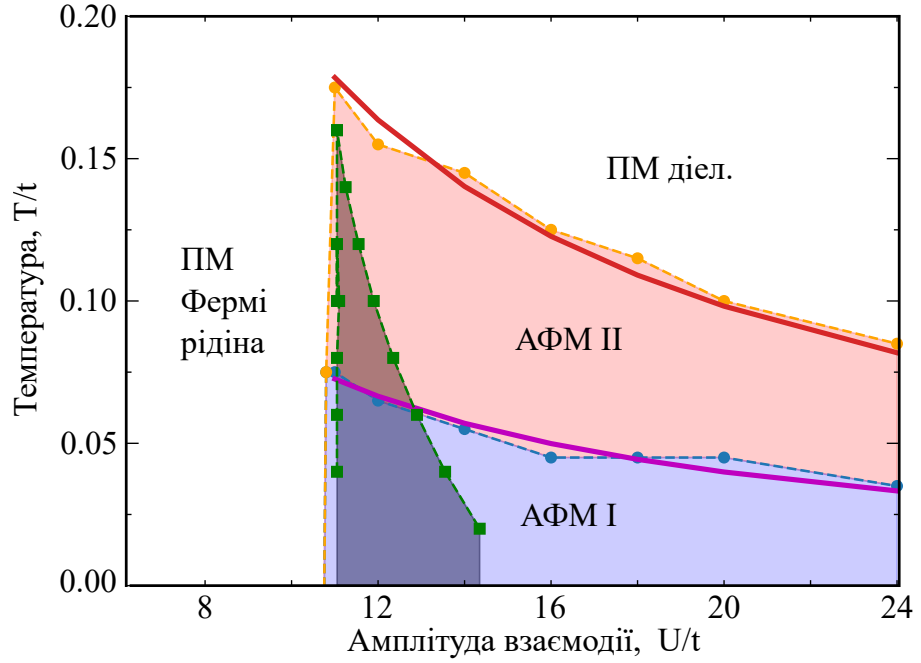
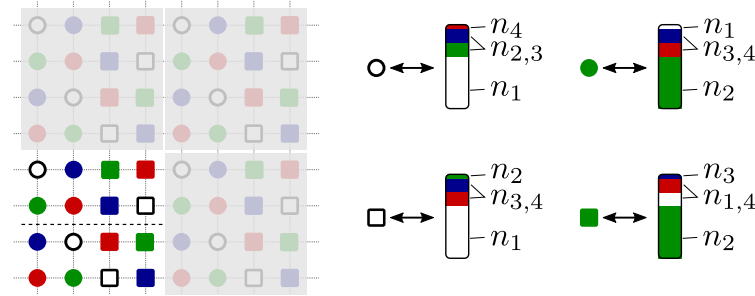
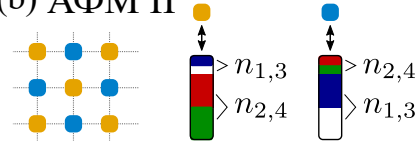


Рис. 2.1. Фазова діаграма $SU(4)$ -симетричної моделі Габбарда для квадратної геометрії ґратки та $n \approx 1$. Пунктирні лінії з символами відповідають результатам DMFT, а суцільні лінії є наближенням за законом $T_c \propto t^2/U$ з коефіцієнтами 0.79 and 1.96 для нижньої та верхньої границі, відповідно.

(a) АФМ I (плакетний)



(b) АФМ II



(c) ПМ

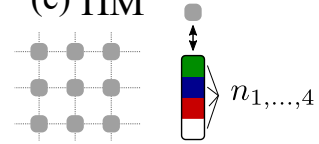


Рис. 2.2. Просторові впорядкування псевдоспінових компонент на квадратній ґратці при заповненні на одну чверть: (a) плакетне впорядкування, яке трансляційно симетрично покриває ґратку блоками 4×4 , (b) двопідґраткове впорядкування та (c) парамагнітне упорядкування. Для кожного з вузлів n_σ позначає імовірність вузла бути заселеним частинкою сорту σ .

кування: на квазіквадратній ґратці кожен вузол має чотирьох сусідів, що дає п'ять вузлів на які треба обрати по одній домінантній компоненті з чотирьох. У результаті DMFT обчислень з розподілу ферміонів на вузлах можливо побачити таку симетрію, що дозволить трансляційно покрити усю ґратку (див. Рис. 2.2(a)). Різними кольорами позначені вузли, які мають різні проєкції спіну з найбільшою імовірністю заселення. Ще одним окремим фактором виявляється густина атомів, що відповідає стану з найменшим заселенням на тому ж вузлі, що характеризується формою символу – коло чи квадрат. Інші дві компоненти на вузлі мають мати однакове заселення, дозволяючи побудувати покриття оптичної ґратки блоком 4×4 наведеним на Рис. 2.2(a). Одне з наочних пояснень чому дана фаза є антиферромагнітною, полягає у тому, що кожний з вузлів завжди оточений вузлами, де домінуючий псевдоспіновий стан відрізняється від своїх сусідів.

Підвищення температури зі стану АФМ-I призводить до зміни заселення на кожному з вузлів. Атоми в різних станах починають утворюють дві пари, у кожній з яких знаходяться псевдоспінові компоненти з однаковою ймовірністю заселення, як наведено на Рис. 2.2(b), формуючи двопідґраткове покриття. Останнє також є антиферромагнітним упорядкуванням (АФМ-II) за тією ж причиною, що кожен з вузлів оточений вузлами з іншим заселенням. Подальше підвищення температури системи вирівнює заселеності на кожному з вузлів, роблячи їх еквівалентними та утворюючи парамагнітну фазу (див. Рис. 2.2(c)).

Для того, щоб побудувати фазову діаграму 2.1 важливо знайти межі між різними магнітними фазами, коли система знаходиться у стані діелектрика Мотта. Для цього введемо два параметри порядку m_1 і m_2 , які характеризують намагніченість, як лінійні комбінації локальних заселеностей n_σ ,

$$\begin{aligned} m_1 &= n_{1*} - n_{2*}, \\ m_2 &= n_{1*} + n_{2*} + n_{3*} - 3n_{4*}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

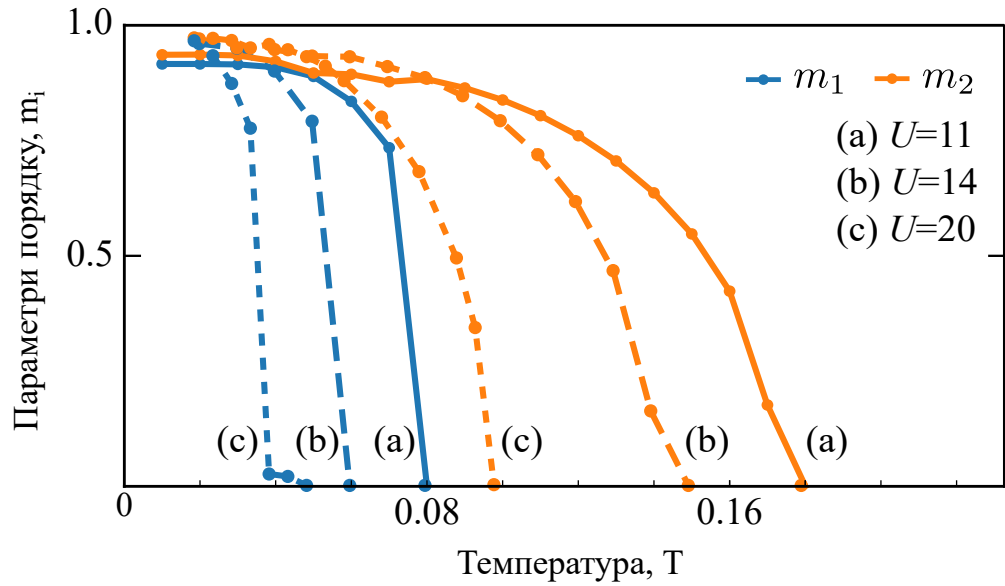


Рис. 2.3. Залежність параметрів порядку від температури за різних амплітуд взаємодії U : (a) $U = 11$, (b) $U = 14$, and (c) $U = 20$.

У цьому виразі зірочкою позначено заселеності псевдоспінових компонент, що вже впорядковані по спаданню значень, тобто $\max[n_\sigma] \equiv n_{1*} \geq \dots \geq n_{4*} \equiv \min[n_\sigma]$. У загальному випадку, параметри порядку можливо обрати й іншим чином, проте їх має бути два. Це твердження є наслідком існування двох умов для локального заповнення: 1) кожний з вузлів заповнений на чверть $\sum_\sigma n_\sigma = 1$, та 2) якісь два псевдоспіну мають однакові заселення $n_\alpha = n_\beta$, як це можна побачити для фази АФМ-I.

Параметри порядку m_1 та m_2 обрані таким чином, щоб кожен з них дорівнював нулю за різних переходів між магнітними фазами: m_1 – при переході до фази АФМ-II, а m_2 – у фазі ПМ.

Отримані залежності параметрів порядку від температури T за різних значень амплітуди взаємодії U , які наведено на Рис. 2.3, дають змогу судити про характер фазових переходів. В околі межі переходу між фазами намагніченість $m_1(T)$ різко спадає до нуля, у той час, як намагніченість $m_2(T)$ поводить себе неперервно. З цього можна прийти до висновку, що перехід між антиферомагнітними фазами АФМ-I та АФМ-II є переходом першого порядку, коли перехід від АФМ-II до ПМ – другого порядку.

Цікаво, що залежності критичних температур переходу між магнітними фазами T_{c1} та T_{c2} від амплітуди взаємодії можливо теоретично наблизити функцією $const \cdot t^2/U$. Наведену залежність можливо отримати, якщо перейти від гамільтоніана Габбарда (2.1) до ефективного гамільтоніана на границі сильної взаємодії (детальне виведення у розділі 1.4)

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{trap} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\sum_{k=1}^{15} \hat{S}_i^k \hat{S}_j^k - \frac{3}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right). \quad (2.3)$$

Тут введено сталу взаємодії $J = 4t^2/U$ та оператори спіну $\hat{S}_i^k = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=1}^4 \hat{c}_{i\sigma_1}^\dagger \lambda_{\sigma_1\sigma}^k \hat{c}_{j\sigma_2}$ на вузлі i , які визначаються одним з 15 генератором $SU(4)$ симетрії, узагальненими матрицями Гелл-Мана. Перші два доданки відповідають за взаємодію частинок на вузлі та взаємодію з потенціалом пастки оптичної ґратки, коли останній доданок регулюється заселенням частинками вузлів. При переході між різними магнітними фазами АФМ-I, АФМ-II та ПМ ці доданки не змінюються для наведеного випадку симетрії та заселення. Наступним чином, температури фазових переходів мають бути пропорційні сталій J , тобто пропорційні $\propto t^2/U$. Як можливо побачити на Рис. 2.1, неперервні криві, коефіцієнти для яких визначені методом найменших квадратів, насправді точно наближують межу фазового переходу в області сильної взаємодії $U \gg t$.

Для кращого розуміння знайдених критичних температур переходу, звернемо увагу на можливе існування гістерезису між магнітними фазами АФМ-I та АФМ-II. У рамках підходу DMFT, розрахунки починались з регіону найнижчих температур, де система знаходилась у фазі АФМ-I, та поступово підвищуючи температуру обчислювались значення параметрів порядку. Поступово система втрачає плакетне упорядкування, проте починає сходиться до двухпідґраткового упорядкування, яке описує фазу АФМ-II. Таким чином, знайдені відміченими фазами характеризують найбільші регіони існування відповідних АФМ фаз.

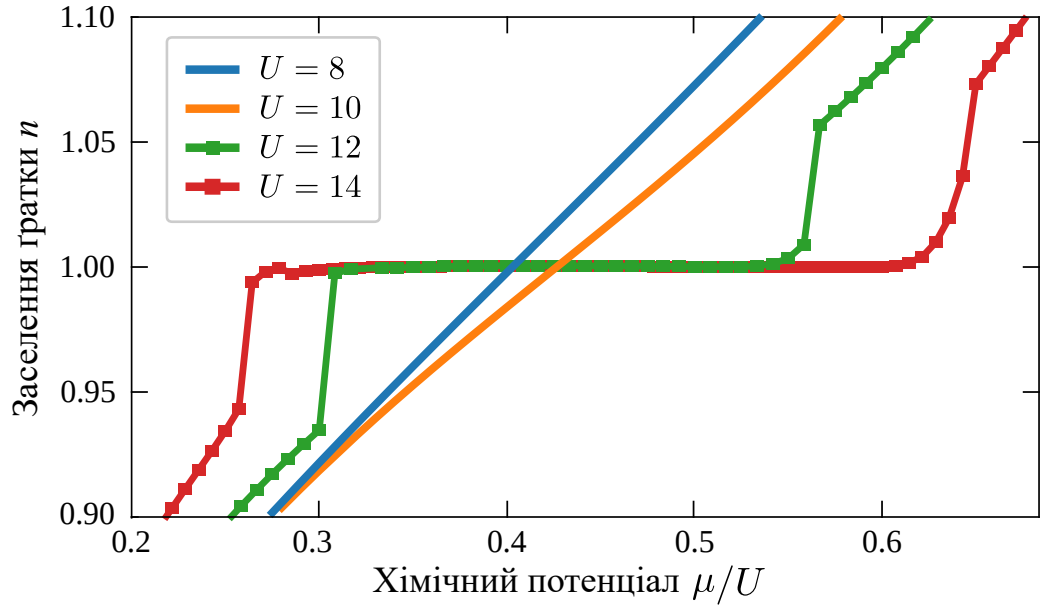


Рис. 2.4. Залежність заселення вузлів ґратки від хімічного потенціалу за різних амплітуд взаємодії U за значень температури $T = 0.1t$. Графіки за амплітуд $U = 8t$ та $U = 10t$ відповідають фазі фермі-рідини, а за амплітуд $U = 12t$ та $U = 14t$ – діелектричній фазі Мотта.

2.2. Аналіз ентропії та відповідні просторові розподіли

Окрім магнітного упорядкування атомів фермі-газу в експериментах з оптичними ґратками ще існує можливість безпосередньо знайти інші фізичні величини, як подвійна заселеність, так і ентропія. Зазвичай система ізольована від середовища зберігає загальну ентропію системи, проте локальна ентропія вузла залежить від положення цього вузла у ґратці. Для визначення останньої чисельно у рамках моделі Габбарда, використаємо співвідношення Максвелла

$$\frac{\partial s}{\partial \mu} = -\frac{\partial n}{\partial T}, \quad \Rightarrow \quad s(T, U; \mu_0) = \int_{-\infty}^{\mu_0} \left(\frac{\partial n}{\partial T} \right) d\mu. \quad (2.4)$$

Значення верхньої границі інтеграла визначається за умови заповнення нижньої зони ґратки на одну чверть, $n(\mu_0) = 1$. Для розрахунку локальної ентропії на кожному вузлі були чисельно обчислено значення заповнення, як

функції хімічного потенціалу, температури та амплітуди взаємодії $n(\mu, T, U)$, залежності якої від хімічного потенціалу наведено на Рис. 2.4. За малих значень амплітуди взаємодії система знаходиться у стані фермі-рідини з лінійною залежністю заселення від хімічного потенціалу, коли за великих значень взаємодії з'являється характерне плато для фази діелектрика Мотта.

За результатами обчислень отримаємо розподіл ентропії на частинку залежно від температури T та амплітуди взаємодії U (див. Рис. 2.5). На діаграмі відображено відповідні зони антиферромагнітного упорядкування у діелектричному стані Мотта (АФМ-I та АФМ-II), які визначені на фазовій діаграмі Рис. 3.2. При фіксованих значеннях амплітуди взаємодії, зниження температури призводить до зменшення даної ентропії, що є звичним результатом. Окрім цього, з діаграми можна помітити відомий ефект Померанчука [95, 96] – ізоентропійне підвищення амплітуди взаємодії призводить до зменшення температури: в зоні поруч з переходом між металевим станом та діелектричним станом Мотта лінії постійної ентропії спадають за температурою при зростанні амплітуди взаємодії, що відповідає більшій ентропійній ємності магнетиків з локалізованими спіновими станами порівняно зі станом фермі-рідини.

Критичне значення ентропії біля вершини фази АФМ-II становить $s_c^{\max} \approx 1.3k_B$ для випадку начвертьзаповненої ґратки з SU(4)-симетричним газом. Таке значення ентропії перевищує характерні, які можливо отримати в експериментах, як то для АФМ упорядкування в SU(4)-симетричній моделі Габбарда при половинному заповненні чи орбітального упорядкування в чотирикомпонентному [SU(2) × SU(2)]-симетричному газі ^{173}Yb при середній густині $n = 1.5$.

В експериментах ультрахолодний фермі-газ зазвичай утримується в оптичній пастці, яка утворена лазерами з гаусовим просторовим розподілом. Тому практичну цінність мають розподіли ентропії на частинку в оптичній пастці. Розповсюдженим наближенням до сферично-симетричного гаусового профілю інтенсивності поля в пастці є гармонічний потенціал, який можна

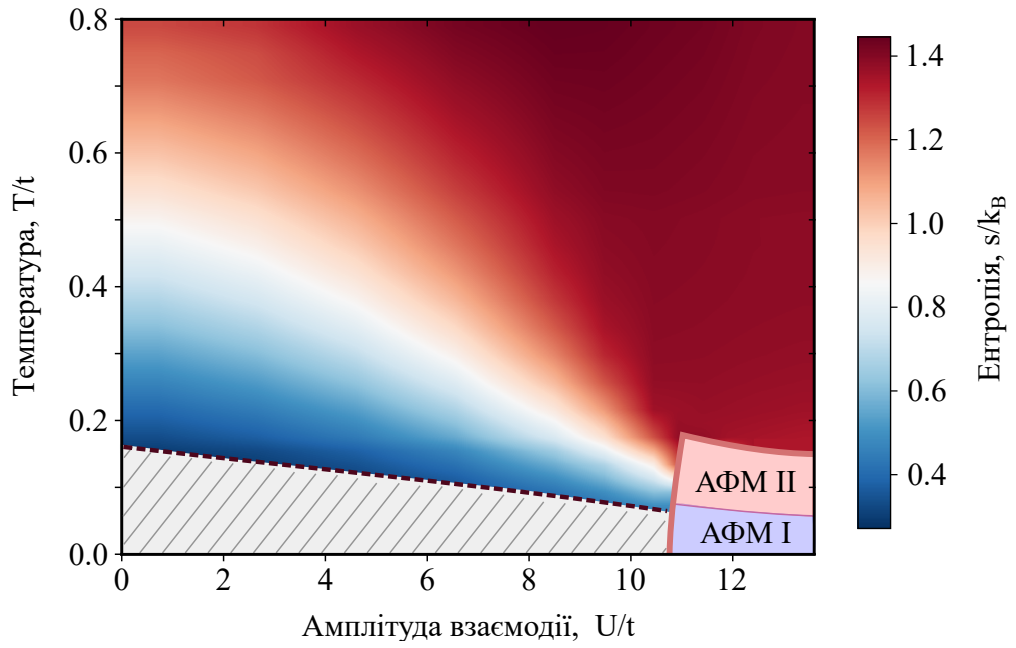


Рис. 2.5. Діаграма розподілу ентропії на частинку за четвертинного заповнення ($n = 1$), як функції температури та амплітуди взаємодії для $SU(4)$ -симетричної моделі Габбарда. Заштрихована ділянка відповідає межі точних чисельних обчислень методу DMFT.

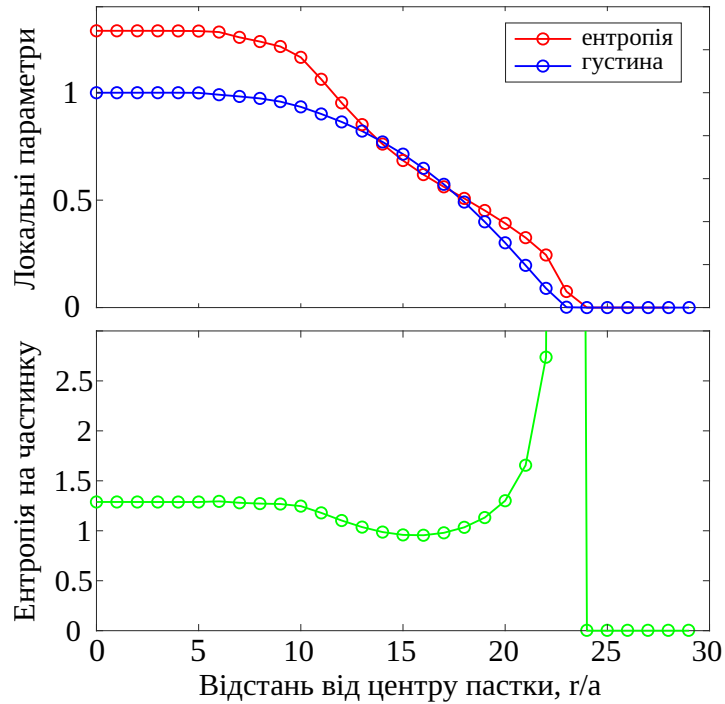


Рис. 2.6. Розподіл ентропії на вузлі та густини частинок в гармонічній пастці (верхня панель) та розподіл ентропії на частинку на вузлах оптичної ґратки у гармонічній пастці (нижня панель). Наведені значення обчислено за температури $T/t = 0.175$ та амплітуди взаємодії $U/t = 12$.

