

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Краснов Володимир Олександрович

УДК 538.9, 538.915, 544.225.23, 535.33

ДИСЕРТАЦІЯ

ТЕРМОДИНАМІКА ТА ЕНЕРГЕТИЧНІ СПЕКТРИ ГРАТКОВИХ БОЗЕ-ФЕРМІ СИСТЕМ ІЗ СИЛЬНИМИ КОРЕЛЯЦІЯМИ

01.04.02 — теоретична фізика

(104 — фізика та астрономія)

10 — природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

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

_____ В. О. Краснов

Науковий керівник член-кор. НАН України Стасюк Ігор Васильович, доктор
фіз.-мат. наук, професор

Львів — 2017

АНОТАЦІЯ

Краснов В.О. Термодинаміка та енергетичні спектри ґраткових бозе-фермі систем із сильними кореляціями. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук (кандидата наук) за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 — Фізика та астрономія). — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2017.

Дисертація присвячена розвитку модельного опису взаємодіючих ґраткових бозе-фермі систем з метою вивчення впливу ферміонної підсистеми на їх термодинамічні властивості, а також особливостей ферміонного спектру у різних фазових станах. В рамках псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ) досліджено спектр електронів у локально-ангармонічних кристалах з тунельним розщепленням рівнів. На основі наближення сплаву, та з використанням методу динамічного середнього поля, вивчено перебудову електронного спектру (що супроводжується появою нових підзон) та перехід типу Мотта. Визначено критичні значення параметрів моделі (таких як: частота тунелювання, константа взаємодії між псевдоспінами та електронами, величина локального поля асиметрії) що визначають умови появи та число електронних підзон в спектрі. Шляхом застосування ПЕМ до опису іонної інтеркаляції в кристалах з різними заповненнями електронних зон показано, що під впливом взаємодії з електронами та міжпозиційного перестрибування інтеркалянта можуть виникати: однорідний або просторово модульований розподіл інтеркалянта; фазове розшарування; фази з високою рухливістю іонів. Для ґраткових надхолодних сумішей бозе- та фермі атомів в оптичних ґратках, що описуються моделлю Бозе-Фермі-Хаббарда (БФХ), було показано існування двох типів бозе-конденсату пов'язаних з різним заповненням ферміонних станів; це проявляється у появі розділених областей фази з бозе-конденсатом на фазових діаграмах при ($T = 0$). Також, було показано, що у границі жорстких бозонів та “важких” ферміонів, в таких системах, фазові переходи до надплинної (SF) фази у режи-

мі фіксованих хімічних потенціалів стають, при певних умовах, переходами 1-го роду, що призводять до фазового розшарування при їх заданих концентраціях; а область існування SF фази змінює свою топологію залежно від величини бозон-ферміонної взаємодії та температури і може бути одно- або двозв'язною. Показано також, що, у таких системах при ненульових температурах можуть існувати “ре-ентрант” переходи (коли фаза з бозе-конденсатом є проміжною). Використовуючи розрахунок одновузлової густини станів ферміонів, досліджено ферміонний енергетичний спектр моделі БФХ у границі жорстких бозонів та сильної хаббардівської кореляції. Показано, що у ферміонному спектрі, в стані з бозе-конденсатом, з'являються додаткові підзони внаслідок появи нових ферміонних переходів між станами з різним числом бозонів.

Ключові слова: бозе-фермі суміші, енергетичний спектр, іонна інтеркаляція, оптичні ґратки, бозе-конденсат.

ABSTRACT

Krasnov V.O. Thermodynamics and energy spectrums of lattice Bose-Fermi mixtures with strong correlations. — Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis on search of the scientific Degree of Candidate of Sciences in Physics and mathematics on the speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 — Physics and Astronomy). — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2010.

Dissertation is devoted to development of the model description of the interacting lattice Bose-Fermi systems for the purpose of study the fermion subsystem influence on their thermodynamical properties and also the features of fermion energy spectrum in the various phase states. Based on the pseudospin-electron model (PEM), the electron spectrum of locally-anharmonic crystals with tunneling splitting of vibrational levels is investigated. The Mott-type transition and reconstruction of spectrum (accompanied by appearance of additional subbands) is analyzed using the alloy analogy approximation within the dynamical mean-field approach. The critical values of the model parameters (such as tunneling frequency, pseudospin-electron interaction constant, local asymmetry field) determining the conditions of emergence and number of electron subbands are found. By application of PEM to describe the ion intercalation in crystals with different filling of electron bands, it was shown that under influence of the electron subsystem and the intersite jumping of impurities the uniform or modulated intercalant distribution, the phase separation, as well as the phases with high mobility of ions can appear. For lattice Bose-Fermi mixture of ultracold atoms in optical lattice which is described by the Bose-Fermi-Hubbard (BFH) model the existence of two types of Bose-Einstein condensate connected with the different filling of fermion states is confirmed; it manifests in appearance of separate regions of SF phase on the phase diagrams at ($T = 0$). It was also shown, that in the limit of hard-core bosons and “heavy” fermions in such a system, the phase transitions to superfluid phase (SF) in the regime of fixed chemical potentials of

particles become of the first order at certain conditions; this leads to phase separation in the case of their fixed concentrations. The area of the SF phase existence, in such a case, changes its topology depending on the magnitude of the boson-fermion interaction and also the temperature and can be simply- or doubly-connected. It was shown that in such a system, in the case of non-zero temperatures, the so-called “re-entrant” transitions (when the phase with BE condensate is intermediate one) can exist. The fermion spectrum of the BFH model in optical lattice is investigated in the limit of hard-core bosons and strong Hubbard correlation by calculation of one-particle density of states for fermions. It is shown that, if the system is in the state with the Bose-Einstein condensate, the splitting in the fermion spectrum takes place; the additional subbands appear here (due to the new fermion transitions between states with different number of bosons).