отримати згідно з розкладанням у ряд Тейлора $e^{-x^2} \approx 1 - x^2 + \mathcal{O}(x^4)$:

$$V(r_i) = \mu_0 - V \left(\frac{r_i}{a} \right)^2, \quad (2.5)$$

де r_i – відстань від центру пастки до i -го вузла ґратки і a – стала ґратки (відстань між сусідніми вузлами). Параметри потенціалу μ_0 та V обрані таким чином, щоб задовільнити умовам: 1) у центрі пастки заселення вузлів $n \approx 1$; 2) на краю пастки густина атомів прямує до нуля.

Таким чином, ми можемо отримати розподіли в координатному просторі, що зображені на Рис. 2.6. Можна побачити, що незважаючи на те, що на краях пастки густина є малою, ці ділянки є вкрай важливими з точки зору високої ємності ентропії, що має яскравий прояв у відповідних максимумах для розподілів ентропії, що припадає на одну частинку. Ефект є корисним з точки зору так званої ентропійної інженерії, де спеціальною конфігурацією пастки можна зосередити залишкову ентропію в певних частинах, а потім відокремити від основної, тим самим можна ефективно додатково охолоджувати газу для спостереження квантових кореляцій у низькотемпературних фазах.

Зауважимо, що метод динамічної теорії середнього поля з розв'язувачем точної діагоналізації не спроможний точно оцінити ентропію за усіх значень температур. Так, у заштрихованих ділянках на Рис. 2.5 ентропія на частинку перестає бути функцією, що монотонно спадає. Така поведінка є ознакою нефізичних результатів, що обумовлені обмеженням на скінчену кількість орбіталей резервуара.

Висновки до розділу 2

У розділі досліджено низькотемпературні характеристики чотири-компонентних фермі-газів в оптичних ґратках, що описуються SU(4)-симетричною моделлю Габбарда при заповненні зони на одну чверть. Сама

модель може описувати не лише низькотемпературну поведінку систем з холодними атомами, але й певні класи кристалічних матеріалів з подібними реалізаціями симетрій електронних компонентів [97,98].

Теоретичний аналіз було розроблено в рамках динамічної теорії середнього поля. Було показано, що в квазідвовимірній квадратній геометрії ґратки система демонструє послідовність фазових переходів, що пов'язана зі зніної ентропії, як тільки локальна взаємодія між атомами стає достатньою для початку розвинення діелектричного режиму Мотта, тобто при $U \gtrsim 11t$.

Виявлене плакетне впорядкування у досліджуваній системі можна розглядати як узагальнення граничного випадку – конфігурації димерів, впорядкованої за типом антиферромагнітної фази Нееля, проаналізованої в рамках SU(4)-симетричної моделі Гейзенберга [21]. Водночас, досліджувана двопідґраткова антиферромагнітна фаза з вищою ентропійною ємністю виникає аналогічно тому, як вона виникає в SU(3)-симетричній моделі Габбарда [99], або в SU($N \geq 3$)-симетричних моделях Гейзенберга [22].

За допомогою динамічної теорії середнього поля ми також проаналізували зону гістерезису метал-діелектрик і виявили, що її температурний діапазон практично збігається з діапазоном магнітного впорядкування, на відміну від моделі Габбарда з двома або трьома взаємодійними компонентами. Наш аналіз ентропії показує, що ця ділянка фазового переходу метал-діелектрик є першого порядку (на відміну від режиму кросовера за високих температур) і може бути досягнута в поточних та найближчих майбутніх експериментах з атомами лужноземельного типу в оптичних ґратках.

Окрім вимірювання магнітних кореляцій між різними ферміонними компонентами та аналізу пов'язаних структурних факторів, ми запропонували інші пов'язані термодинамічні величини як потенційні індикатори фазових переходів та багаточастинкових явищ у досліджуваній системі. Зокрема, подвійне локальне заповнення вузлів та стисливість також демонструють чіткі сигнали на фазових межах. Отримані залежності від ентропії надають кількісну інформацію про те, як систему можна ефективно охолодити за

допомогою ефекту Померанчука, та чи можна ефективно наблизитися до досліджуваних магнітно-впорядкованих фаз, починаючи з певних початкових значень температури або ентропії газу без ґратки в оптичній пастці.

Вплив теплових флуктуацій є додатковим фактором, який слід належним чином врахувати. Враховуючи обмеження самого підходу динамічної теорії середнього поля [69], отримані результати слід розглядати як приближні для квазідвовимірних геометрій ґраток, тобто їх необхідно правильно відносити до кореляцій скінченного діапазону, які є основним фокусом в експериментах з холодними атомами. Тому з теоретичної точки зору важливо аналізувати магнітні кореляції та термодинамічні величини за допомогою останніх розробок у більш просунутих теоретичних методах (див., наприклад, наукові праці [19, 100–102]).

РОЗДІЛ 3

ВПЛИВ ПРОСТОРОВОЇ АНІЗОТРОПІЇ ОПТИЧНОЇ ҐРАТКИ НА МАГНІТНІ ФАЗОВІ СТАНИ

3.1. Магнітні фази за різних значень анізотропії

В описі квантових систем багатьох частинок, беззаперечно, істотний вплив на їх магнітні властивості чинять просторові трансляційні симетрії періодичних потенціалів ґраток. Завдяки проведеним теоретичним дослідженням і експериментам вже відомі ефекти пригнічення чи посилення магнітних упорядкувань у трикутних ґратках чи ґратках каґоме для спінової симетрії $SU(2)$, а також ефекти геометричної фрустрації для спінової симетрії $SU(3)$.

Особливо цікавими у даному сенсі виявляються системи зі спіновою симетрією $SU(4)$ завдяки двом різним наявним фазам для фермі-газу у діелектричному стані Мотта (див. розділ 2.1) та можливості їх практичної реалізації в експериментах. Розглянемо $SU(4)$ -симетричний чотирикомпонентний фермі-газ за умови заселення вузлів $n \approx 1$ у анізотропній кубічній ґратці. Будемо покладати, що вздовж однієї з кристалографічних осей ґратки ферміони тунелюють з відмінною амплітудою, ніж у двох інших напрямках, у той час як взаємодія всіх чотирьох компонент псевдоспінів однакова між собою та відбувається локально на вузлі.

Таку ґратку з достатньо глибоким потенціалом можна описати моделлю Фермі-Габбрада, де взаємодія відбувається між парами ферміонів на одному вузлі, а тунелювання відбувається тільки між сусідніми вузлами ґратки. Гамільтоніан такої моделі записують наступним чином:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{Hubb} = & - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \sum_{\sigma=1}^4 \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i \sum_{\sigma' > \sigma=1}^4 \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'} \\ & + \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 (V_i - \mu_\sigma) \hat{n}_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

де амплітуда тунелювання набуває двох різних значень $t_{ij} = t_x = t_y \equiv t$ та $0 \leq t_{ij} = t_z \leq t$, якщо вузли i та j орієнтовані вздовж обраної кристалографічної осі, $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i\sigma}$) оператори народження та знищення частинок з псевдоспином σ та U – амплітуда, з якою взаємодіють частинки на одному вузлі. Для керування середнім числом заселення кожного з вузлів ґратки частинками введено хімічний потенціал μ_σ . Можливість знаходження ґратки у пастці враховано в останньому доданку наявності потенціалу V_i , який у подальших розрахунках будемо вважати $V_i = 0$, якщо не зазначено протилежне.

Фазові діаграми та магнітні упорядкування такої системи можна отримати за допомогою алгоритму динамічної теорії середнього поля, та його узагальнення на координатний простір (RDMFT). Проте відзначимо, що анізотропія явним чином впливає на визначення густини станів системи, що не взаємодіє, в умовах самоузгодження алгоритму (1.40) та (1.42).

Дисперсійне співвідношення для невзаємодійних частинок у випадку анізотропної кубічної ґратки можна записати як

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = -2t \left[\cos(k_x) + \cos(k_y) + \frac{t_z}{t} \cos(k_z) \right], \quad (3.2)$$

де k_α проєкції хвильового вектора на кристалографічні осі ґратки, нормовані на період ґратки a .

Аналогічно до виведення, що наведено в розділі 1.5, інтегральний вираз для невзаємодійної густини станів запишемо через дельта-функцію $\delta(\tilde{\varepsilon} + x + y + \frac{t_z}{t}z)$ з заміною $\alpha = \cos(k_\alpha)$. Подібно до рівняння (1.46), невзаємодійну густину станів опишемо рівнянням

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{2t\pi^3} \int dz \int dy \frac{1}{\sqrt{(1-y^2)(1-z^2)(1-(\tilde{\varepsilon} + y + \frac{t_z}{t}z)^2)}}, \quad (3.3)$$

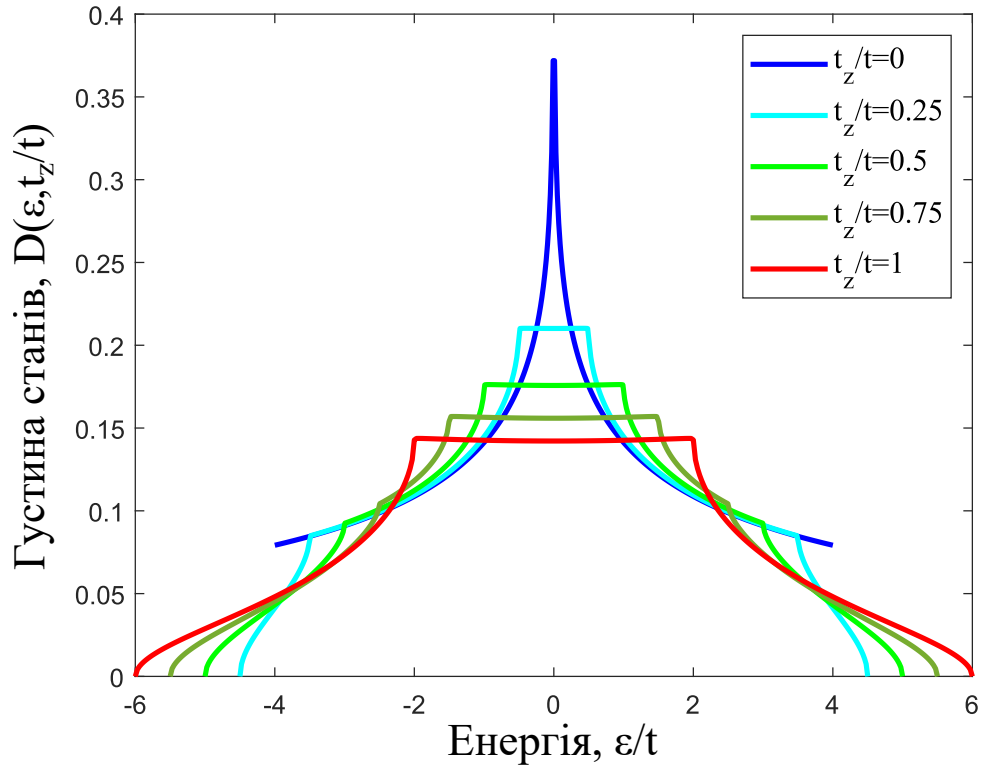


Рис. 3.1. Профілі густини станів для невзаємодійної системи на тривимірній ґратці за різних значень параметра анізотропії t_z/t .

або у термінах еліптичного інтегралу першого роду, $\mathcal{K}(m)$:

$$D(\varepsilon, t_z/t) = \frac{1}{8t\pi^3} \int dz \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \mathcal{K} \left(\frac{\sqrt{4t^2 - (\varepsilon + 2t_z z)^2}}{4t} \right). \quad (3.4)$$

За наведеною формулою побудовано розподіли густини станів за різних значень параметра анізотропії на Рис. [3.1](#). Коли тунелювання вздовж осі z відсутнє, $t_z = 0$, виникає розбіжність за нульової енергії, відома як сингулярність ван Гова. Поблизу границі зони Бріллюена, $\varepsilon \rightarrow -4 + 0$ та $\varepsilon \rightarrow 4 - 0$, функція $D(\varepsilon, t_z/t)$ неперервно наближається до скінченного значення, обертаючись у нуль на самій границі. Збільшення тунелювання прибирає сингулярність та породжує плато, які розширюються з ростом параметра анізотропії, а сама функція неперервно наближається до нуля на границі зони Бріллюена. З іншого боку, вплив сингулярності ван Гова можна побачити у наявності значень енергії, за яких густина станів має стрибок похідної.

З отриманими залежностями для невзаємодійної густини станів можна використати алгоритм DMFT, за чисельними результатами якого виявляють магнітні впорядкування ферміонного газу на ґратках. Для випадків ґратки з нез'єднаних площин, $t_z = 0$, та ізотропної кубічної ґратки, $t_z = t$, фазові діаграми наведено на Рис. 3.2. Відзначимо, що моделі Габбарда для двовимірної квадратної ґратки та для ґратки з незв'язаних між собою площин збігаються, що обумовлює збіг відповідних фазових діаграм.

Незалежно від параметра анізотропії, t_z/t , SU(4)-симетричний фермі-газ має дві антиферромагнітні фази, парамагнітну діелектричну фазу Мотта за сильної взаємодії, та фазу парамагнітної фермі-рідини. Зображені границі між фазами обмежують зони стабільності антиферромагнітних фаз. Окремим цікавим питанням є вивчення гістерезисної поведінки границі між станом ізолятора Мотта та фермі-рідини, а також між різними магнітними фазами, проте воно не є важливим для опису впливу анізотропії на кубічній ґратці.

Хоча фазові діаграми обох випадків подібні, для $t_z = t$ критична температура переходу від АФМ-II до ПМ стану більше максимальної критичної температури для випадку $t_z = 0$ майже у $3/2$ рази. Таке відношення критичних температур не є випадковим та обумовлено кількістю сусідніх вузлів, до яких частинка може тунелювати. Щоб явно побачити цей факт, запишемо відповідний гамільтоніан Гайзенберга, який можна отримати з гамільтоніана (3.1) зробивши перетворення Шріффера-Вольфа:

$$\hat{H}_{Heis} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sum_{k=1}^{15} \hat{S}_i^k \hat{S}_j^k. \quad (3.5)$$

Тут стала взаємодії $J_{ij} = 4t_{ij}^2/U$, залежно від орієнтації вузлів i та j у ґратці, може набувати значення $4t^2/U$ чи $4t_z^2/U$, а оператор спіну $\hat{S}_i^k$ на вузлі i визначається за допомогою узагальнених 4×4 матриць Гелл-Мана λ^k , як $\hat{S}_i^k = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=1}^4 \hat{c}_{i\sigma_1}^\dagger \lambda_{\sigma_1\sigma}^k \hat{c}_{j\sigma_2}$.

Оскільки гамільтоніан Гайзенберга описує у термінах спінів вузлів ґратки, то енергія переходу від фази АФМ-II до фази ПМ має бути пропорційна

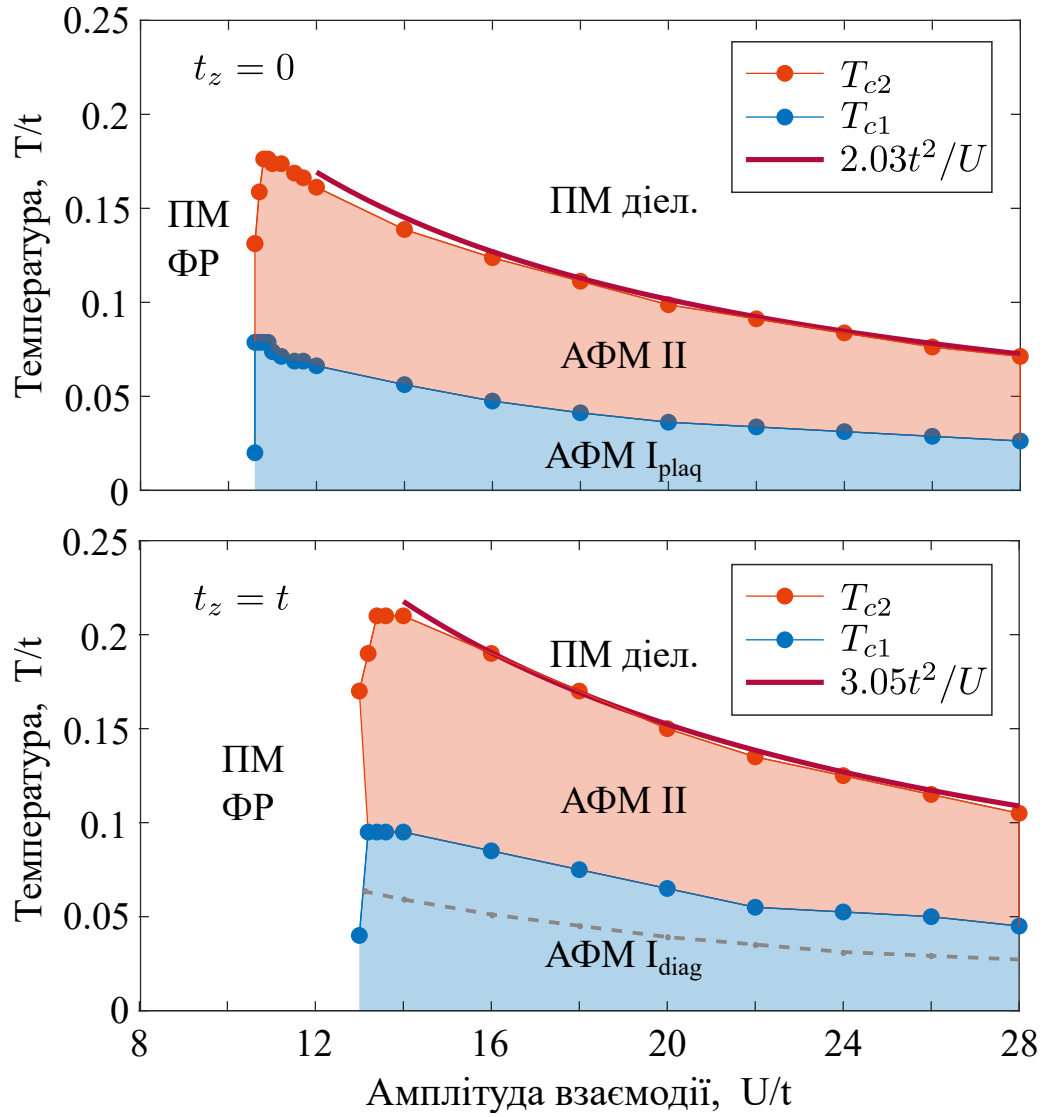


Рис. 3.2. Фазові діаграми $SU(4)$ -симетричної моделі Габбарда в ґратці з паралельних невзаємодійних площин (верхня панель) та ізотропічній кубічній ґратці (нижня панель). У обох випадках ґратки заповненні на чверть, $n = 1$. На обох панелях товстими лініями позначено апроксимацію критичної температури переходу між фазами через $J \propto t^2/U$ у випадку сильного зв'язку.

до сталої взаємодії J_{ij} . З одного боку в області сильної взаємодії критичної температури від амплітуди взаємодії можна з великою точністю наблизити законом $T_{c2} \propto t^2/U$, що зображено на Рис. 3.2 товстими лініями. З іншого боку, оскільки у гамільтоніані (3.5) присутнє підсумовування по усім сусіднім вузлам $\langle i, j \rangle$ де відбувається тунелювання частинок, то енергія переходу також пропорційна до кількості сусідніх вузлів, яких 6 для ізотропної кубічної ґратки та 4 для ґратки з нез'єднаних площин.

Окрім різниці у критичній температурі T_{c2} кількість сусідніх вузлів безпосередньо впливає на значення критичної амплітуди взаємодії, за якої відбувається перехід від стану антиферромагнітного ізолятора Мотта до фермі-рідини за низьких температур ($T \rightarrow 0$). Перехід від одного граничного випадку анізотропії ґратки до іншого можливо реалізувати перенормуванням амплітуди тунелювання t на множник $\sqrt{3/2}$. З іншого боку, критична амплітуда взаємодії U_c переходу між металевим станом і станом ізолятора Мотта пропорційна до ширини зони, яка також залежить від числа сусідів, тобто перенормовується на множник $3/2$. Таким чином, перехід від значень критичної температури $U_c \approx 10.8t$ для ґратки з паралельних площин до значень $U_c \approx 13t$ для анізотропної ґратки реалізується множенням на коефіцієнт $\sqrt{3/2}$.

На перший погляд, може здаватись, що анізотропія у кубічній ґратці ніяк суттєво не впливає на магнітні стани системи, проте результат виявляється не настільки очевидним, якщо ставити питання про упорядкування псевдоспінових компонентів на вузлах (див. Рис. 3.3). При низьких температурах, де існує фаза АФМ-I, за параметра анізотропії $t_z/t = 0$ псевдоспінові стани утворюють плакетне покриття у кожній з площин. Оскільки площини ніяк не пов'язані між собою процесами тунелювання, то впорядкування на них збігається з упорядкуванням на квадратній ґратці з точністю до трансляцій уздовж кристалографічних осей, дій обертань групи C_4 та відображень відносно осей. Завдяки такій свободі вибору ми задаємо початкові параметри моделі Андерсона таким чином, щоб отримати запропоноване на Рис. 3.3(а) покриття.

ття. На кожному з вузлів присутні: домінантний псевдоспін, кольором якого позначено вузол, два псевдоспіни з рівним заселенням, та один псевдоспін з найменшим заселенням. У зв'язку з цим, у плакетному покритті заселення вузла не однозначно визначається домінантним псевдоспином (кольором), але ще і псевдоспином з найменшим заселенням (символом – коло чи квадрат). Наприклад, нехай чорним кольором позначимо проєкцію спіну $\sigma = 1$. Тоді вузол з чорним колом має найімовірнішу першу компоненту та однакове заселення другою та третьою компонентами, коли вузол з чорним квадратом – однакові заселення третьою та четвертою компонентами.

Для випадку ізотропічної кубічної ґратки упорядкування у фазі АФМ-І реалізується значно простіше. Оскільки у кожного з вузлів по 6 сусідніх, до яких можливе тунелювання, то обираючи домінантну компоненту, існує можливість обрати по одній з трьох інших компонент для вузлів уздовж кожного напрямку кристалографічних осей, як зображено на Рис. 3.3(d). За результатами чисельних розрахунків, алгоритм DMFT підтверджує існування наведеної конфігурації, де на кожному з вузлів знаходиться один домінантний псевдоспін, а три інші псевдоспіни – рівноймовірні за заселенням, що розбиває ґратку на чотири набори паралельних діагональних вузлів з однаковим упорядкуванням псевдоспінів.

Відмітимо, що важливою є не сама відмінність конфігурацій упорядкування за різних геометрій, а саме як вони співвідносяться між собою. Параметр анізотропії t_z/t в експерименті регулюється глибиною потенціалу кожного вузла, тобто за допомогою зміни інтенсивності лазерів у z напрямку, що дає можливість неперервно задавати значення параметра. При цьому, плакетне упорядкування при $t_z/t = 0$ не переходить неперервно в діагональне упорядкування при $t_z/t = 1$, оскільки у площині плакетки кожен вузол оточений вузлами з усіма трьома іншими домінантними псевдоспінами, у той час як для діагонального – у кожній площині вузол завжди матиме сусідів з двома домінантними псевдоспінами.

З підвищенням температури, система переходить від відповідних фаз

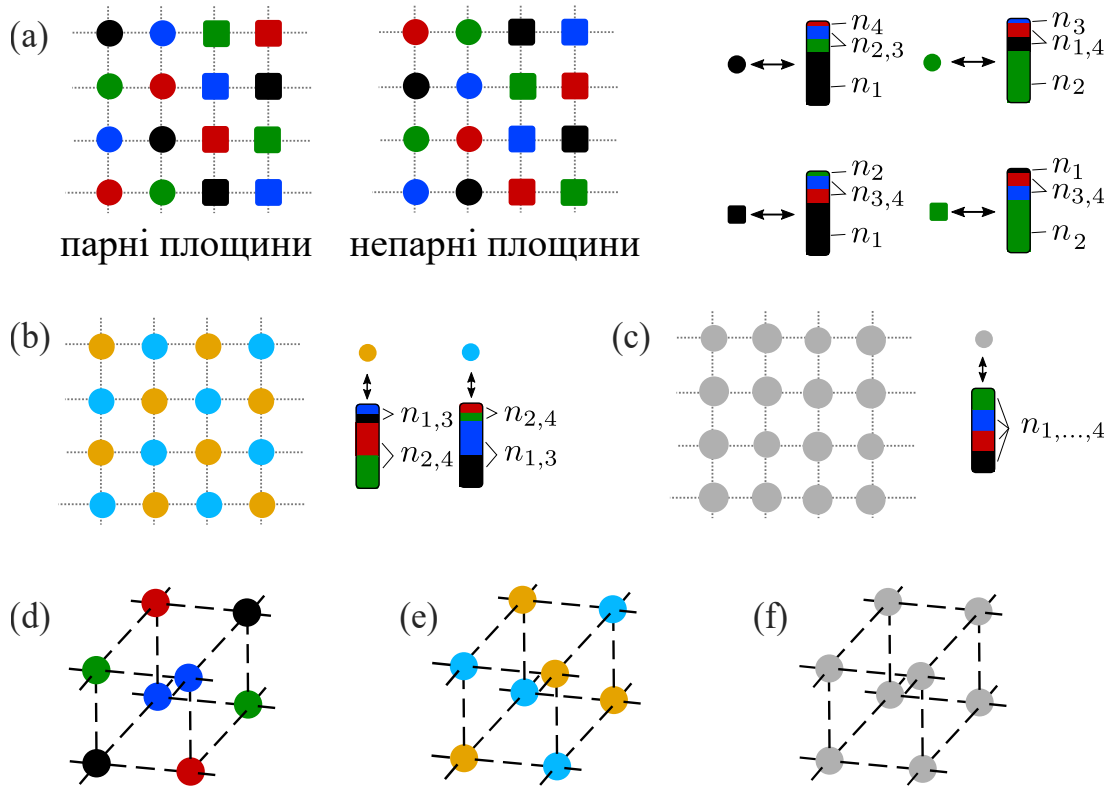


Рис. 3.3. Магнітні впорядкування псевдоспінових станів на вузлах ґратки в різних фазах для двох значень анізотропії $t_z = 0$ та $t_z = 0$: (а) АФМ-I плакетне та (d) АФМ-I діагональне; (b) та (e) двопідґраткове (АФМ-II); (c) та (f) парамагнітне (ПМ). Кольори позначають домінантний псевдоспіновий стан на вузлі, а на панелі (а) символами відрізняють вузли з різними пропорціями заселення вузла залишковими станами.

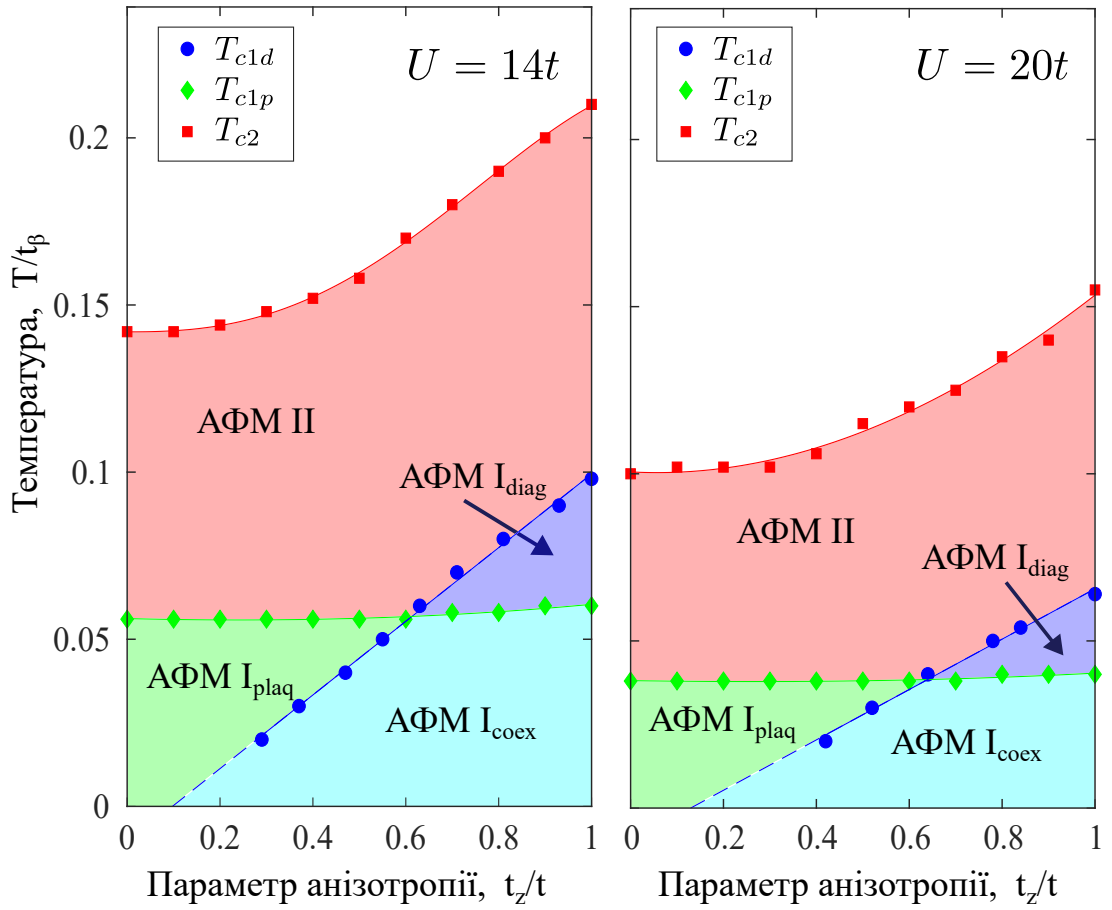


Рис. 3.4. Фазова діаграма стійкості магнітних фаз у стані діелектрика Мотта, як функція температури та просторової анізотропії, для різних значень амплітуди взаємодії U . Суцільні лінії є інтерполяцією даних з алгоритму DMFT, а пунктирні сині прямі відповідають екстраполяції в границі низьких температур $T \rightarrow 0$.

АФМ- I_{plaq} та АФМ- I_{diag} до двопідграткового впорядкування АФМ-II, яке однаковим чином покриває кубічну ґратку. Система демонструє групування псевдоспінових компонент на дві пари з більшим заселенням вузла на відповідній підґратці, як показано на Рис. 3.3(b) і 3.3(e). При цьому, перехід не відбувається неперервним вирівнюванням заселення доміантної компоненти спіну на вузлі з іншою, бо в обох наведених конфігураціях вузли однакові за заселенням належать до різних підґраток АФМ-II. Подальше підвищення температури усереднює заселення кожного з вузлів ґратки, приводячи систему до ПМ фазу, як показано на Рис. 3.3(c) і 3.3(f).

Суттєва відмінність типів фаз АФМ-I спонукає не обмежуватись лише

геометріями ізотропної кубічної ґратки та ґратки з невзаємодійних площин та визначити за яких параметрів та значень анізотропії виникає можливість співіснування плакетної та діагональної фаз. Для отримання фазової діаграми залежно від просторової анізотропії було використано чисельні алгоритми DMFT для знаходження границі між АФМ-II та ПМ фазами, та RDMFT – для границі між АФМ-I та АФМ-II фазами. У рамках даної задачі метод RDMFT застосовується для двох конфігурацій кластерів. Для знаходження плакетних упорядкувань домішковий розв’язувач використовується на кластері з 32 вузлів – двох сусідніх площин вузлів розміру 4×4 . Початкові конфігурації параметрів Андерсона на вузлах для обох площин пов’язані просторовою трансляцією уздовж кристалографічної осі, ураховуючи умову періодичності. Іншим видом кластера, для діагонального упорядкування, є набір з 8 сусідніх вузлів, які знаходяться у вершинах куба розміром $2 \times 2 \times 2$. Кожен з кластерів трансляційно повторено уздовж кристалографічних осей, щоб покрити систему розміром $8 \times 8 \times 8$. Залежно від значень параметрів моделі, як амплітуда взаємодії U , амплітуда тунелювання t та параметр анізотропії t_z/t , обидві чи тільки одна з двох конфігурацій дозволяють алгоритму збігтися.

Відмітимо, що опис термодинамічних характеристик методами подібними до RDMFT, призводить до впливу ефектів скінченності системи, які суттєво залежать від розмірів системи та зникають у ліміті нескінченної кількості вузлів. Хоча система з 8^3 вузлів може здаватись відносно невеликою, проте визначальним фактором є відносна розбіжність результатів алгоритму RDMFT при збільшенні кількості вузлів системи. У випадку задачі впливу анізотропії на області існування фаз, застосовуючи RDMFT алгоритм для системи розміру 12^3 вузлів, результати обчислень залишаються узгодженими з результатами системи з 8^3 вузлів.

Фазові діаграми чотириккомпонентного фермі-газу у діелектричному стані Мотта представлені на Рис. 3.4 у випадку двох різних значень амплітуди взаємодії U . Зображені АФМ зони відповідають максимальним діапазонам, де

все ще можуть існувати відповідні АФМ упорядкування, віддаючи пріоритет більш низькотемпературним фазам. Відповідно до аналізу за допомогою RDMFT, плакетне впорядкування АФМ фази може існувати за будь-яких значень анізотропії кубічної ґратки, $0 \leq t_z/t \leq 1$. Критична температура T_{c1} фазового переходу від АФМ-I_{plaq} до АФМ-II майже залишається сталою для будь-яких значень анізотропії, незначно зростаючи поруч з ізотропним випадком. З іншого боку, діагональне впорядкування виникає не для усіх кубічних ґраток з можливою анізотропією, а очікується, що з'являється за ненульової анізотропії. При цьому критична температура переходу T_{c1} лінійно зростає зі збільшенням параметра анізотропії. Пунктирна частина межі двох фаз відповідає екстраполяції даних, отриманих з алгоритму DMFT та його модифікації RDMFT, оскільки самі результати використаних алгоритмів стають неточними за таких температур як через можливі розбіжності, так і через більший вплив нелокальних ефектів. Перетин областей плакетної та діагональної конфігурацій визначає регіон температур та анізотропії оптичної ґратки, за яких обидві конфігурації співіснують та проявляють себе залежно від початкових умов системи та процесів термалізації, які відбувались з нею.

За температур більших критичної T_{c1} за будь-якої анізотропії ґратки система завжди має єдине АФМ-II упорядкування, що повністю відповідає очікуванням виходячи з Рис. 3.3. Згідно з Рис. 3.4, збільшення амплітуди взаємодії U призводить до зменшення значень критичних температур, за яких відбувається перехід між різними антиферромагнітними фазами, та перехід від АФМ-II до ПМ фаз. Така ж поведінка характерна для границі сильного зв'язку $U \gg t$, де критична температура переходу обернено пропорційна до амплітуди взаємодії, що явно узгоджується з фазовими діаграмами на Рис. 3.2.

З експериментальної сторони задачі вивчення АФМ-I фаз тільки за локальними заповненнями $\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle$ або термодинамічними величинами (стигливість, провідність, подвійна заселеність тощо), як це робить алгоритм

DMFT, може бути невиправдано складним. Алгоритм DMFT, у зв'язку з локальним наближенням, обмежений використанням тільки діагональних спостережуваних у просторі псевдоспінових компонент, тому безпосередньо локальні заповнення визначають конфігурацію упорядкування фермі-газу в оптичній ґратці. Для експериментів, навпаки, завдяки розвитку методів квантового газового мікроскопа [6, 7], є можливість виміряти нелокальні кореляції. Наприклад, спінові кореляції типу $\langle \hat{S}_{ki} \hat{S}_{kj} \rangle$, мають різні значення в різних антиферромагнітних фазах, таким чином можна визначати в плакетній чи діагональній конфігурації знаходиться система.

3.2. Розподіл псевдоспінових компонентів у гармонічному потенціалі оптичної пастки

На практиці оптичні ґратки для ультрахолодних газів реалізуються за допомогою набору когерентних лазерів, зокрема, для випадку кубічної ґратки – трьох перпендикулярних пар протилежно спрямованих лазерів (або трьох пар лазер-дзеркало). Пучки лазерів зазвичай мають просторовий розподіл інтенсивності, який найближче за все описується за допомогою розподілу Гаусса за відстанню від центра пучка. Таким чином уся оптична ґратка знаходиться у тривимірному гаусовому потенціалі. Розклавши експоненту даного розподілу в ряд Тейлора та обмежившись першими двома ненульовими доданками, $e^{-u^2} \approx 1 - u^2 + O(u^4)$, можна отримати квадратичне наближення до форми потенціалу, тобто гармонічний потенціал.

Саме тому має сенс чисельно дослідити для фермі-газу за ультранизьких температур розподіл заселення та магнітні упорядкування, наведених на Рис. 3.2, на вузлах оптичної ґратки обмеженої гармонічним потенціалом. Наявність пастки у моделі Габбарда враховується наявністю зовнішнього потенціалу V_j у гамільтоніані (3.1), який можна виразити як функцію від

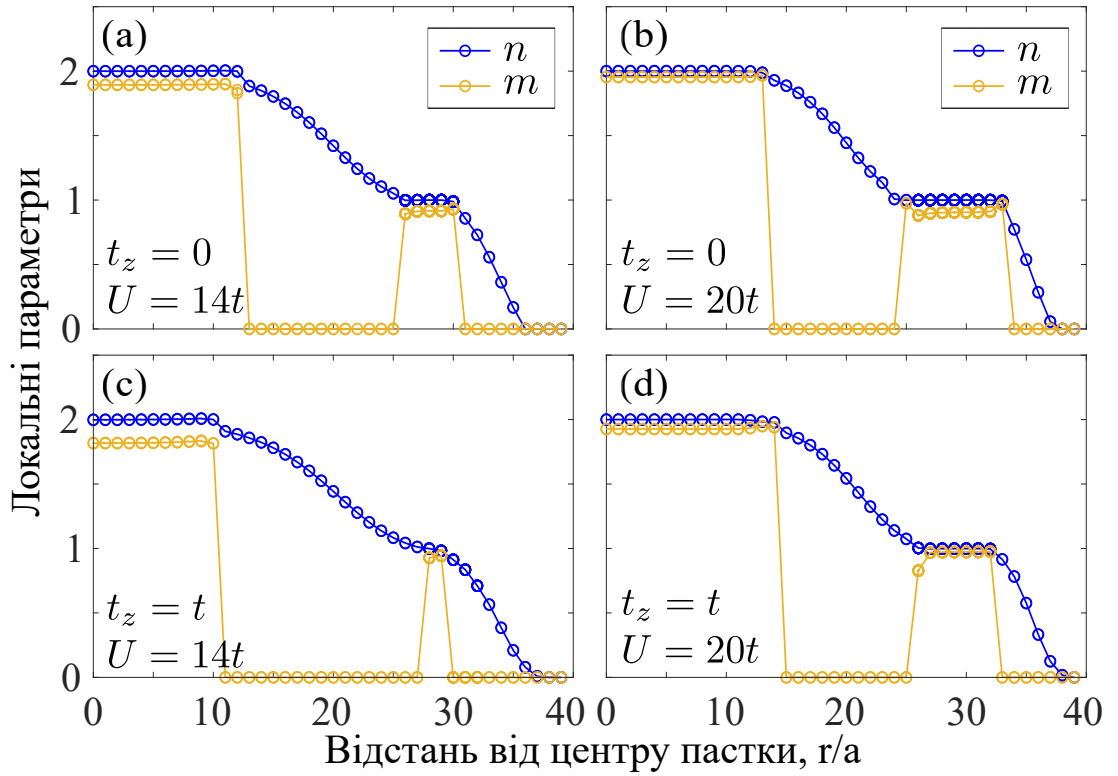


Рис. 3.5. Розподіл атомної густини n та параметру порядку m у гармонічній оптичній пастці за різних значень амплітуду тунелювання між площинами t_z та амплітуди взаємодії U . Система знаходиться за температури $T = 0.04t$ у випадку $U = 14t$ та $T = 0.03t$ у випадку $U = 20t$.

відстані вузла до центру ґратки r_j :

$$V_j(r_j) = V \frac{r_j^2}{a^2}, \quad (3.6)$$

де a – ґраткове число, яке позначає відстань між двома сусідніми вузлами (окремий випадок вектору ґратки для опису кубічної геометрії), а кривизна V і хімічний потенціал μ у гамільтоніані (3.1) обрано таким чином, щоб плато Мотта $n \approx 2$ знаходилось у центрі, а нульове заповнення вузлів на краях пастки.

Для кількісного аналізу магнітних упорядкувань атомів у ґратці введемо параметр порядку, зміна якого відповідає зміні фазового стану фермі-газу. На кожному вузлі i , упорядкуємо концентрацію псевдоспінів $n_{i1}, \dots, n_{i4}$ за зменшенням наступним чином, щоб набір $n_a \geq n_b \geq n_c \geq n_d \geq 0$ мав

$n_a = \max\langle\hat{n}_{i\sigma}\rangle$ та $n_d = \min\langle\hat{n}_{i\sigma}\rangle$. Тоді можна сформулювати дві характеристики, що описують стан системи у потенціалі пастки – повне заселення вузла n та параметр порядку m ,

$$\begin{aligned} n &= n_a + n_b + n_c + n_d, \\ m &= n_a + n_b - n_c - n_d. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Взагалі, параметр порядку можна визначити декількома способами. У рамках даного дослідження, АФМ-I мають два типи заселення вузлів: 1) одна домінуюча компонента псевдоспіну з найбільшим внеском, дві однаково заселені компоненти та одна компонента з найменшим заселенням для плакетного упорядкування; 2) одна домінуюча компонента та три інші компоненти з меншим однаковим заселенням для діагонального упорядкування. У обох випадках параметр порядку m спрощується до різниці між найбільшим та найменшим заселенням вузла $m = n_a - n_d$. У стані АФМ-II псевдоспіни групуються на дві пари з однаковим заселенням у кожній з пар, що дає параметр порядку $m = 2(n_a - n_d)$. У парамагнітному стані параметр порядку обертається на нуль, оскільки ймовірність заповнення вузла будь-яким з псевдоспінових компонентів є однаковою.

На Рис. 3.5 наведено розподіли густини станів n та магнітний параметру порядку m як функції відстані від центру пастки r за низьких температур глибоко в АФМ-I фазі. Важливо зазначити існування характерного плато Мотта за цілих значень заселення вузлів, $n \approx 1$ та $n \approx 2$, у стані Мотт-ізолятора. При цілих значеннях атомної густини n та великих значень амплітуд взаємодії $U \gg t$, зміна кількості частинок на вузлі призводить до зміни енергії взаємодії $\propto U$. Оскільки хімічний потенціал μ характеризує енергію необхідну для зміни кількості частинок у системі на одну, то тільки зміна на скінчене значення призводить до зміни заселення, що утворює регіон значень хімічного потенціалу з однаковим заселенням, воно ж плато. У центрі пастки за $n \approx 2$, фермі-газ має тільки двопідгратковий розв'язок [15], який

перетворюються у парамагнітну металеву фазу за межами плато. Віддаляючись до краю пастки з'являється інше плато Мотта $n \approx 1$, де вже виникає плакетна або діагональна АФМ-I фаза залежно від параметра анізотропії t_z/t на вузлі ґратки. Виходячи з причин появи плато, можна стверджувати, що збільшення амплітуди взаємодії U призводить до збільшення ширини плато, що збігається з результатами розподілів.

Окрім цього відмітимо особливості поведінки локальних спостережуваних поблизу країв кожного з плато. По-перше, кожен розподіл має очну перервність похідної $\partial n/\partial r$, особливо на границі між плато $n \approx 2$ та металевим станом. Така поведінка загально притаманна методам зі скінченними системами, у том числі алгоритму DMFT. З іншого боку значно складніший в обчисленнях алгоритм RDMFT без кластеризації для усієї ґратки має згладити цю поведінку, завдяки точнішим врахуванням ефектів близькості [103]. По-друге, на Рис. 3.5(b) останні вузли на плато $n \approx 1$ утворюють “роги” у розподілі параметра порядку. На відповідних вузлах формуються просторові кореляції, що відповідають вже не АФМ-I, проте більш стійкій до термальних флуктуацій фазі АФМ-II.

Висновки до розділу 3

В описі магнітних властивостей чотирикомпонентних газів з $SU(4)$ симетрією значну роль відіграють просторові симетрії самої оптичної ґратки. Для дослідження було обрано модель Фермі–Габбарда, яка описує начвертьзаповнену кубічну ґратку зі змінною амплітудою тунелювання уздовж тільки однієї з кристалографічних осей. За допомогою алгоритму DMFT було визначено магнітні фази у стані діелектрика Мотта для двох граничних випадків: ізотропна кубічна ґратка та ґратка з паралельних незв'язаних площин. У кожному з випадків існують по два антиферомагнітні фази та одну парамагнітну. Найнижчі за температурами магнітні фази АФМ-I_{plaq} та АФМ-I_{diag} мають різні упорядкування спінів на вузлах, що не дозволяє неперервним

чином перейти від однієї фази до іншої, змінюючи параметр анізотропії t_z/t . Для різних значень амплітуд взаємодії було отримано зони стійкості магнітних фаз у стані діелектрика Мотта для різних значень параметра анізотропії. Плакетне впорядкування може існувати за будь-яких розглянутих анізотропій ґратки, у той час як діагональне упорядкування швидко зникає з зменшенням амплітуди тунелювання уздовж обраної кристалографічної осі. Це призводить до появи зони співіснування двох різних типів магнітних упорядкувань, одне з яких може бути реалізовано в експерименті залежно від початкових умов системи. Отримані результати важливі для подальшого вивчення та визначення основного стану за ультранизьких температур за допомогою інших (точніших) теоретичних методів, зокрема, підходу тензорних мереж [104–106].

За наявності оптичних пасток за рахунок дії лазерних променів з гауссовими розподілами інтенсивності, було теоретично досліджено та побудовано просторові розподіли псевдоспінових компонентів $SU(4)$ -симетричного фермі-газу у гармонічному потенціалі для різних значень параметру анізотропії. У центрі пастки, з напівзаповненими вузлами ґратки, $n \approx 2$, тільки двох-підґраткове АФМ упорядкування може існувати за достатньо низьких температур. Подальше віддалення від центру пастки дає можливість існувати тільки неупорядкованій металавій фазі за умови $2 > n > 1$, поки не виникне плато Мотта $n \approx 1$. У цьому просторовому шарі можуть існувати АФМ-I фази з можливістю появи АФМ-II фаз на межах плато Мотта.

РОЗДІЛ 4

ЕФЕКТИВНІ СПІНОВІ МОДЕЛІ ФЕРМІ-ГАЗІВ З ПОРУШЕНОЮ СИМЕТРІЄЮ $SU(4)$ ТА ЇХ ФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ В ОПТИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛАХ

Важливим кроком у розумінні атомних газів за ультранизьких температур є вивчення їх властивостей у випадках порушення симетрії. У той час, як розділ 3 присвячений явищу спонтанного порушення неперервної симетрії в спіновому просторі, де геометричні характеристики ґратки впливають на можливі магнітні впорядкування чотирикомпонентної фермі-суміші, цей розділ присвячено дослідженню впливу явного порушення спінової симетрії в гамільтоніані системи. Під явним порушенням симетрії ми будемо мати на увазі випадок, коли атоми в станах з різним проєкціями спінів відрізняються за фізичними характеристиками, наприклад амплітудами тунелювання або парної локальної взаємодії в рамках опису моделлю Габбарда.

В умовах сучасних експериментів з досліджень властивостей квантових газів, реалізація таких систем виявляється найбільш прямолінійною за допомогою атомів лужних (на противагу від лужноземельних) металів, зокрема, ферміонного ізотопу калію ^{40}K для реалізації явного порушення симетрії [88, 92]. Цей ізотоп має 10 різних атомарних спінових проєкцій в основному стані, з яких існує можливість виділити бажану кількість компонентів (псевдоспінових станів) за допомогою просторового розділення Штерна–Герлаха в магнітному полі та подальшого використання резонансів Фешбаха.

Обмежуючись тільки чотирикомпонентним фермі-газом можливо реалізувати два цікавих випадки порушення симетрії $SU(4)$: 1) один зі псевдоспінових станів відрізняється від трьох інших компонент своєю амплітудою тунелювання чи амплітудою взаємодії, описуючи симетрію $SU(3) \times U(1)$; 2) псевдоспінові стани поділяються на дві групи по дві компоненти з однаковими амплітудами тунелювання чи однаковими амплітудами взаємодії у кожній з

груп, проте з відмінною амплітудою взаємодії між псевдоспіновими станами з різних груп, що описує симетрію $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$.

Для теоретичного опису фермі-газу необхідним кроком є правильно обрати фізичну модель для фермі газу. Однією з таких моделей є модель Фермі–Габбарда завдяки умовній простоті її ідеї та родючості на фізичні результати [107]. Проте явним недоліком цієї моделі є складність обчислень через розмір Гільбертового простору, ряд станів у якому має занадто високі енергії, тим самим може бути зайвим для опису низькотемпературних властивостей. Цей розділ здебільшого присвячено виведенню ефективних моделей за різних випадків порушення симетрії у ліміті сильного зв'язку, досить розповсюдженого на практиці випадку, де взаємодія частинок на вузлі значно переважає тунелювання між вузлами, а середня заселеність вузлів частинками є близькою до цілочисельних значень.

4.1. Ефективна спінова модель

Розглянемо узагальнену модель Фермі–Габбарда для чотирикомпонентної системи, яку можна описати за допомогою гамільтоніана

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=1}^4 t_{\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + h.c.) + \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 \sum_{\sigma' > \sigma}^4 U_{\sigma\sigma'} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'} + \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 (V_i - \mu_{\sigma}) \hat{n}_{i\sigma}. \quad (4.1)$$

У рамках цієї моделі частинки тунелюють між сусідніми вузлами $\langle i, j \rangle$ у кубічній оптичній ґратці з амплітудами t_{σ} , які залежать від стану σ , та локально взаємодіють з амплітудами $U_{\sigma\sigma'}$, якщо частинки знаходяться на одному вузлі. Кожен з цих процесів описується відповідно першим та другим доданком гамільтоніана (3.1) у термінах $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\hat{c}_{i\sigma})$ – операторів народження та знищення частинок у стані σ на вузлі i та оператору числа частинок $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma}$. Останній доданок враховує форму зовнішнього потенціалу V_i , у якому знаходиться розглянута оптична ґратка, та фіксує кількість частинок кожного псевдоспіну за допомогою хімічного потенціалу μ_{σ} . Відзначимо, що в

цьому розділі буде розглянуто окремий внесок явного порушення симетрії для просторово-однорідної системи, тому амплітуди тунелювання, взаємодії та хімічний потенціали не залежать від вузлів ґратки, а сама ґратка є кубічною та просторово ізотропною.

Хоча модель Фермі–Габбарда описує систему лаконічно з теоретичної точки зору, числові методи її розв’язання можуть вимагати суттєві обчислювальні потужності. Наприклад, для методів точної діагоналізації кількість станів зростає експоненційно з розмірами системи. Тому з практичного погляду, маємо використовувати спрощені моделі, наприклад коли частинки знаходяться здебільшого в локалізованому стані, тобто за границі сильного зв’язку, де $U_{\sigma\sigma} \geq t_{\sigma}$. Подібно до загального отримання ефективного спінового гамільтоніана SU(4)-симетричної моделі, яке виконано у розділі 1 за допомогою перетворення Шріффера–Вольфа, у цьому розділі наведемо виведення ефективних моделей для двох випадків порушення симетрії – SU(3)×U(1) та SU(2)×SU(2)×U(1) – та двох випадків цілого заповнення вузлів ґратки – $n \approx 1$ та $n \approx 2$. Чисельні розв’язки кожного з далі наведених ефективних гамільтоніанів значно зменшують потребу в обчислювальних ресурсах і водночас моделі зберігають усі складові для опису низькоенергетичних особливостей вихідної моделі Фермі–Габбарда.

4.1.1. Випадок заповнення зони на одну чверть

Одним з визначальних для моделі параметрів є середнє заповнення вузлів $n = \sum_{\sigma} \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle$. Для нецілих значень n система має, як правило, металеву поведінку (або за певних умов доволі нетривіальні фази зі смугами, надпровідними кореляціями тощо), у той час як за цілих значень з’являються різнопланові кореляції та відповідні явища: антиферромагнетизм, стан ізолятора Мотта, орбітальне або зарядове впорядкування тощо. Для системи з чотирьох фермі-компонент існують лише два принципово різних випадки четвертинного та половинного заповнення ґратки – $n \approx 1$ та $n \approx 2$ відповідно,

– оскільки заповнення $n \approx 3$ подібно до четвертинного через наявність симетрії «частинка-дірка», де відсутність одного з чотирьох псевдоспінових станів на вузлі еквівалентна наявності трьох інших станів.

Розглянемо у першу чергу випадок, коли середнє заповнення на вузол ґратки $n \approx 1$. Відмітимо, що тільки за такого заповнення найнижчий енергетичний стан не залежить від енергії взаємодії, що дозволяє отримати загальну формулу для будь-якого порушення симетрії. Причиною цього факту виявляється, що стану з найменшою енергією для багаточастинкової системи ферміонів є одинарне заселення на кожному вузлі, оскільки енергія взаємодії відсутня між частинками. Приведемо детальне отримання ефективного Гамільтоніана для загальної симетрії системи з чотирма псевдоспіновими станами. У виведенні ми обмежимося лише процесами порядку t^2/U , оскільки вони вносять найбільший внесок у рамках теорії збурень, тим самим розглядаючи тільки віртуальні процеси на двох вузлах.

Розіб'ємо гамільтоніан (4.1) на чотири доданки $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} + \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{ext}$, де

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,+} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\sigma, \sigma'} t_{\sigma} (\hat{n}_{i\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + (i \leftrightarrow j)), \quad (4.2)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,-} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\sigma, \sigma'} t_{\sigma} (\hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'} + (i \leftrightarrow j)), \quad (4.3)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_U = \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 \sum_{\sigma' > \sigma}^4 U_{\sigma\sigma'} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma'}, \quad (4.4)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{ext} = \sum_i \sum_{\sigma=1}^4 (V_i - \mu_{\sigma}) \hat{n}_{i\sigma}. \quad (4.5)$$

Тут скороченим записом $\sum'_{\sigma, \sigma'}$ позначено підсумовування за усіма можливими псевдоспіновими станами $\sigma \in \{1, 2, 3, 4\}$ та $\sigma' \neq \sigma$. У свою чергу, частинами гамільтоніана $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$ і $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$ описано процеси, які збільшують та зменшують енергію системи, відповідно. У випадку четвертинного заповнення ґратки розглядаються лише процеси, які переводять систему з основного стану або

до нього – з однією частинкою на вузлі. Тому тунелювання ферміона в стані σ до вузла, зайнятого ферміоном у стані σ' , підвищує енергію на величину $U_{\sigma\sigma'}$, а зворотний процес – навпаки, знижує. Доданки $\hat{\mathcal{H}}_U$ та $\hat{\mathcal{H}}_{ext}$ повністю відповідають останнім двом доданкам гамільтоніана Фермі–Габбарда (4.1).

Виконавши перетворення Шріффера–Вольфа, яке описане у розділі 1, та ввівши довільний оператор $\hat{S}$, можна отримати ефективний гамільтоніан (1.20) у термінах комутаторів. Обчислимо явно комутатор між підвищувальним гамільтоніаном та гамільтоніаном взаємодії,

$$\begin{aligned} \left[\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_U \right] &= - \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \sum_{\sigma_4 > \sigma_3=1}^4 t_{\sigma_2} U_{\sigma_3 \sigma_4} \left[\hat{n}_{i\sigma_1} \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \right. \\ &\quad \left. + (i \leftrightarrow j), \hat{n}_{i\sigma_3} \hat{n}_{i\sigma_4} + \hat{n}_{j\sigma_3} \hat{n}_{j\sigma_4} \right] \\ &= \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 t_{\sigma_2} U_{\sigma_1 \sigma_2} (\hat{n}_{i\sigma_1} \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} + (i \leftrightarrow j)) \\ &\equiv - \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 U_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{\mathcal{H}}_{t,+}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Оскільки у даному наближенні на двох вузлах i та j можуть знаходитись тільки дві частинки, то дії операторів вище породять символи Кронекера $\delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4}$ або $\delta_{\sigma_2 \sigma_3} \delta_{\sigma_1 \sigma_4}$. Аналогічним чином отримуємо комутатор для знижувального гамільтоніана

$$\left[\hat{\mathcal{H}}_{t,-}, \hat{\mathcal{H}}_U \right] = - \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 t_{\sigma_2} U_{\sigma_1 \sigma_2} (\hat{c}_{j\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{i\sigma_2} \hat{n}_{i\sigma_1} + (i \leftrightarrow j)) \equiv \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 U_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{\mathcal{H}}_{t,-}.$$

Оберемо оператор $\hat{S}$ наступним чином:

$$\hat{S} = i \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \frac{\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}}{U_{\sigma_1 \sigma_2}}. \quad (4.7)$$

Тоді за допомогою прописаних комутаційних співвідношень, можна значно

спростити вирази для комутаторів

$$[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] = i \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \left(\hat{H}_{t,-} - \hat{H}_{t,+} \right) = i \left(\hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right), \quad (4.8)$$

$$[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U]] = - \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \left[\frac{\hat{H}_{t,-} - \hat{H}_{t,+}}{U_{\sigma_1 \sigma_2}}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right]. \quad (4.9)$$

Підставляючи значення комутаторів до гамільтоніана ефективної моделі (1.20), отримаємо

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{ext} - \frac{1}{2} \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \left[\frac{\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}}{U_{\sigma_1 \sigma_2}}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{t^3}{U^2} \right). \quad (4.10)$$

Отриманий ефективний гамільтоніан описує систему в основному стані, тому з останнього доданку мають залишитися тільки процеси типу $\hat{H}_{t,-} \hat{H}_{t,+}$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \left[\frac{\hat{\mathcal{H}}_{t,-} - \hat{\mathcal{H}}_{t,+}}{U_{\sigma_1 \sigma_2}}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right] \\ &= \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \sum_{\sigma_3 \neq \sigma_4=1}^4 \frac{t_{\sigma_1} t_{\sigma_3}}{U_{\sigma_1 \sigma_2}} [\hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \hat{n}_{j\sigma_1} + (i \leftrightarrow j)] [\hat{n}_{i\sigma_3} \hat{c}_{i\sigma_4}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_4} + (i \leftrightarrow j)] \\ &= 2 \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma_1 \neq \sigma_2=1}^4 \left(\frac{t_{\sigma_1}^2 + t_{\sigma_2}^2}{2U_{\sigma_1 \sigma_2}} \hat{n}_{i\sigma_2} \hat{n}_{j\sigma_1} - \frac{t_{\sigma_1} t_{\sigma_2}}{U_{\sigma_1 \sigma_2}} \hat{c}_{i\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{j\sigma_2} \hat{c}_{i\sigma_1} \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Підставляючи значення комутатора та змінюючи позначення псевдоспінів з σ_1/σ_2 на σ/σ' , отримуємо узагальнену формулу для ефективного спінового гамільтоніана для чотирикомпонентного фермі-газу у ліміті сильного зв'язку:

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{ext} - \sum_{\langle i;j \rangle} \sum_{\sigma=1}^4 \sum_{\sigma' \neq \sigma}^4 \left(\frac{t_{\sigma}^2 + t_{\sigma'}^2}{U_{\sigma \sigma'}} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{j\sigma'} - \frac{2t_{\sigma} t_{\sigma'}}{U_{\sigma \sigma'}} \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma'} \right). \quad (4.12)$$

Проаналізуємо результат з фізичної сторони за допомогою опису процесів. У рамках поставленої задачі на двох вузлах i та j на яких знаходиться по

одній частинці, нас цікавлять тільки ті процеси, які переводять систему з основного стану у той же самий чи інший основний стан. У першому випадку, одна з частинок тунелює до сусідньої, чим створює віртуальний стан, а потім повертається на свій вузол. Для ферміона з псевдоспіном σ амплітуда такого процесу буде пропорційна до t_σ^2 . Проте такий же процес може бути для ферміона на іншому вузлі з псевдоспіном σ' . Це приводить до того, що амплітуда процесу, який повертає систему в початковий стан має бути пропорційна до $t_\sigma^2 + t_{\sigma'}^2$. Другий процес – обмін ферміонів на вузлах місцями, – відбувається з амплітудою пропорційною до амплітуд тунелювання кожної з частинок, тобто пропорційна $t_\sigma t_{\sigma'}$. Ці ж процеси відповідають першому та другому доданку у дужках ефективного гамільтоніана (4.12).

Попри прозорість сенсу кожного з доданків такого гамільтоніана, історично подібну спінову модель ще з вивчення $SU(2)$ симетрії записують у термінах спінових операторів на вузлі, тому далі окремо для кожного випадку порушення $SU(4)$ симетрії введемо ефективні гамільтоніани в іншій формі.

Першим розглянемо випадок, коли перші три з чотирьох псевдоспінів мають однакову амплітуду тунелювання t_α , а останній – амплітуду t_β . Також обрані три псевдоспіни взаємодіють між собою з однаковою амплітудою U_α та кожен з них взаємодію з четвертим з амплітудою U_β . Таким чином, у матричній формі маємо наступні амплітуди тунелювання та взаємодії

$$t_\sigma = \begin{pmatrix} t_\alpha \\ t_\alpha \\ t_\alpha \\ t_\beta \end{pmatrix} ; \quad U_{\sigma\sigma'} = \begin{pmatrix} 0 & U_\alpha & U_\alpha & U_\beta \\ U_\alpha & 0 & U_\alpha & U_\beta \\ U_\alpha & U_\alpha & 0 & U_\beta \\ U_\beta & U_\beta & U_\beta & 0 \end{pmatrix} .$$

Для такого типу порушення “три частинки до одної”, воно ж $SU(3) \times U(1)$,

ефективний гамільтоніан матиме вигляд

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{2t_\alpha^2}{U_\alpha} \sum_{\sigma=1}^3 \sum_{\sigma' \neq \sigma}^3 \left(\hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{j\sigma'} - \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma'} \right) \right. \\ \left. + \sum_{\sigma=1}^3 \left(\frac{(t_\alpha^2 + t_\beta^2)}{U_\beta} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{j4} - \frac{2t_\alpha t_\beta}{U_\beta} \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i4}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{j4} + (i \leftrightarrow j) \right) \right], \quad (4.13) \end{aligned}$$

якщо ввести доданок $\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{ext}$. Для подальшого спрощення виразу введемо генератори SU(4) симетрії $\lambda_{\sigma\sigma'}^i$, також відомі як узагальнені матриці Гелл-Мана. Подібно до випадку SU(2) симетрії, генераторами якої є три Паулі матриці, неперервну групу симетрій SU(4) визначають $4^2 - 1 = 15$ генераторів, які мають задовольняти умові ортонормування $\text{Tr}(\lambda^i \lambda^j) = 2\delta_{ij}$. Явно генератори можна записати у матричній формі наступним чином:

$$\begin{aligned} \lambda^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda^4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda^7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^9 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda^{10} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^{11} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^{12} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda^{13} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \lambda^{14} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} & \lambda^{15} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Відзначимо, що всі недиагональні матриці формуються подібним чином до σ_x та σ_y матриць Паулі записаних для різних пар псевдоспинових станів. Таким чином перші три матриці $\lambda^{1,2,3}$ у собі формують SU(2) підгрупу для перших двох станів, оскільки їх можна перезаписати у термінах матриць Паулі, як

$\lambda^{1,2,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \sigma_{x,y,z}$. Відповідно, перші вісім матриць λ^i формують підгрупу $SU(3)$. Вводячи псевдоспінові оператори $\hat{S}_i^k = \frac{1}{2}\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \lambda_{k,\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma'}$ ефективний гамільтоніан (4.13) можна спростити до

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eff} = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[J_\alpha \left(\sum_{k=1}^8 \hat{S}_i^k \cdot \hat{S}_j^k - \frac{1}{3} \hat{n}_i^\alpha \hat{n}_j^\alpha \right) \right. \\ \left. - J_{\alpha\beta}^\parallel \left(\hat{n}_i^\alpha \hat{n}_j^\beta + \hat{n}_i^\beta \hat{n}_j^\alpha \right) + J_{\alpha\beta}^\perp \sum_{k=9}^{14} \hat{S}_i^k \cdot \hat{S}_j^k \right] + \hat{\mathcal{H}}_0. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Коефіцієнти J , що наведені тут, відіграють роль сталих взаємодії різних процесів та визначаються як $J_\alpha = 4t_\alpha^2/U_\alpha$, $J_{\alpha\beta}^\parallel = (t_\alpha^2 + t_\beta^2)/U_\beta$ та $J_{\alpha\beta}^\perp = 4t_\alpha t_\beta/U_\beta$, коли оператори $\hat{n}_i^\alpha = \hat{n}_{i1} + \hat{n}_{i2} + \hat{n}_{i3}$ та $\hat{n}_i^\beta = \hat{n}_{i4}$ описують число частинок кожної з груп псевдоспінів. Перший доданок гамільтоніана (4.14) безпосередньо описує процеси у яких фігурують тільки частинки з першими трьома псевдоспінами. Оскільки амплітуди тунелювання та взаємодії між ними однакові, то ці процеси мають формувати гамільтоніан Гейзенберга для $SU(3)$ симетричної моделі. Другий доданок описує віртуальні процеси для четвертого псевдоспіна на одному вузлі ґратки та одним з перших трьох псевдоспінів на іншому вузлі, де частинка тунелює на сусідній вузол та повертається на свій. Аналогічно третій доданок описує процеси обміну частинок вузлами ґратки.

Відзначимо, по-перше, що $2J_{\alpha\beta}^\parallel \geq J_{\alpha\beta}^\perp$, тобто за значної відмінності амплітуд тунелювання процеси перескоку та повернення тих самих частинок домінують над процесами обміну за відсутності зовнішнього поля. По-друге, за умов $t_\beta \ll t_\alpha$ та $U_\beta \gg U_\alpha$, домінантним виявляється перший доданок гамільтоніана Гейзенберга. Це твердження можна інтуїтивно пояснити, оскільки з умови $t_\beta \ll t_\alpha$ перші три псевдоспіни мають більшу рухомість, а з умови $U_\beta \gg U_\alpha$ випливає, що взаємодія перших трьох псевдоспінів з четвертим має більший надлишок енергії, тобто, такі віртуальні процеси є менш енергетично вигідними.

Важливим фактором для перевірки отриманої моделі є збіг енерге-

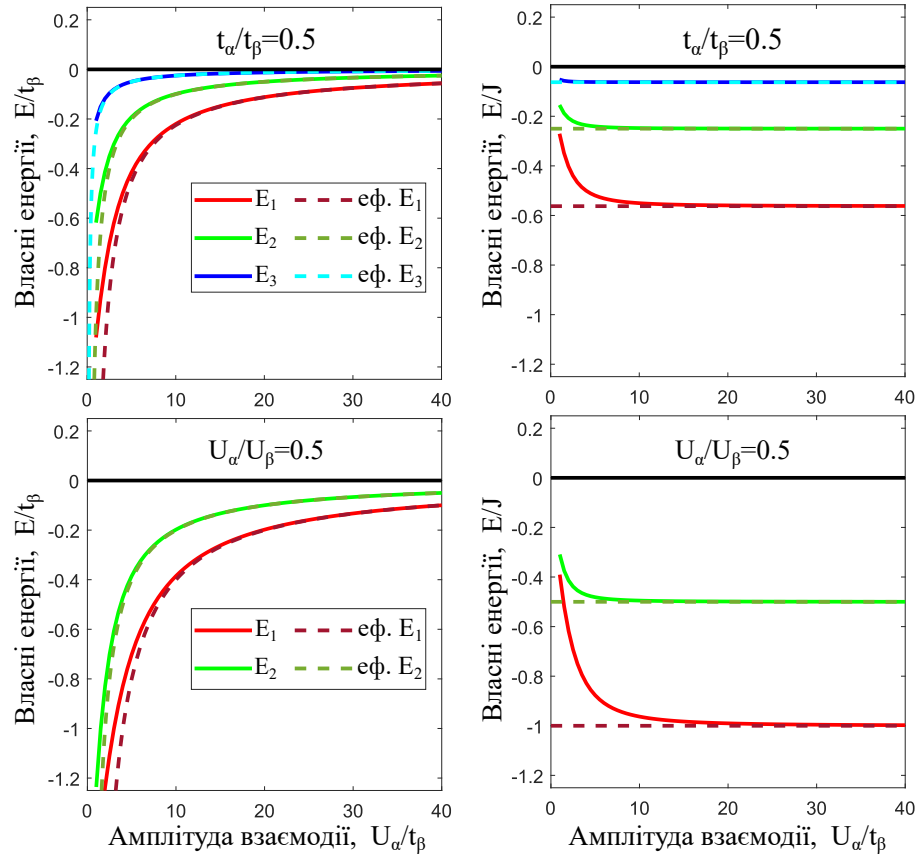


Рис. 4.1. Енергетичні спектри моделей Габбарда (неперервні лінії) та ефективної моделі Гейзенберга (пунктирні лінії) для випадку начвертьзаповненої ґратки за спінової симетрії $SU(3) \times U(1)$. У верхніх панелях амплітуди відносяться $U_\alpha/U_\beta = 1$, $t_\alpha/t_\beta = 0.5$, коли у нижніх панелях – $U_\alpha/U_\beta = 0.5$, $t_\alpha/t_\beta = 1$. В обох випадках для нормування обрано сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U_\alpha$.

тичних спектрів зі спектрами моделі Габбарда поблизу основного стану за сильної взаємодії. Тому для ефективної спінової моделі (4.14) та моделі Габбарда (3.1) були безпосередньо розраховані власні енергії як функції амплітуди взаємодії U_α та зображені на Рис. 4.1. Для наочності розглянемо окремо вплив відмінностей в амплітудах тунелювання (верхні панелі) та в амплітудах взаємодії (нижні панелі). На правих панелях зображені енергетичні спектри перенормовані на сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U_\alpha$ для визначення регіону збіжності двох моделей, які можливо побачити за амплітуд взаємодії $U_\alpha/t_\beta \gtrsim 10$.

У випадку $SU(4)$ симетрії за накладених умов на кількість частинок на

вузлі ($n_i = 1$) існує лише основний та один верхній збуджений мультиплет $E = 0$ з кратностями виродження 6 та 10 відповідно. За постійної амплітуди тунелювання 6-кратний основний стан розпадається на два енергетичних стани E_1 та E_2 з кратністю 3, які розходяться один від одного при збільшенні відношення U_β/U_α , так що у ліміті $U_\beta \gg U_\alpha$ енергетичний рівень E_2 збігається з рівнем $E = 0$. У такому ліміті, вирішальним виявляється перший доданок гамільтоніана (4.14) висвітлюючи SU(3)-симетрію. При постійній амплітуді взаємодії, основний стан аналогічно розпадається на два стани E_1 , E_2 з кратністю 3, проте ще від стану $E = 0$ відокремлюється стан E_3 також з кратністю виродженості 3.

Іншим, не менш цікавим, є випадок, коли два псевдоспінових стани формують групу з амплітудою тунелювання t_α , а інші два – амплітуду тунелювання t_β . У кожній з груп, псевдоспінові стани мають однакову амплітуду взаємодії U , а компоненти з різних груп взаємодіють з амплітудою V . Таким чином реалізується $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$ симетрія, з параметрами моделі Габбарда у матричній формі

$$t_\sigma = \begin{pmatrix} t_\alpha \\ t_\alpha \\ t_\beta \\ t_\beta \end{pmatrix}; \quad U_{\sigma\sigma'} = \begin{pmatrix} 0 & U & V & V \\ U & 0 & V & V \\ V & V & 0 & U \\ V & V & U & 0 \end{pmatrix}.$$

Підставивши наведені амплітуди у загальну формулу гамільтоніана (4.12) для начвертьзаповненої ґратки, отримаємо вираз ефективного

гамільтоніана

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_{\langle i,j \rangle} & \left[\frac{2t_\alpha^2}{U} \left(\hat{n}_{i1}\hat{n}_{j2} - \hat{c}_{j1}^\dagger \hat{c}_{i2}^\dagger \hat{c}_{i1} \hat{c}_{j2} + (i \leftrightarrow j) \right) \right. \\ & + \frac{2t_\beta^2}{U} \left(\hat{n}_{i3}\hat{n}_{j4} - \hat{c}_{j3}^\dagger \hat{c}_{i4}^\dagger \hat{c}_{i3} \hat{c}_{j4} + (i \leftrightarrow j) \right) \\ & \left. + \sum_{\sigma=1}^2 \sum_{\sigma'=3}^4 \left(\frac{(t_\alpha^2 + t_\beta^2)}{V} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{j\sigma'} - \frac{2t_\alpha t_\beta}{V} \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma'} + (i \leftrightarrow j) \right) \right]. \quad (4.15) \end{aligned}$$

Подібно до ситуації з симетрією $SU(3) \times U(1)$, гамільтоніан можна переписати у термінах псевдоспінових операторів, оскільки перші два доданки подібні до тих, що з'являється у $SU(2)$ симетрії. Взявши до уваги цей факт, введемо оператори $\hat{S}_i^{\alpha,\beta}$ за допомогою матриць Паулі $\vec{\sigma}$, спроектувавши на підпростори станів α та β , тобто $\hat{S}_i^\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \vec{\sigma}$ та $\hat{S}_i^\beta = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \vec{\sigma}$. Тоді для ефективного гамільтоніана (4.15) отримаємо канонічний вигляд

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{\langle i,j \rangle} & \left[J_\alpha \left(\hat{S}_i^\alpha \cdot \hat{S}_j^\alpha - \frac{\hat{n}_i^\alpha \hat{n}_j^\alpha}{4} \right) + J_\beta \left(\hat{S}_i^\beta \cdot \hat{S}_j^\beta - \frac{\hat{n}_i^\beta \hat{n}_j^\beta}{4} \right) \right. \\ & \left. - J_{\alpha\beta}^\parallel \left(\hat{n}_i^\alpha \hat{n}_j^\beta + \hat{n}_i^\beta \hat{n}_j^\alpha \right) + J_{\alpha\beta}^\perp \sum_{k=4, k \neq 8}^{12} \hat{S}_i^k \cdot \hat{S}_j^k \right], \quad (4.16) \end{aligned}$$

де введено оператори кількості частинок з псевдоспінами α та β , $\hat{n}_i^\alpha = \hat{n}_{i1} + \hat{n}_{i2}$ та $\hat{n}_i^\beta = \hat{n}_{i3} + \hat{n}_{i4}$, а також сталі взаємодії $J_{\alpha,\beta} = 4t_{\alpha,\beta}^2/U$, $J_{\alpha\beta}^\parallel = (t_\alpha^2 + t_\beta^2)/V$ і $J_{\alpha\beta}^\perp = 4t_\alpha t_\beta/V$. Останній доданок, який описує процеси обміну псевдоспінами з різних груп, записано за допомогою відповідних недіагональних генераторів $SU(4)$ симетрії, $\lambda_{\sigma_1\sigma_2}^k$. Аналізуючи сталі взаємодії ефективного гамільтоніана (4.16), можна побачити, що за умови $U \ll V$, відбувається розбиття на дві непов'язані компоненти за групами псевдоспінів α та β .

Аналогічним чином побудуємо енергетичні спектри гамільтоніана (4.16) окремо для кожного типу порушення симетрії. При порушенні симетрії в амплітуді тунелювання основний енергетичний рівень розбивається на три

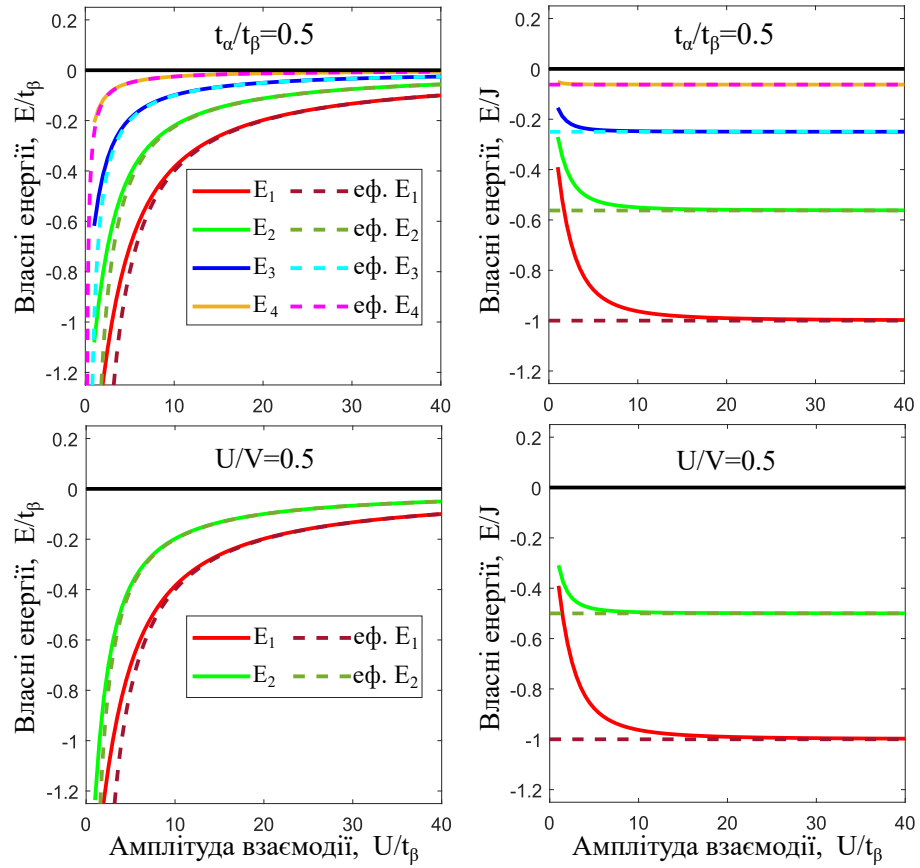


Рис. 4.2. Енергетичні спектри моделей Габбарда (неперервні лінії) та ефективної моделі Гейзенберга (пунктирні лінії) для випадку начвертьзаповненої ґратки за спінової симетрії $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$. У верхніх панелях амплітуди відносяться $U/V = 1$, $t_\alpha/t_\beta = 0.5$, коли у нижніх панелях – $U/V = 0.5$, $t_\alpha/t_\beta = 1$. В обох випадках для нормування обрано сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U$.

рівні, – невироджений E_1 , 4-кратно вироджений E_2 та невироджений E_3 , – тоді як від найвищого за даних умов рівня $E = 0$ відокремлюється 4-кратно вироджений рівень E_4 , залишивши 6-кратно вироджений енергетичний рівень $E = 0$. При порушенні симетрії через взаємодію, цей основний енергетичний стан розщеплюється на 2-кратно вироджений стан E_1 та 4-кратно вироджений стан E_2 .

4.1.2. Випадок наполовину заповненої зони

Отримавши явні вирази для ефективних гамільтоніанів для начверть заповненої ґратки, перейдемо до більш складного випадку половинного заповнення, де основний стан системи залежить від різниці в амплітудах взаємодії. Аналогічним чином до виведення у попередньому підрозділі, почнемо з випадку $SU(3) \times U(1)$ симетрії. Для подальшого застосування перетворень Шріффера–Вольфа перепишемо гамільтоніан Фермі–Габбарда (4.1) у вигляді чотирьох доданків

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} + \hat{\mathcal{H}}_U + \hat{\mathcal{H}}_{ext}. \quad (4.17)$$

Унаслідок трансляційної інваріантності системи для отримання ефективної спінової моделі є достатнім обмежитись описом процесів на двох вузлах. Розглядаючи лише енергетичні стани близькі до основного, перший доданок $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$ описує віртуальні процеси переходу від двох частинок на кожному вузлі до співвідношення “три до одного” для кожної пари вузлів. У свою чергу, доданок $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$ відповідає тільки зворотнім процесам. Явно обидві частини гамільтоніана, якщо ввести індекс $\beta \equiv 4$ згідно з аналогічним

випадком у начвертьзаповненій ґратці, можна розписати як

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,+} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} \left(\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\alpha''\beta} + \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha|\alpha''}^{\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha'|\alpha}^{\beta\alpha} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha} \right), \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{t,-} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} & \left(\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\alpha''\beta} + \hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha''}^{\alpha|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha}^{\alpha'|\beta\alpha} \right. \\ & \left. + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\alpha'\alpha} \right), \end{aligned} \quad (4.19)$$

Вище, з метою спрощення запису, було використано позначення $\sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''}$, що позначає підсумовування за псевдоспіновими компонентами першої групи $\alpha \in \{1, 2, 3\}$, іншому відмінному псевдоспіну цієї групи $\alpha' \neq \alpha$, а α'' позначає псевдоспін, що залишився. Також частини гамільтоніана $\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''}$ та $\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\alpha''}$ виражаються у термінах операторів народження та знищення частинок:

$$\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''} = -\frac{t_{\alpha}}{2} (\hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{i\alpha''} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha} \hat{n}_{j\beta} + (i \leftrightarrow j)), \quad (4.20)$$

$$\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\alpha''} = -\frac{t_{\alpha}}{2} (\hat{n}_{j\beta} \hat{c}_{j\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{i\alpha''} + (i \leftrightarrow j)). \quad (4.21)$$

Тобто, оператор $\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''}$ описує процес тунелювання частинки з псевдоспіном α (індекс зліва від вертикальної ліній $|$) з вузла з четвертим псевдоспіном до вузла з псевдоспінами α' та α'' . Аналогічним чином, оператор $\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\alpha''}$ описує зворотній процес, повернення частинки α до вузла зі спіном β . Множник $1/2$ виникає через наявну симетрію $(\alpha', \alpha'') \leftrightarrow (\alpha'', \alpha')$ у наведених частинах гамільтоніана, через що при підсумуванні кожен доданок врахується два рази. Проте при розписі $\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta}$ дана симетрія відсутня та множник $1/2$ відсутній.

Останні два доданки $\hat{\mathcal{H}}_U$ та $\hat{\mathcal{H}}_{ext}$ гамільтоніана (4.17), описують взаємодію псевдоспінів між собою та з зовнішнім ефективним полем, що регулює середнє заповнення атомами вузлів ґратки, та визначені формулами (4.4) та (4.5).

Розглянемо комутатори $[\hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}, \hat{\mathcal{H}}_U]$, які хоч і неможливо спростити до пропорційності $\propto \hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}$ через наявність станів з різними енергіями

взаємодії, проте явно можуть бути записані в термінах введених операторів тунелювання. Використовуючи властивості операторів створення, знищення та числа частинок, $\hat{c}_{i\sigma}\hat{n}_{j\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ij}$ та $\hat{n}_{j\sigma'}\hat{c}_{i\sigma}^\dagger = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ij}$, комутатор оператора підвищення енергії $\hat{\mathcal{H}}_{t,+}$ та оператора взаємодії $\hat{\mathcal{H}}_U$ набуде вигляду

$$\begin{aligned} [\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_U] &= \sum_i \left[\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, U_\alpha \sum'_{\alpha,\alpha',\alpha''} (\hat{n}_{i\alpha}\hat{n}_{i\alpha'}) + U_\beta \sum_{\alpha=1}^3 \hat{n}_{i\alpha}\hat{n}_{i\beta} + (i \leftrightarrow j) \right] \\ &= - \sum_{\langle i;j \rangle} \sum'_{\alpha,\alpha',\alpha''} \left[(2U_\alpha - U_\beta) \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''} + U_\beta \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\alpha''\beta} + U_\alpha \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} \right. \\ &\quad \left. + U_\alpha \hat{H}_{\alpha|\alpha''}^{\alpha'\alpha''} + U_\beta \hat{H}_{\alpha'|\alpha}^{\beta\alpha} + U_\beta \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha''} + U_\beta \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha} \right]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Відповідно комутатор оператора пониження енергії $\hat{\mathcal{H}}_{t,-}$ та оператора взаємодії $\hat{\mathcal{H}}_U$ можна розписати, як

$$\begin{aligned} [\hat{\mathcal{H}}_{t,-}, \hat{\mathcal{H}}_U] &= \sum_{\langle i;j \rangle} \sum'_{\alpha,\alpha',\alpha''} \left[(2U_\alpha - U_\beta) \hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\alpha''} + U_\beta \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\alpha''\beta} + U_\alpha \hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\beta} \right. \\ &\quad \left. + U_\alpha \hat{H}_{\alpha''}^{\alpha|\alpha'\alpha''} + U_\beta \hat{H}_\alpha^{\alpha'|\beta\alpha} + U_\beta \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha''} + U_\beta \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha} \right]. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Таким чином, щоб спростити вираз (1.20) у перетворенні Шріффера-Вольфа оберемо довільний оператор $\hat{S}$ наступним чином:

$$\begin{aligned} \hat{S} = i \sum_{\langle i;j \rangle} \sum'_{\alpha,\alpha',\alpha''} &\left[\frac{\hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\alpha''} - \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''}}{2U_\alpha - U_\beta} + \frac{\hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha''}^{\alpha|\alpha'\alpha''} - \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} - \hat{H}_{\alpha|\alpha''}^{\alpha'\alpha''}}{U_\alpha} \right. \\ &\left. + \frac{\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\alpha''\beta} + \hat{H}_\alpha^{\alpha'|\beta\alpha} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha} - \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\alpha''\beta} - \hat{H}_{\alpha'|\alpha}^{\beta\alpha} - \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha''} - \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha}}{U_\beta} \right]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Наведений оператор $\hat{S}$ задовільняє умові $[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] = i(\hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-})$, що можна

явно показати, якщо використати властивості (4.22) та (4.23).

$$\begin{aligned}
 [\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] &= \sum_i \left[\hat{S}, U_\alpha \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha'}) + U_\beta \sum_{\alpha=1}^3 \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} + (i \leftrightarrow j) \right] \\
 &= i \sum_{\langle i; j \rangle} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} \left(\hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''} + \hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha''}^{\alpha|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha|\alpha''}^{\alpha'\alpha''} \right. \\
 &\quad \left. + \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\alpha''\beta} + \hat{H}_\alpha^{\alpha'|\beta\alpha} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha} + \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\alpha''\beta} + \hat{H}_{\alpha'|\alpha}^{\beta\alpha} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha} \right). \quad (4.25)
 \end{aligned}$$

Підсумовуючи окремо процеси підвищення та пониження енергії, матимемо бажане комутаційне відношення. У результаті ефективний псевдоспіновий гамільтоніан може описуватись аналогічно до попередньо описаних випадків застосування перетворення Шріффера-Вольфа:

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \frac{i}{2} \left[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{t^3}{U^2} \right). \quad (4.26)$$

Відзначимо два важливі факти. По-перше, для отримання наведеної формули амплітуди мають задовольняти умовам границі сильного зв'язку, тобто $U, V \gg t$ та $|U - V| \gg t$. По-друге, при розкритті комутатора у виразі (4.26) та підставлення оператора $\hat{S}$ залишаться тільки доданки типу понижувального гамільтоніану, що помножений на підвищувальний гамільтоніан, $\hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\alpha''} \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''}$, які мають однаковий набір псевдоспінів на двох вузлах. Тоді ефективний гамільтоніан можливо переписати у термінах операторів

підвищення та пониження енергії:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} & \left[\frac{2}{2U_\alpha - U_\beta} \left(\hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_\beta^{\alpha'|\alpha'\alpha''} + \hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\alpha''} \right) \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\alpha''} \right. \\
& + \frac{2}{U_\alpha} \left(\hat{H}_\beta^{\alpha|\alpha'\beta} \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} + \hat{H}_\beta^{\alpha'|\alpha\beta} \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha''}^{\alpha|\alpha'\alpha''} \hat{H}_{\alpha|\alpha''}^{\alpha'\alpha''} + \hat{H}_{\alpha''}^{\alpha'|\alpha\alpha''} \hat{H}_{\alpha|\alpha''}^{\alpha'\alpha''} \right) \\
& + \frac{2}{U_\beta} \left(\left(\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\alpha''\beta} + \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha''|\alpha\beta} + \hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\alpha''} \right) \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\alpha''\beta} + \left(\hat{H}_\alpha^{\alpha'|\beta\alpha} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha} \right) \hat{H}_{\alpha'|\alpha}^{\beta\alpha} \right. \\
& \left. \left. + \left(\hat{H}_\alpha^{\alpha'|\alpha''\beta} + \hat{H}_\alpha^{\alpha''|\alpha'\beta} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha''} \right) \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha''} + \left(\hat{H}_\alpha^{\alpha'|\beta\alpha} + \hat{H}_\alpha^{\beta|\alpha'\alpha} \right) \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\alpha} \right) \right].
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Останнім кроком підставимо у наведений вираз визначення (4.20) та (4.21) у термінах операторів народження, знищення та числа частинок. Тоді ефективний псевдоспіновий гамільтоніан буде записано у вигляді

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} & \left[J_{\alpha\beta}^* (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{j\alpha''} + \hat{n}_{j\alpha} \hat{n}_{j\beta} \hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{i\alpha''}) \right. \\
& - J_{\alpha\beta}^\circ \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\alpha'} (\hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\alpha''} + \hat{n}_{j\beta} \hat{n}_{i\alpha''}) \\
& - \frac{J_{\alpha\beta}^\perp}{2} (\hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\beta} + \hat{c}_{i\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta} \hat{c}_{i\alpha}) \hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\alpha''} \\
& \frac{J_\alpha}{2} \left(\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{j\beta} + \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha''} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{j\alpha''} - \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\alpha'} (\hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta} + \hat{n}_{i\alpha''} \hat{n}_{j\alpha''}) \right) \\
& \left. J_{\alpha\beta}^\parallel (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\beta} + \hat{n}_{j\alpha} \hat{n}_{i\beta}) \hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\alpha'} - \frac{J_{\alpha\beta}^\perp}{2} (\hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\beta} + \hat{c}_{i\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta} \hat{c}_{i\alpha}) \hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\alpha'} \right],
\end{aligned} \tag{4.28}$$

де введено нові позначення для сталих взаємодії $J_{\alpha\beta}^* = \frac{t_\alpha^2}{2(2U_\alpha - U_\beta)} + \frac{t_\beta^2}{2U_\beta} + \frac{t_\alpha^2}{U_\beta}$ та $J_{\alpha\beta}^\circ = t_\alpha^2 \left(\frac{1}{2U_\alpha - U_\beta} + \frac{1}{U_\beta} \right)$, у той час сталі взаємодії $J_{\alpha,\beta} = 4t_{\alpha,\beta}^2/U$, $J_{\alpha\beta}^\parallel = (t_\alpha^2 + t_\beta^2)/V$ і $J_{\alpha\beta}^\perp = 4t_\alpha t_\beta/V$ визначені тим же чином, як для випадку начверть заповненої ґратки.

Хоча отриманий вираз ефективного гамільтоніана точно описує поведінку систему на границі сильного зв'язку для довільних відношень амплітуд взаємодії U_α/U_β , проте виявляється дещо громіздким. Тому розглянемо два окремих випадки $U_\alpha > U_\beta$ та $U_\alpha < U_\beta$.

У випадку, коли перші три псевдоспіни мають значно більшу амплітуду взаємодії між собою, ніж з четвертим псевдоспіном, тобто $U_\alpha > U_\beta$, основний стан системи на двох вузлах має енергію $E_0 = 2U_\beta$. Саме тому, з усіх доданків гамільтоніана (4.28) залишаються тільки ті, які переводять систему у стан з однією частинкою з псевдоспіном β на кожному з двох вузлів,

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} \frac{J_\alpha}{2} (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{j\beta} - \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\alpha'} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta}). \quad (4.29)$$

Якщо ввести псевдоспінові оператори на вузлі $\hat{S}_i^k = \frac{1}{2} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \lambda_{k,\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma'}$ для перших восьми узагальнених матриць Гелл-Мана $\lambda_{k,\sigma\sigma'}$ та сумарний оператор числа частинок обох груп псевдоспінів, $\hat{n}_i^\alpha \equiv \sum_{\alpha=1}^3 \hat{n}_{i\alpha}$ $\hat{n}_i^\beta \equiv \hat{n}_4$, ефективний гамільтоніан набуває вигляду

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U + \sum_{\langle i,j \rangle} J_\alpha \left(\sum_{k=1}^8 \hat{S}_i^k \cdot \hat{S}_j^k - \frac{1}{3} \hat{n}_i^\alpha \hat{n}_j^\alpha \right) \hat{n}_i^\beta \hat{n}_j^\beta. \quad (4.30)$$

Частина гамільтоніана з добутком $\hat{n}_i^\beta \hat{n}_j^\beta$ повністю збігається з ефективним гамільтоніаном Гайзенберга для SU(3)-симетричного фермі-газу в оптичній ґратці з середнім заповненням вузлів $\langle \hat{n}_i \rangle = 1$. І дійсно, якщо кожен з пари вузлів вже заселений частинкою з псевдоспіном β , то для реалізації основного стану в наполовину заповненій ґратці для чотирьох типів ферміонів на кожному з вузлів залишилось по одному місцю для частинок з псевдоспіном з групи α .

З іншого боку, для випадку $U_\alpha < U_\beta$, основний стан має енергію $E_0 = 2U_\alpha$, що відповідає заселенню обох вузлів i та j тільки частинками з групи α . Тоді можна отримати ефективний гамільтоніан

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_\alpha}{2} \sum'_{\alpha, \alpha', \alpha''} \left(\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\alpha'} - \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\alpha'} \right) \hat{n}_{i\alpha''} \hat{n}_{j\alpha''}. \quad (4.31)$$

Подібно до гамільтоніана (4.30), отриманий вираз гамільтоніана (4.31) також

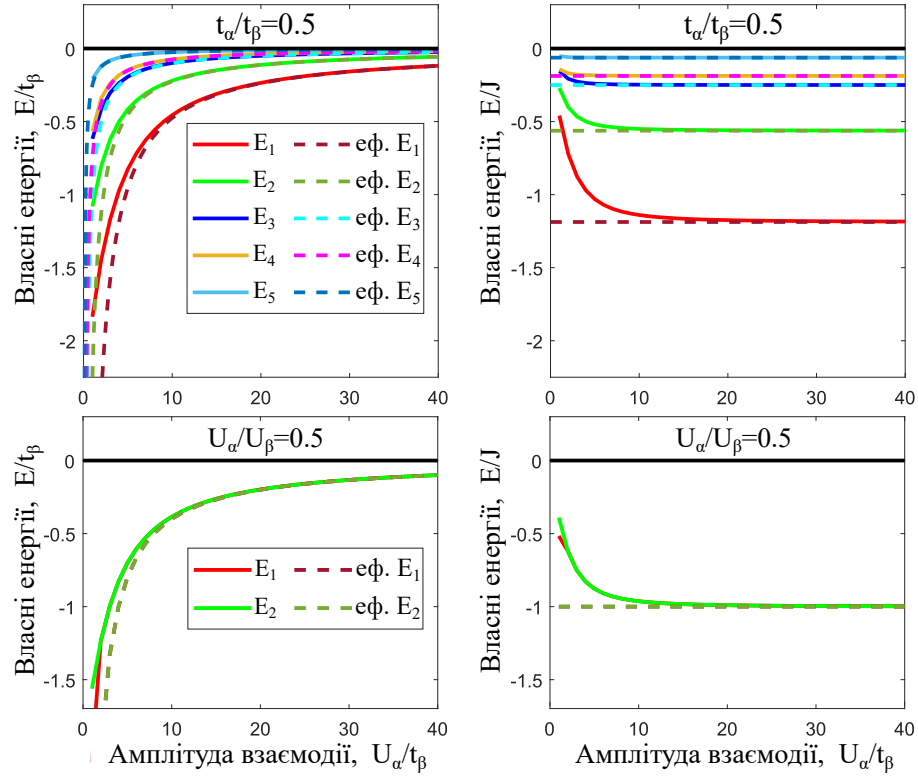


Рис. 4.3. Енергетичні спектри моделей Габбарда (неперервні лінії) та ефективної моделі Гейзенберга (пунктирні лінії) для випадку напівзаповненої ґратки за спінової симетрії $SU(3) \times U(1)$. Для наочності від усіх енергетичних рівнів було віднято енергію основного стану E_0 . У верхніх панелях амплітуди відносяться $U_\alpha/U_\beta = 1$, $t_\alpha/t_\beta = 0.5$, а у нижніх панелях – $U_\alpha/U_\beta = 0.5$, $t_\alpha/t_\beta = 1$. В обох випадках для нормування обрано сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U_\alpha$.

залишається $SU(3)$ -симетричним відносно групи псевдоспінових станів α .

Для напівзаповненої нижньої зони оптичної ґратки ($\langle \hat{n}_i \rangle = 2$) для $SU(4)$ -симетричного чотирикомпонентного газу кількість енергетичних рівнів близьких до основного збільшилась у порівнянні з начвертьзаповненою зоною ґратки: замість одного рівня тепер існують один невироджений рівень та енергетичний рівень з виродженістю 15, та один верхній збуджений мультиплет $E = 0$ з виродженістю 20. На Рис. 4.3 наведені розщеплення енергетичних спектрів у зв'язку з порушенням симетрії $SU(4)$ для амплітуд тунелювання, або для амплітуд взаємодії. Оскільки метою дослідження є опис станів близьких до основного під впливом порушення симетрії,

наочно має сенс розглядати відхилення енергії від енергії основного стану. Тому на Рис. 4.3 від кожної енергії стану віднято енергію основного стану $E_0 = \min(U_\alpha, U_\beta)$. Енергії станів моделі Габбарда та виведених ефективних псевдоспінових моделей, очікуємо, збігаються у області великих амплітуд взаємодії. У правій частині рисунків енергії нормовані на сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U_\alpha$, щоб показати характерні масштаби амплітуд взаємодії, де моделі узгоджуються одна з одною.

При порушенні симетрії в амплітуді тунелювання невироджений стан E_1 наближається до основного стану E_0 , а стан з виродженістю 15 розщеплюється на стан E_2 з виродженістю 8, стан E_3 з виродженістю 6 та невироджений стан E_4 . Основний енергетичний рівень E_0 також розщеплюється на рівень E_5 з виродженістю 8 та E_6 з виродженістю 12, які знов об'єднуються у ліміті $t_\alpha \rightarrow 0$. Особливо цікавим виявляється випадок відмінних амплітуд взаємодії за умови $|U_\beta - U_\alpha| \gg 1$, які описуються ефективними гамільтоніанами (4.30) та (4.31), через наявну SU(3) симетрію. За цих умов, система має близькі невироджений стан E_1 та стан E_2 з виродженістю 2, які збігаються за великих значень амплітуд тунелювання, та новий енергетичний стан E_0 з виродженістю 6.

Наостанок розглянемо випадок розбиття SU(4) симетрії на SU(2)×SU(2)×U(1), де псевдоспіни діляться на дві групи (перші два та останні два), у кожній з яких мають амплітуди тунелювання t_α та t_β відповідно. Якщо псевдоспіни з однакової групи, то вони взаємодіють з амплітудою U , та якщо з різних груп – з амплітудою V . Подібно до SU(3)×U(1) симетрії, гамільтоніан розписується за рівнянням (4.17), проте

оператори підвищення та пониження енергії вже визначаються як

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,+} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \left(\hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\alpha'} + \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\alpha'} + \hat{H}_{\beta|\alpha'}^{\alpha\alpha'} \right. \\ \left. + \hat{H}_{\alpha|\beta'}^{\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\beta'} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\beta'\alpha} + \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} \right), \quad (4.32)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,-} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\alpha'} + \hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\alpha'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\alpha'} \right. \\ \left. + \hat{H}_{\beta'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\beta'\alpha} + \hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta} \right). \quad (4.33)$$

У наведених виразах для позначення іншого стану з групи використовується штриховані змінні. Тобто, якщо $\alpha = 1$, то $\alpha' = 2$, і подібним чином для β та β' . Кожен з операторів $\hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'}$ та $\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\beta'}$ описує різні віртуальні процеси підвищення та пониження енергії відповідно, за рахунок перескоку однієї частинки між парою вузлів, які можливо описати за допомогою операторів народження та знищення псевдоспінів:

$$\hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'} = -\frac{t_\alpha}{2} (\hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{i\beta'} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{n}_{j\alpha'} + (i \leftrightarrow j)), \quad (4.34)$$

$$\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\beta'} = -\frac{t_\alpha}{2} (\hat{n}_{j\alpha'} \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{i\beta'} + (i \leftrightarrow j)). \quad (4.35)$$

Наведені доданки мають половину амплітуди тунелювання $t_\alpha/2$, оскільки оператори мають симетрію $(\beta, \beta') \leftrightarrow (\beta', \beta)$, та при підсумовуванні кожен такий доданок буде враховано два рази. З іншого боку доданки типу $\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'}$ мають амплітуду тунелювання t_α , оскільки при пробіганні суми описують неповторюванні процеси.

Аналогічно виведемо вирази для комутаторів $[\hat{\mathcal{H}}_{t,\pm}, \hat{\mathcal{H}}_U]$ за допомогою

властивостей операторів народження та знищення:

$$\begin{aligned}
 [\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, \hat{\mathcal{H}}_U] &= \sum_i \left[\hat{\mathcal{H}}_{t,+}, U(\hat{n}_{i1}\hat{n}_{i2} + \hat{n}_{i3}\hat{n}_{i4}) + V \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \hat{n}_{i\alpha}\hat{n}_{i\beta} + (i \leftrightarrow j) \right] \\
 &= - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \left[(2V - U) \left(\hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\alpha'} \right) + U \left(\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\beta'} \right) \right. \\
 &\quad \left. + U \left(\hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta} + \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\beta'\alpha} \right) + V \left(\hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\alpha'} + \hat{H}_{\beta|\alpha'}^{\alpha\alpha'} + \hat{H}_{\alpha|\beta'}^{\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\beta'} \right) \right]. \quad (4.36)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{\mathcal{H}}_{t,-}, \hat{\mathcal{H}}_U] &= \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \left[(2V - U) \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\alpha'} \right) + U \left(\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\alpha'\beta'} \right) \right. \\
 &\quad \left. + U \left(\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\beta'\alpha} \right) + V \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\alpha'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\alpha'} + \hat{H}_{\beta'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\beta'} \right) \right]. \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

Взявши дані комутаційні співвідношення до уваги та обравши оператор $\hat{S}$ у перетворенні Шріффера-Вольфа, як

$$\begin{aligned}
 \hat{S} &= i \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \left[\frac{\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\alpha'} - \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'} - \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\alpha'}}{2V - U} \right. \\
 &\quad + \frac{\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta|\beta'\alpha} + \hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta} - \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'} - \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\beta'} - \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\beta'\alpha} - \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta}}{U} \\
 &\quad \left. + \frac{\hat{H}_{\beta'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\beta'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\alpha'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\alpha'} - \hat{H}_{\alpha|\beta'}^{\beta\beta'} - \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\beta'} - \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\alpha'} - \hat{H}_{\beta|\alpha'}^{\alpha\alpha'}}{V} \right], \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

можна показати підстановкою, аналогічно до виводу з $SU(3) \times U(1)$ симетрією, що виконується співвідношення

$$[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_U] = i \left(\hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-} \right). \quad (4.39)$$

Можна побачити, що в результаті застосування перетворення Шріффера-Вольфа ефективний гамільтоніан спрощується до вигляду (4.26). Беручи до уваги, що інтерес становлять тільки енергетичні стани, близькі до основного,

при розкритті комутатора $\left[\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}_{t,+} + \hat{\mathcal{H}}_{t,-}\right]$ залишаються тільки доданки типу $\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta'} \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'}$, оскільки, діючи на основний стан, вони спочатку переводять систему у віртуальний стан з трьома частинками на одному вузлі та однією на іншому, а потім повертають до стану з двома частинками на кожному з вузлів.

Пропишемо ефективний гамільтоніан за допомогою операторів підвищення та пониження енергії

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 \left[\frac{2}{2V-U} \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\beta'} \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\alpha'} \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\alpha'} \right) \right. \\
+ \left(\frac{1}{2V-U} + \frac{1}{U} \right) \left\{ \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\beta'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\beta'|\alpha\beta} \right) \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\beta'} + \left(\hat{H}_{\beta'}^{\alpha|\beta\alpha'} + \hat{H}_{\beta'}^{\alpha'|\beta\alpha} \right) \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\alpha'} \right. \\
+ \hat{H}_{\beta}^{\beta'|\alpha\alpha'} \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\alpha'|\beta\beta'} \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\beta'} \left. \right\} + \frac{2}{U} \left\{ \left(\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\beta}^{\alpha'|\alpha\beta'} \right) \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'} \right. \\
+ \left(\hat{H}_{\alpha}^{\beta|\alpha'\beta'} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta'|\alpha'\beta} \right) \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\alpha'\beta'} + \left(\hat{H}_{\alpha}^{\beta|\beta'\alpha} + \hat{H}_{\alpha}^{\beta'|\beta\alpha} \right) \hat{H}_{\beta|\alpha}^{\beta'\alpha} \\
+ \left(\hat{H}_{\beta}^{\alpha|\alpha'\beta} + \hat{H}_{\beta}^{\alpha'|\alpha\beta} \right) \hat{H}_{\alpha|\beta}^{\alpha'\beta'} \left. \right\} + \frac{2}{V} \left\{ \left(\hat{H}_{\beta'}^{\alpha|\beta\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\beta'} \right) \hat{H}_{\alpha|\beta'}^{\beta\beta'} \right. \\
+ \left(\hat{H}_{\beta'}^{\beta|\alpha\beta'} + \hat{H}_{\beta'}^{\alpha|\beta\beta'} \right) \hat{H}_{\beta|\beta'}^{\alpha\beta'} + \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\alpha'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\alpha'} \right) \hat{H}_{\alpha|\alpha'}^{\beta\alpha'} \\
\left. \left. + \left(\hat{H}_{\alpha'}^{\beta|\alpha\alpha'} + \hat{H}_{\alpha'}^{\alpha|\beta\alpha'} \right) \hat{H}_{\beta|\alpha'}^{\alpha\alpha'} \right\} \right]. \quad (4.40)
\end{aligned}$$

Підставляючи вирази (4.34) і (4.35) для операторів підвищення та пониження енергії через оператори народження та знищення відповідно, отримаємо остаточну форму для ефективного псевдоспінового гамільтоніана, що описує напівзаповнену оптичну ґратку фермі-газом за симетрії

$SU(2) \times SU(2) \times U(1)$ у границі сильного зв'язку:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 & \left[J_{\alpha\beta}^* (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\beta} \hat{n}_{j\beta'} + \hat{n}_{j\alpha} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{i\beta'}) \right. \\
& + \frac{J_\alpha + J_\beta}{2} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{j\beta'} - \frac{J_\alpha}{2} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\alpha'} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta'} \\
& - J_{\alpha\beta}^\circ (\hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\beta} + \hat{c}_{i\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta} \hat{c}_{i\alpha}) (\hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\beta'} + \hat{n}_{i\beta'} \hat{n}_{j\alpha'}) \\
& - \frac{J_\beta}{2} \hat{c}_{i\beta}^\dagger \hat{c}_{j\beta'}^\dagger \hat{c}_{j\beta} \hat{c}_{i\beta'} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\alpha'} + J_{\alpha\beta}^\parallel (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\beta} + \hat{n}_{j\alpha} \hat{n}_{i\beta}) (\hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\alpha'} + \hat{n}_{i\beta'} \hat{n}_{j\beta'}) \\
& - \frac{J_{\alpha\beta}^\perp}{2} (\hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\beta} + \hat{c}_{i\beta}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\beta} \hat{c}_{i\alpha}) (\hat{n}_{i\alpha'} \hat{n}_{j\alpha'} + \hat{n}_{i\beta'} \hat{n}_{j\beta'}) \\
& \left. + \frac{J_\alpha}{2} (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\alpha'} - \hat{c}_{i\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'} \hat{c}_{i\alpha}) \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta} + \frac{J_\beta}{2} (\hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta'} - \hat{c}_{i\beta'}^\dagger \hat{c}_{j\beta}^\dagger \hat{c}_{j\beta'} \hat{c}_{i\beta}) \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\alpha} \right].
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Тут сталі взаємодії $J_{\alpha,\beta} = 4t_{\alpha,\beta}^2/U$, $J_{\alpha\beta}^\parallel = (t_\alpha^2 + t_\beta^2)/V$ і $J_{\alpha\beta}^\perp = 4t_\alpha t_\beta/V$ визначені однаково з випадком начвертьзаповненої зони ґратки з тією самою симетрією, $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$, як у гамільтоніані (4.16), та ще введено нові сталі взаємодії $J_{\alpha\beta}^* = \frac{t_\alpha^2 + t_\beta^2}{2(2V-U)}$ і $J_{\alpha\beta}^\circ = t_\alpha t_\beta \left(\frac{1}{2V-U} + \frac{1}{U} \right)$.

Як і в минулому випадку, оскільки основний стан залежить від відношення амплітуд взаємодії U/V , то для отримання більш компактного вигляду ефективного гамільтоніана має сенс розглянути два окремих підвипадки. Коли псевдоспіни більше взаємодіють у кожній з двох груп, $U > V$, основний стан з енергією $E_0 = 2V$ реалізується, коли на кожному з вузлів знаходяться по одній частинці з різних груп, α та β . Тому, з усіх можливих процесів залишаються тільки ті, що стартують та приводять до описаного стану з мінімальною енергією E_0 :

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=3}^4 & \left[\frac{J_\alpha + J_\beta}{2} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\alpha'} \hat{n}_{j\beta'} - \frac{J_\alpha}{2} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{c}_{i\alpha'} \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta'} \right. \\
& \left. - (\alpha, \alpha' \leftrightarrow \beta, \beta') + \frac{J_\alpha}{2} (\hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{j\alpha'} - \hat{c}_{i\alpha'}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha'} \hat{c}_{i\alpha}) \hat{n}_{i\beta} \hat{n}_{j\beta} + (\alpha, \alpha' \leftrightarrow \beta, \beta') \right].
\end{aligned} \tag{4.42}$$

У протилежному випадку, коли $U < V$, реалізуються найнижчий енергетичний стан з $E_0 = 2U$, якщо на кожному з вузлів частинки з однакової групи:

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \hat{\mathcal{H}}_U - 4J_{\alpha\beta}^* \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{i1}\hat{n}_{i2}\hat{n}_{j3}\hat{n}_{j4} + \hat{n}_{j1}\hat{n}_{j2}\hat{n}_{i3}\hat{n}_{i4}). \quad (4.43)$$

Цікавим виявляється той факт, що за таких умов модель частково перестає бути неперервною у спіновому просторі та явно спрощується до моделі Ізінга. У певному сенсі, тут можна провести аналогію з класичною моделлю Ізінга зі спіном $1/2$, де спіновому стану $\uparrow$ відповідають одразу дві частинки в станах 1 та 2 (або 3 та 4) і навпаки.

На основі отриманих ефективних гамільтоніанів (4.42) і (4.43), та гамільтоніана Габбарда (4.1), можна отримати поведінку енергетичних спектрів, яку наведено на Рис. 4.4. Оскільки цікавим питанням є не абсолютні значення енергій, а лише відносна розбіжність з енергією основного стану, від усіх зображених енергетичних рівнів віднято енергію основного стану E_0 . Як і очікувалось, спектри моделі Габбарда (неперервні лінії) та спектри ефективної моделі (пунктирні лінії) близькі один до одного за $U \gtrsim 10t_\beta$, що підпадає під умову сильного зв'язку. Особливо це легко помітити на правих панелях Рис. 4.4, де тиж самі енергії нормовані не на амплітуду тунелювання, а на сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U$.

В окремому випадку порушення симетрії в амплітуді тунелювання (верхні панелі), найнижчий невироджений енергетичний рівень $SU(4)$ -симетричної системи залишається невиродженим, проте змінює своє значення на E_1 , у той час як, інший рівень з кратністю виродження 15 розщеплюється на чотири енергетичні рівні E_2, E_3, E_4, E_5 з кратностями виродження – 3, 1, 8, 3 відповідно. Крім цього з вищерозміщеного рівня E_0 з виродженістю 20 відокремлюються невироджений рівень E_6 , 8-кратно вироджений рівень E_7 та новий стан E_0 вже з кратністю 11.

На нижніх панелях зображено випадок, який описується ефективним гамільтоніаном Ізінгової моделі (4.43). Для нього енергетичні рівні пере-

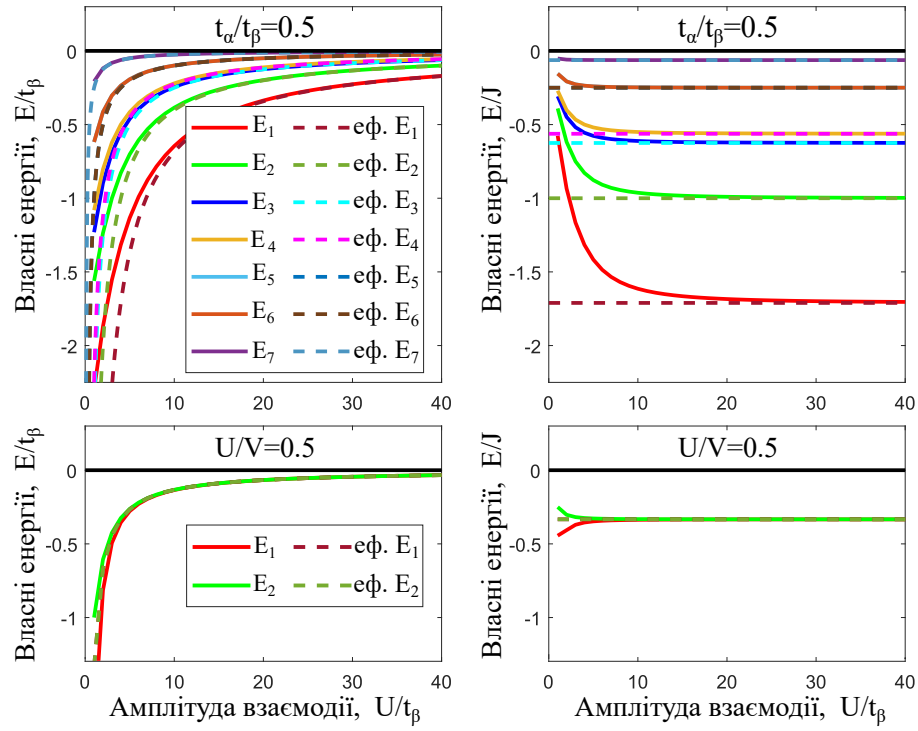


Рис. 4.4. Енергетичні спектри моделей Габбарда (неперервні лінії) та ефективної моделі Гейзенберга (пунктирні лінії) для випадку напівзаповненої ґратки за спінової симетрії $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$. Для наочності від усіх енергетичних рівнів було віднято енергію основного стану E_0 . У верхніх панелях амплітуди відносяться $U/V = 1$, $t_\alpha/t_\beta = 0.5$, коли у нижніх панелях – $U/V = 0.5$, $t_\alpha/t_\beta = 1$. В обох випадках для нормування обрано сталу взаємодії $J = 4t_\beta^2/U$.

групуються таким чином, що утворюються два близьких один до одного невироджених енергетичних стани E_1 та E_2 , а стан з енергією E_0 має виродженість лише 2.

Як наслідок, ми бачимо, що розподіли енергетичних рівнів визначаються в багатьох випадках нетривіальним чином і сильно залежать як від самого типу порушення симетрії $SU(4)$, так і значень амплітуд тунелювання та взаємодії. За певних умов і після обмеження низькоенергетичними станами моделі значно спрощуються до $SU(3)$ -симетричних типів, або взагалі до дискретних аналогів типу моделі Ізінга. Проте слід відзначити, що розглянуті випадки є важливими в дослідженні різноманітних порушень симетрії, які на практиці реалізують у експериментах з атомами лужних металів, зокрема, в

ультрахолодних фермі-газах калію-40 [88,92].

4.2. Просторові розподіли густини частинок у гармонічних потенціалах пасток

У попередньому підрозділі отримання ефективних спінових моделей для кожного випадку порушення симетрії проводилось за умови відсутності зовнішніх полів, тобто не враховуючи частину гамільтоніана (4.5). Тому для повноти розглянемо, як саме атоми в різних станах будуть заповнювати вузли оптичної ґратки, яка знаходиться у гармонічній пастці. Подібне питання вже було розглянуто та проаналізовано в рамках підходу динамічної теорії середнього поля, однак для випадків дво- та трикомпонентних фермі-газів у оптичній пастці, зокрема, у працях [99,103,108,109].

У експериментах лазери, які створюють ґратку, мають гаусовий профіль у просторі, тому найпростішою апроксимацією буде узяти центрально-симетричний квадратичний потенціал, оскільки $e^{-x^2} \approx 1 - x^2 + \mathcal{O}(x^4)$. Розглянемо в гамільтоніані (4.1) потенціал V_i , як функцію відстані від центру пастки r_i :

$$V_i(r_i) = V \frac{r_i^2}{a^2}, \quad (4.44)$$

де a – ґраткове число, яке позначає відстань між двома сусідніми вузлами (окремий випадок вектору ґратки для опису кубічної геометрії). Кривизна V пастки та хімічний потенціал μ у гамільтоніані (4.1) обрано так, щоб у центрі було плато Мотта $n \approx 2$, а на краях пастки – нульове заселення.

Застосовуючи алгоритм динамічної теорії середнього поля, який описано в розділі 1.5, можна отримати розподіли псевдоспінових станів у оптичній гармонічній пастці, які наведено на Рис. 4.5. Для аналізу просторових розподілів ми обрали температури відносно високими, $T = 0.5t_\beta$, оскільки, у першу чергу, постає питання розподілу компонентів через наявність порушеної

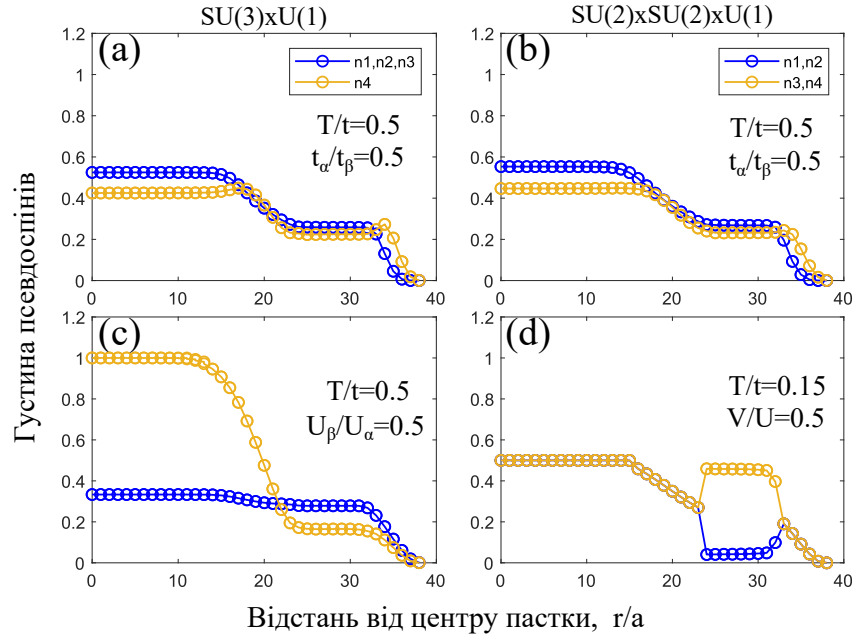


Рис. 4.5. Просторові розподіли атомних компонентів у гармонічній оптичній пастці для симетрії $SU(3) \times U(1)$ (а, с) та $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$ (b, d). Для усіх графіків, окрім (d), температура обрана, щоб система знаходилась у неупорядкованому (ПМ) стані ($T/t = 0.5$).

симетрії та зовнішнього потенціалу, а не ефекти взаємодії через процеси віртуального обміну порядку t_σ^2/U . У алгоритмі, хімічні потенціали μ_σ та параметри моделі Андерсона обрано так, щоб загальна кількість атомів у відповідному псевдоспіновому стані в пастці,

$$N_\sigma = \int n_\sigma(r) 4\pi r^2 dr, \quad (4.45)$$

була однаковою, тобто $N_\sigma \approx N_{\sigma'}, \forall \sigma \neq \sigma'$.

При порушенні $SU(4)$ симетрії в амплітуді тунелювання, як бачимо з Рис. 4.5(a) та (b), менш рухомі атомні компоненти (з меншими амплітудами тунелювання) незначним чином переважають у центрі пастки, в той час як діаметрально протилежна ситуація виникає на межі пастки. Відзначимо, що на краю плато Мотта для напівзаповнених вузлів, $n \approx 2$, та начвертьзаповнених вузлів $n \approx 1$, зменшення кількості домінантних частинок призводить до збільшення кількості частинок з іншими компонентами в якості протидії.

Якщо симетрію явно порушено в амплітуді взаємодії, то профілі розподілу частинок сильно відрізняються залежно від випадку порушення симетрії. За умови, що система має симетрію $SU(3) \times U(1)$, та частинки в станах з першої групи взаємодіють з більшою амплітудою між собою, ніж з частинками в стані $\sigma = 4$ (див. Рис. 4.5(c)) у центрі пастки домінантними виявляються саме частинки в стані $\sigma = 4$. Такий розподіл обумовлений тим фактом, що за амплітуд взаємодії $U_\beta < U_\alpha$ найнижчий енергетичний стан реалізується, коли на кожен з вузлів заселено однією частинкою в четвертому стані, що наочно відображено на самому графіку. Ближче до краю пастки заселеність вузлів атомами в стані $\sigma = 4$ різко спадає, натомість розподіли для перших трьох станів поведуть себе більш плавно.

Якщо система описується симетрією $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$, то за великих температур у парамагнітній фазі кожна частинка поводить себе однаковим чином незалежно від псевдоспінового стану. Проте, виходячи з отриманих ефективних моделей (4.16) та (4.42), при зниженні температури до $T/t = 0.15$ розподіли густини розщеплюються в зоні плато Мотта $n \approx 1$ таким чином, що одна група псевдоспінових компонентів повністю заповнює вузол, а інші компоненти зникають, як це показано на Рис. 4.5(d). Відзначимо, що наведений випадок домінантних частинок у станах з $\sigma = 3$ та $\sigma = 4$ реалізується тільки на половині вузлів, які утворюють підґратку A , коли сусідні для них вузли належать підґратці B та мають такі ж самі розподіли заселення, тільки з домінантними псевдоспіновими станами 1 та 2. За більших відношень амплітуд взаємодії, наприклад $V/U = 5/6$, подібним чином розщеплюється плато Мотта з напівзаповненими вузлами, $n \approx 2$.

4.3. Висновки до розділу 4

За ультранизьких температур, фермі-гази нейтральних атомів утворюють різноманітні магнітні стани, які можливо реалізувати в експерименті. Ці стани та енергетичні характеристики залежать не тільки від симетрій

оптичної ґратки, але ще й від порушення симетрії у амплітудах тунелювання та взаємодії, які є параметрами моделі Фермі–Габбарда. У рамках моделі Фермі–Габбарда було розглянуто різні випадки порушення спінової симетрії $SU(4)$ для чотирикомпонентного фермі-газу та отримано відповідні ефективні псевдоспінові гамільтоніани в границі сильного зв'язку.

З систем, які можна реалізувати в експерименті за допомогою атомів лужних металів, таких як ізотоп калію ^{40}K [88, 110], та лужноземельних металів, таких як ізотоп стронцію ^{87}Sr [111], було розглянуто випадки симетрій “три до одного”, $SU(3) \times U(1)$, та “два до двох”, $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$. Для кожної симетрії було отримано формули псевдоспінових гамільтоніанів для четвертинного та половинного заповнення вузлів ґратки, оскільки за нецілих значень система поводить себе як фермі-рідина.

Для заповненої зони на одну чверть було отримано ефективний гамільтоніан, який описує довільний випадок порушення симетрії. Для напівзаповненої зони амплітуди взаємодії між частинками з різними проєкціями спінів визначає основний стан. Тому було розглянуто подальше спрощення ефективних гамільтоніанів для різних границь відношення амплітуд взаємодії. У випадку симетрії “три до одного” було показано, що ефективна модель спрощується до $SU(3)$ -симетричної спінової моделі Гейзенберга, у той час як для симетрії “два до двох” модель може спроститись до магнітної за ізінговським типом, якщо слабше взаємодіють частинки з однієї групи, ніж між різними групами. Для кожного випадку симетрії та заселення було отримано поведінку енергетичних рівнів, близьких основного стану, для моделей Фермі–Габбарда та отриманих ефективних псевдоспінових моделей. Отримані результати можуть бути корисними у теоретичних дослідженнях та класифікації залишкових симетрій та рівноважних станів квантових газів [112, 113].

За допомогою алгоритму динамічної теорії середнього поля для чотирикомпонентної моделі Фермі–Габбарда для розглянутих випадків порушеної симетрії, $SU(3) \times U(1)$ та $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$, було отримано просторові

розподіли густин атомів у різних псевдоспінових станах у кубічній оптичній ґратці, яка знаходиться у гармонічному потенціалі. Майже в усіх випадках заповнення та симетрії більш рухомі та менш взаємодійні псевдоспінові компоненти домінують у центрі оптичної пастки та все ще існують поблизу її меж. Особливим виявляється випадок симетрії $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$, де за відносно високих температур усі атомні компоненти розподіляються однаково, проте у регіоні низьких температур порядку сталої взаємодії ефективної моделі плато Мотта $n \approx 1$ розщеплюється. Подібним чином розщеплюється плато Мотта $n \approx 2$ за відношення між амплітудами взаємодії $V/U \lesssim 1$. Результати можуть бути корисні у подальших дослідженнях магнітних упорядкувань чотирикомпонентних газів за низьких температур, що частково вивчалися у працях [15, 21, 23, 24], та в експериментальних реалізаціях, що спрямовані на нові методи охолодження фермі-газів з високими спіновими симетріями [114, 115].

ВИСНОВКИ

Основні результати дисертаційної роботи, що отримані автором вперше:

1. Розвинено теоретичний підхід для 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 за допомогою числового алгоритму динамічної теорії середнього поля.
2. Обчислено критичні значення ентропії, що необхідні для досягнення різних типів магнітно-впорядкованих станів у взаємодійних фермі-газах зі спіновою 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 $SU(4)$ симетрією 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 $SU(4)$ у разі різних амплітуд взаємодії та різних амплітуд тунелювання псевдоспінових компонентів.
6. Отримано просторові розподіли густини спінових компонентів у гармонічній оптичній пастці для випадків явного порушення симетрії в гамільтоніані Фермі–Габбарда, що описує взаємодійний чотирикомпонентний фермі-газ.

Результати дисертаційної роботи мають, передусім, фундаментальне значення для покращення розуміння фізичної поведінки складних квантових систем з високими симетріями та розвинення передових методів теоретичних

досліджень. Щодо значення для прикладного застосування, то результати можуть бути корисними, зокрема, для розробки нових експериментів з високоспіновими квантовими газами, де можуть бути використані напрацювання з аналізу ентропійних розподілів для кращого охолодження газів. Самі системи, що експериментально реалізуються з ультраохолодними газами нейтральних атомів у оптичних ґратках, можуть бути використані в створенні нових пристроїв для зберігання та обробки інформації та в квантових обчисленнях.

У дисертаційній роботі досліджено низькотемпературні характеристики чотирикомпонентних фермі-газів в оптичних ґратках, що описуються моделлю Габбарда за високої спінової симетрії $SU(4)$ при заповненні зони на одну чверть, а також для моделей з іншими (нижчими) спіновими симетріями гамільтоніана та іншими заповненнями нижньої зони оптичної ґратки. Самі моделі можуть описувати не лише низькотемпературну поведінку систем з холодними атомами, але й певні класи кристалічних матеріалів з подібними реалізаціями симетрій електронних компонентів. Теоретичний аналіз було розроблено в рамках динамічної теорії середнього поля. Було показано, що в квазідвовимірній квадратній геометрії ґратки система демонструє послідовність фазових переходів, що пов'язана зі знітою ентропії, як тільки локальна взаємодія між атомами стає достатньою для початку розвинення діелектричного стану Мотта.

За допомогою динамічної теорії середнього поля було також проаналізовано зону гістерезису метал-діелектрик і виявлено, що її температурний діапазон практично збігається з діапазоном магнітного впорядкування, на відміну від моделі Габбарда з двома або трьома взаємодійними компонентами. Проведений аналіз ентропії показує, що ця ділянка фазового переходу метал-діелектрик є першого порядку (на відміну від режиму кросовера за високих температур) і може бути досягнута в поточних та найближчих майбутніх експериментах з атомами лужноземельного типу в оптичних ґратках.

Окрім вимірювання магнітних кореляцій між різними ферміонними

компонентами та аналізу пов'язаних структурних факторів, було запропоновано інші пов'язані термодинамічні величини як потенційні індикатори фазових переходів та багаточастинкових явищ у досліджуваних системах. Зокрема, подвійне локальне заповнення вузлів та стисливість також демонструють чіткі сигнали на фазових межах. Отримані залежності від ентропії надають кількісну інформацію про те, як систему можна ефективно охолодити за допомогою ефекту Померанчука, та чи можна ефективно наблизитися до досліджуваних магнітно-впорядкованих фаз, починаючи з певних початкових значень температури або ентропії газу без ґратки в оптичній пастці.

У дисертаційній роботі також було встановлено, що в описі магнітних властивостей чотирикомпонентних газів з високою спіновою симетрією значну роль відіграють просторові симетрії самої оптичної ґратки. Для дослідження було обрано модель Фермі–Габбарда, яка описує начвертьзаповнену кубічну ґратку зі змінною амплітудою тунелювання уздовж тільки однієї з кристалографічних осей. За допомогою алгоритму динамічної теорії середнього поля було визначено магнітні фази у стані діелектрика Мотта для двох граничних випадків: ізотропна кубічна ґратка та ґратка з паралельних незв'язаних площин. У кожному з випадків існують по два антиферомагнітні фази та одну парамагнітну. Для різних значень амплітуд взаємодії було отримано зони стійкості магнітних фаз у стані діелектрика Мотта для різних значень параметра анізотропії. Отримані результати важливі для подальшого вивчення та визначення основних станів багатоконпонентних фермі-газів за низьких температур за допомогою інших (точніших) теоретичних методів, зокрема, підходів тензорних мереж.

У рамках дисертаційної роботи було розглянуто різні випадки явного порушення спінової симетрії $SU(4)$ для чотирикомпонентного фермі-газу, що описують моделлю Фермі–Габбарда, та отримано відповідні ефективні псевдоспінові гамільтоніани для границі сильного зв'язку. З систем, які можна реалізувати в експерименті за допомогою атомів лужних металів, таких як

ізопоп калію ^{40}K , та лужноземельних металів, таких як ізопоп стронцію ^{87}Sr , було розглянуто різні випадки явного порушення спінових симетрій. Для кожної симетрії було отримано формули псевдоспінових гамільтоніанів для четвeртинного та половинного заповнення вузлів ґратки, оскільки за нецілих значень система поводить себе як фермі-рідина. Було також отримано просторові розподіли густин атомів у різних псевдоспінових станах у кубічній оптичній ґратці, яка знаходиться у гармонічному потенціалі. Майже в усіх випадках заповнення та симетрії більш рухомі та менш взаємодійні псевдоспінові компоненти домінують у центрі оптичної пастки та все ще існують поблизу її меж. Результати можуть бути корисні у дослідженнях магнітних упорядкувань чотирикомпонентних газів за низьких температур та у процесах охолодження фермі-газів з високими спіновими симетріями в умовах сучасних експериментів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Wu C. Exotic many-body physics with large-spin Fermi gases. *Physics*. 2010. Vol. 3. P. 92.
2. 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.
3. 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.
4. 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.
5. Chiu C. S., Ji G., Mazurenko A., Greif D., Greiner M. Quantum state engineering of a Hubbard system with ultracold fermions. *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. P. 243201.
6. Yamamoto R., Kobayashi J., Kuno T., Kato K., Takahashi Y. An ytterbium quantum gas microscope with narrow-line laser cooling. *New J. Phys.* 2016. Vol. 18, No. 2. P. 023016.
7. Miranda M., Inoue R., Tambo N., Kozuma M. Site-resolved imaging of a bosonic Mott insulator using ytterbium atoms. *Phys. Rev. A*. 2017. Vol. 96. P. 043626.
8. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. 1963. Vol. 276, No. 1365. P. 238–257. (online; accessed: 2024-04-06).
9. Gutzwiller M. C. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Phys. Rev. Lett.* 1963. Vol. 10. P. 159–162.
10. Kanamori J. Electron correlation and ferromagnetism of transition metals. *Progress of Theoretical Physics*. 1963. Vol. 30, No. 3. P. 275–289.
11. 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.

12. 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.
13. Blümer N., Gorelik E. V. Mott transitions in the half-filled $SU(2M)$ symmetric Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87. P. 085115.
14. Yanatori H., Koga A. Finite-temperature phase transitions in the $SU(N)$ Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94. P. 041110.
15. 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.
16. Szirmai E., Lewenstein M. Exotic magnetic orders for high-spin ultracold fermions. *Europhys. Lett.* 2011. Vol. 93, No. 6. P. 66005.
17. Chen G., Hazzard K. R. A., Rey A. M., Hermele M. Synthetic-gauge-field stabilization of the chiral-spin-liquid phase. *Phys. Rev. A*. 2016. Vol. 93. P. 061601.
18. Lee S.-S. B., von Delft J., Weichselbaum A. Filling-driven Mott transition in $SU(N)$ Hubbard models. *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97. P. 165143.
19. Ibarra-García-Padilla E., Dasgupta S., Wei H.-T., Taie S., Takahashi Y., Scalettar R. T., Hazzard K. R. A. Universal thermodynamics of an $SU(N)$ Fermi-Hubbard model. *Phys. Rev. A*. 2021. Vol. 104. P. 043316.
20. 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.
21. 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.
22. Romen C., Läuchli A. M. Structure of spin correlations in high-temperature $SU(n)$ quantum magnets. *Phys. Rev. Research*. 2020. Vol. 2. P. 043009.
23. Unukovych V., Sotnikov A. $SU(4)$ -symmetric Hubbard model at quarter filling: Insights from the dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. B*. 2021.

- Vol. 104. P. 245106.
24. Unukovych V., Sotnikov A. Anisotropy-driven magnetic phase transitions in SU(4)-symmetric Fermi gas in three-dimensional optical lattices. *J. Phys. B*. 2024. Vol. 57, No. 18. P. 185301.
 25. Unukovych V., Litvinova S., Sotnikov A. Explicit symmetry breaking and effective spin models for four-component interacting Fermi gases in lattice potentials. *Low Temp. Phys.* 2025. Vol. 51, No. 1. P. 10–20.
 26. 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.
 27. 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. P. 3969–3973.
 28. Bradley C. C., Sackett C. A., Tollett J. J., Hulet R. G. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 75. P. 1687–1690.
 29. Klaers J., Schmitt J., Vewinger F., Weitz M. Bose-Einstein condensation of photons in an optical microcavity. *Nature*. 2010. Vol. 468, No. 7323. P. 545–548.
 30. Peletmynskiy O., Slyusarenko Y., Sotnikov A. *Theory of exotic states in quantum Fermi and Bose systems*. Kyiv: Naukova Dumka, 2023. P. 1–480.
 31. Gaunt A. L., Schmidutz T. F., Gotlibovych I., Smith R. P., Hadzibabic Z. Bose-Einstein condensation of atoms in a uniform potential. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. P. 200406.
 32. Gotlibovych I., Schmidutz T. F., Gaunt A. L., Navon N., Smith R. P., Hadzibabic Z. Observing properties of an interacting homogeneous Bose-Einstein condensate: Heisenberg-limited momentum spread, interaction energy, and free-expansion dynamics. *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 89. P. 061604.
 33. Esslinger T. Fermi-Hubbard Physics with Atoms in an Optical Lattice. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2010. Vol. 1, No. 1. P. 129–152.

34. Gross C., Bloch I. Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices. [*Science*](#). 2017. Vol. 357, No. 6355. P. 995–1001.
35. Bloch I., Dalibard J., Zwirger W. Many-body physics with ultracold gases. [*Rev. Mod. Phys.*](#) 2008. Vol. 80. P. 885. DOI:10.1103/RevModPhys.80.885.
36. 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.
37. 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.
38. 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.
39. Boll M., Hilker T. A., Salomon G., Omran A., Nespolo J., Pollet L. et al. Spin- and density-resolved microscopy of antiferromagnetic correlations in Fermi-Hubbard chains. [*Science*](#). 2016. Vol. 353, No. 6305. P. 1257–1260.
40. Cheuk L. W., Nichols M. A., Lawrence K. R., Okan M., Zhang H., Khatami E. et al. Observation of spatial charge and spin correlations in the 2D Fermi-Hubbard model. [*Science*](#). 2016. Vol. 353, No. 6305. P. 1260–1264.
41. Drewes J. H., Miller L. A., Cocchi E., Chan C. F., Wurz N., Gall M. et al. Antiferromagnetic correlations in two-dimensional fermionic Mott-insulating and metallic phases. [*Phys. Rev. Lett.*](#) 2017. Vol. 118. P. 170401.
42. Mazurenko A., Chiu C. S., Ji G., Parsons M. F., Kanász-Nagy M., Schmidt R. et al. A cold-atom Fermi-Hubbard antiferromagnet. [*Nature \(London\)*](#). 2017. Vol. 545, No. 7655. P. 462–466.
43. Lee P. A., Nagaosa N., Wen X.-G. Doping a mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity. [*Rev. Mod. Phys.*](#) 2006. Vol. 78. P. 17–85.
44. Grimm R., Weidemüller M., Ovchinnikov Y. B. [Optical dipole traps for neutral atoms](#) / Ed. by Benjamin Bederson, Herbert Walther. Academic Press, 2000. Vol. 42 of *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*.

- P. 95–170.
45. 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.
 46. Heinz A., Park A. J., Šantić N., Trautmann J., Porsev S. G., Safronova M. S. et al. State-dependent optical lattices for the strontium optical qubit. *Phys. Rev. Lett.* 2020. Vol. 124. P. 203201.
 47. Ono K., Amano Y., Higomoto T., Saito Y., Takahashi Y. Observation of spin-exchange dynamics between itinerant and localized ^{171}Yb atoms. *Phys. Rev. A* 2021. Vol. 103. P. L041303.
 48. Scazza F., Hofrichter C., Höfer M., De Groot P. C., Bloch I., Fölling S. Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold $\text{SU}(N)$ -symmetric fermions. *Nat. Phys.* 2014. Vol. 10, No. 10. P. 779–784.
 49. 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.
 50. Sotnikov A., Darkwah Oppong N., Zambrano Y., Cichy A. Orbital ordering of ultracold alkaline-earth atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Res.* 2020. Vol. 2. P. 023188.
 51. Zhang R., Cheng Y., Zhai H., Zhang P. Orbital Feshbach resonance in alkali-earth atoms. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 135301.
 52. Höfer M., Riegger L., Scazza F., Hofrichter C., Fernandes D. R., Parish M. M. et al. Observation of an orbital interaction-induced Feshbach resonance in ^{173}Yb . *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 265302.
 53. Pagano G., Mancini M., Cappellini G., Livi L., Sias C., Catani J. et al. Strongly interacting gas of two-electron fermions at an orbital Feshbach resonance. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 265301.
 54. Ono K., Kobayashi J., Amano Y., Sato K., Takahashi Y. Antiferromagnetic interorbital spin-exchange interaction of ^{171}Yb . *Phys. Rev. A* 2019. Vol. 99. P. 032707.

55. Altman E., Vosk R. Universal dynamics and renormalization in many-body-localized systems. [*Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*](#) 2015. Vol. 6, No. Volume 6, 2015. P. 383–409.
56. Nandkishore R., Huse D. A. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. [*Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*](#) 2015. Vol. 6, No. Volume 6, 2015. P. 15–38.
57. Abanin D. A., Papić Z. Recent progress in many-body localization. [*Ann. Phys.*](#) 2017. Vol. 529, No. 7. P. 1700169.
58. Darkwah Oppong N., Pasqualetti G., Bettermann O., Zechmann P., Knap M., Bloch I., Fölling S. Probing transport and slow relaxation in the mass-imbalanced Fermi-Hubbard model. [*Phys. Rev. X*](#). 2022. Vol. 12. P. 031026.
59. Wannier G. H. The structure of electronic excitation levels in insulating crystals. [*Phys. Rev.*](#) 1937. Vol. 52. P. 191–197.
60. Chin C., Grimm R., Julienne P., Tiesinga E. Feshbach resonances in ultracold gases. [*Rev. Mod. Phys.*](#) 2010. Vol. 82. P. 1225–1286.
61. Schrieffer J. R., Wolff P. A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. [*Phys. Rev.*](#) 1966. Vol. 149. P. 491–492.
62. 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.
63. 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.
64. Jones R. O. Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. [*Rev. Mod. Phys.*](#) 2015. Vol. 87. P. 897–923.
65. Orús R. Tensor networks for complex quantum systems. [*Nat. Rev. Phys.*](#) 2019. Vol. 1, No. 9. P. 538–550.
66. Cirac J. I., Pérez-García D., Schuch N., Verstraete F. Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems. [*Rev.*](#)

- Mod. Phys.* 2021. Vol. 93. P. 045003.
67. Okunishi K., Nishino T., Ueda H. Developments in the tensor network — from statistical mechanics to quantum entanglement. *J. Phys. Soc. Jpn.* 2022. Vol. 91, No. 6. P. 062001.
 68. Bañuls M. C. Tensor network algorithms: A route map. *Annu. Rev. Cond. Matt. Phys.* 2023. Vol. 14, No. 1. P. 173–191.
 69. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* 1996. Vol. 68. P. 13–125.
 70. Buchhold M. Topological Phases of Interacting Fermions in Optical Lattices with Artificial Gauge Fields: Ph.D. thesis / Goethe-Universität Frankfurt. 2012.
 71. Metzner W., Vollhardt D. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 62. P. 324–327.
 72. Georges A., Kotliar G. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B.* 1992. Vol. 45. P. 6479–6483.
 73. Anderson P. W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.* 1961. Vol. 124. P. 41–53.
 74. 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.
 75. Bulla R. The numerical renormalization group method for correlated electrons. *Advances in Solid State Physics* 40 / Ed. by Bernhard Kramer. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000. P. 169–182.
 76. 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.
 77. Snoek M., Titvinidze I., Tóke C., Byczuk K., Hofstetter W. Anti-ferromagnetic order of strongly interacting fermions in a trap: real-space dynamical mean-field analysis. *New J. Phys.* 2008. Vol. 10, No. 9. P. 093008.
 78. 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.
79. 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.
 80. 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.
 81. Hoshino S., Werner P. Electronic orders in multiorbital Hubbard models with lifted orbital degeneracy. *Phys. Rev. B.* 2016. Vol. 93. P. 155161.
 82. 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.
 83. Honerkamp C., Hofstetter W. Ultracold Fermions and the SU(N) Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. P. 170403.
 84. Cherng R. W., Refael G., Demler E. Superfluidity and magnetism in multicomponent ultracold fermions. *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99. P. 130406.
 85. 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.
 86. Taie S., Takasu Y., Sugawa S., Yamazaki R., Tsujimoto T., Murakami R., Takahashi Y. Realization of a $SU(2) \times SU(6)$ System of Fermions in a Cold Atomic Gas. *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 190401.
 87. DeSalvo B. J., Yan M., Mickelson P. G., Martinez de Escobar Y. N., Killian T. C. Degenerate Fermi Gas of ^{87}Sr . *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 030402.
 88. 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.

89. 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.
90. 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.
91. 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.
92. 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.
93. 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.
94. Wu C. Quantum gases: Mott made easy. *Nat. Phys.* 2012. Vol. 8, No. 11. P. 784–785.
95. Pomeranchuk I. On the theory of liquid He³. *JETP*. 1950. Vol. 20. P. 919.
96. 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.
97. Li Y. Q., Ma M., Shi D. N., Zhang F. C. SU(4) theory for spin systems with orbital degeneracy. *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 81. P. 3527–3530.
98. Yamada M. G., Oshikawa M., Jackeli G. Emergent SU(4) symmetry in α -ZrCl₃ and crystalline spin-orbital liquids. *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 121. P. 097201.
99. Sotnikov A., Hofstetter W. Magnetic ordering of three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 89. P. 063601.
100. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., Hettler M. H. Quantum cluster theories. *Rev. Mod. Phys.* 2005. Vol. 77. P. 1027–1080.

101. Rohringer G., Hafermann H., Toschi A., Katanin A. A., Antipov A. E., Katsnelson M. I. et al. Diagrammatic routes to nonlocal correlations beyond dynamical mean field theory. [*Rev. Mod. Phys.*](#) 2018. Vol. 90. P. 025003.
102. Del Re L., Toschi A. Dynamical vertex approximation for many-electron systems with spontaneously broken SU(2) symmetry. [*Phys. Rev. B*](#). 2021. Vol. 104. P. 085120.
103. 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.
104. Vlaar P. C. G., Corboz P. Simulation of three-dimensional quantum systems with projected entangled-pair states. [*Phys. Rev. B*](#). 2021. Vol. 103. P. 205137.
105. Lukin I. V., Sotnikov A. G., Leamer J. M., Magann A. B., Bondar D. I. Spectral gaps of two- and three-dimensional many-body quantum systems in the thermodynamic limit. [*Phys. Rev. Res.*](#) 2024. Vol. 6. P. 023128.
106. Lukin I. V., Sotnikov A. G. Single-layer tensor network approach for three-dimensional quantum systems. [*Phys. Rev. B*](#). 2024. Vol. 110. P. 064422.
107. Qin M., Schäfer T., Andergassen S., Corboz P., Gull E. The Hubbard model: A computational perspective. [*Annu. Rev. Cond. Matt. Phys.*](#) 2022. Vol. 13, No. Volume 13, 2022. P. 275–302.
108. Sotnikov A., Snoek M., Hofstetter W. Magnetic phases of mass- and population-imbalanced ultracold fermionic mixtures in optical lattices. [*Phys. Rev. A*](#). 2013. Vol. 87. P. 053602.
109. 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.
110. 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.
111. 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.
112. Kovalevsky M. Y., Peletminsky S. V. The principle of residual symmetry of degenerate equilibrium states and the classification of order parameters of single-sublattice magnets with spin $s = 3/2$. *Low Temp. Phys.* 2020. Vol. 46, No. 8. P. 760–763.
 113. Kovalevsky M. Y. On the classification of degenerate equilibrium states of multisublattice $SU(4)$ magnets with spin $s = 3/2$. *Low Temp. Phys.* 2024. Vol. 50, No. 2. P. 138–145.
 114. Taie S., Ibarra-García-Padilla E., Nishizawa N., Takasu Y., Kuno Y., Wei H.-T. et al. Observation of antiferromagnetic correlations in an ultracold $SU(N)$ Hubbard model. *Nat. Phys.* 2022. Vol. 18, No. 11. P. 1356–1361.
 115. Yamamoto D., Morita K. Engineering of a low-entropy quantum simulator for strongly correlated electrons using cold atoms with $SU(\mathcal{N})$ -symmetric interactions. *Phys. Rev. Lett.* 2024. Vol. 132. P. 213401.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації у періодичних наукових виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus або Web of Science:

1. **Unukovych V.** and Sotnikov A. SU(4)-symmetric Hubbard model at quarter filling: Insights from the dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. B* 2021. Vol. 104. P. 245106. DOI: [10.1103/PhysRevB.104.245106](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.245106) (Q1 (2021)).
2. **Unukovych V.** and Sotnikov A. Anisotropy-driven magnetic phase transitions in SU(4)-symmetric Fermi gas in three-dimensional optical lattices. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2024. Vol. 57. P. 185301. DOI: [10.1088/1361-6455/ad6b63](https://doi.org/10.1088/1361-6455/ad6b63) (Q2 (2024)).
3. **Unukovych V.**, Litvinova S., and Sotnikov A. Explicit symmetry breaking and effective spin models for four-component interacting Fermi gases in lattice potentials. *Low Temp. Phys.* 2025. Vol. 51. P. 10. DOI: [10.1063/10.0034554](https://doi.org/10.1063/10.0034554) (Q4 (2025)).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Low-temperature phases of SU(4)-symmetric fermionic mixtures in optical lattices. *II International Advanced Study Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics”*: Abstracts (June 6 – 12, Kharkiv, Ukraine, 2021). Kharkiv, 2021. P. 213.
2. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Low-temperature phases of SU(4)-symmetric fermionic mixtures in optical lattices. *The European Conference Physics of Magnetism 2021*: Abstracts (June 28 – July 2, Poznań, Poland, 2021). Poznań, 2021. P. 70.
3. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Evolution of magnetic ordering

of $SU(4)$ -symmetric fermionic mixture within the transition from 3D to 2D-layered optical lattice. *III International Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics”*: Abstracts (June 5 – 11, Kharkiv, Ukraine, 2023). Kharkiv, 2023. P. 199.

4. **Unukovych V.** Quantum correlations and magnetic properties of ultracold Fermi gases with $SU(4)$ spin symmetry in anisotropic cubic optical lattices *US-Ukraine Quantum Forum 2023*: Abstracts (August 28 – 31, Kharkiv, Ukraine, 2023). Kharkiv, 2023. P. 28.

5. **Unukovych V.I.** and Sotnikov A.G. Effects of symmetry breaking in four component interacting Fermi gas in periodic potential. *IV International Conference “Condensed Matter and Low Temperature Physics”*: Abstracts (June 3 – 7, Kharkiv, Ukraine, 2024). Kharkiv, 2024. P. 220.

6. **Унукович В.І.**, Сотніков А.Г. Ультрахолодні чотирикомпонентні фермі-гази в оптичних ґратках. Вплив порушення просторової та спінової симетрій на фізичні властивості. *24-та Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини*: Збірка тез (24 – 25 жовтня 2024 р., м. Львів). Львів, 2024. С. 18.

7. Bulakhov M.S., Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., **Unukovych V.I.**, and Sotnikov A.G. Long-range correlations and magnetism of spinor ultracold atomic gases. *IEEE Magnetism “Magnetism for Ukraine Initiative” Workshop*: Abstracts (14 November, 2024, Kyiv, Ukraine). Kyiv, 2024. P. 53.

УНУКОВИЧ ВЛАДИСЛАВ ІГОРОВИЧ

Результат перевірки підпису	Підпис вірний
П.І.Б.	УНУКОВИЧ ВЛАДИСЛАВ ІГОРОВИЧ
РНОКПП	3573204617
Організація (установа)	ФІЗИЧНА ОСОБА
Код ЄДРПОУ	
Посада	
Час підпису (підтверджено кваліфікованою позначкою часу для даних від Надавача)	00:10:33 12.06.2025
Сертифікат виданий	КНЕДП АЦСК АТ КБ "ПРИВАТБАНК"
Серійний номер	5E984D526F82F38F04000000D148D0015A366106
Тип носія особистого ключа	Захищений
Алгоритм підпису	dstu4145
Тип підпису	Кваліфікований
Формат підпису	CAdES-T
Сертифікат	Кваліфікований