Keywords: Bose-Fermi mixtures, energy spectrum, ion intercalation, optical lattices, Bose-Einstein condensate.

Список публікацій здобувача

1. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Pseudospin-electron model spectrum in alloy analogy approximation // Condens. Matter Phys. — 2006. — Vol. 9, no. 4(48) — P. 725–739.
2. Mysakovych T.S., Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Phase transitions in the lattice model of intercalation // Condens. Matter Phys. — 2008. — Vol. 11, no. 4(56) — P. 663–667.
3. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S., Krasnov V.O. Phase diagrams of the Bose-Fermi-Hubbard model: Hubbard operator approach // Condens. Matter Phys. — 2010. — Vol. 13, no. 1 — P. 1–7.
4. Mysakovych T.S., Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Lattice Model of Intercalation // Ukr. J. Phys. — 2010. — Vol. 5, no. 2. — P. 228–234.
5. Stasyuk I. V., Krasnov V.O. Energy Spectrum of the Pseudospin-Electron Model in a Dynamical Mean-Field Approach // Ukr. J. Phys. — 2013. — Vol. 58, no. 1. — P. 68–76.
6. Krasnov V.O. Fermion Spectrum of Bose-Fermi-Hubbard Model in the Phase with Bose-Einstein Condensate // Ukr. J. Phys. — 2015. — Vol. 60, no. 5. — P. 443–451.
7. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Phase transitions in Bose-Fermi-Hubbard model in the heavy fermion limit: Hard-core boson approach // Condens. Matter Phys. — 2015. — Vol. 18, no. 4. — P. 1–20.
8. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Phase transitions in the hard-core Bose-Fermi-Hubbard model at non-zero temperatures in the heavy-fermion limit // Physica B: Physics of Condensed Matter. — 2017. — Vol. 511, no. 1. — P. 109–122.
9. Стасюк І. В., Краснов В. О. Спектр псевдоспін-електронної моделі в сплавному наближенні // Матеріали V міжнародної школи - конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” — Дрогобич (Україна), 2005. — 27–30 червня. — С. 220.

10. Stasyuk I. V., Krasnov V. O. Pseudospin-electron model spectrum in alloy analogy approximation // Book of Abstracts of the International Conference “Statistical Physics 2006. Condensed Matter: Theory and Applications”. — Kharkiv (Ukraine), 2006. — September 11–15 — P. 84.
11. Мисакович Т. С., Стасюк І. В., Краснов В. О. Граткова модель інтеркаляції // Матеріали IV Міжнародної наукової конференції “Фізика невідпорядкованих систем” — Львів (Україна), 2008. — 14–16 жовтня. — С. 56.
12. Mysakovych T. S., Stasyuk I. V., Krasnov V. O. Thermodynamics of lattice model of intercalation // Program and abstracts of the 3-rd conference “Statistical physics: modern trends and applications”. — Lviv (Ukraine), 2009. — June 23–25 — P. 197.
13. Mysakovych T. S., Krasnov V. O., Stasyuk I. V. Phase transitions in the lattice model of intercalation // Book of abstracts ICPTTFN-XII. — Ivano-Frankivsk (Ukraine), 2009. — May 18–22 — vol. 1, — P. 465.
14. Stasyuk I. V., Mysakovych T. S., Krasnov V. O. Phase diagrams of Bose-Fermi-Hubbard model at nonzero temperature // 9-th ISSFIT International symposium on systems with fast ionic transport. — Ryga, (Latvia), 2010. — June 1–5 — poster 4.
15. Стасюк І. В., Мисакович Т. С., Краснов В. О. Модель Бозе-Фермі-Хаббарда: підхід операторів Хаббарда // VII Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” — Дрогобич (Україна), 2010. — 28 вересня — 1 жовтня. — С. 70.
16. Krasnov V.O. Fermion spectrum of the Bose-Fermi-Hubbard model // In: Program and Proceedings of the V Young Scientists Conference “Problems of Theoretical Physics”. — Kyiv (Ukraine), 2013. — December 24-27, 2013. — P. 29.

ЗМІСТ

Вступ	12
1 Огляд літератури	22
1.1 Псевдоспін-електронна модель та її застосування	23
1.2 Граткова модель інтеркаляції в кристалах	29
1.3 Сильно скорельовані бозе- та фермі-атоми в оптичних гратках. Мо- дель Бозе-Фермі-Хаббарда	35
2 Електронний спектр псевдоспін-електронної моделі	42
2.1 Вступ	42
2.2 Електронний спектр псевдоспін-електронної моделі у наближенні сплаву в підході різночасових розщеплень.	43
2.2.1 Гамільтоніан моделі	43
2.2.2 Рівняння руху для електронної функції Гріна	46
2.2.3 Різночасові розщеплення незвідних функцій Гріна	52
2.2.4 Близькі підзони у наближенні сплаву	54
2.3 Електронний спектр псевдоспін-електронної моделі у границі $U \rightarrow \infty$	60
2.3.1 Гамільтоніан моделі на редукованому базисі	60
2.3.2 Переформулювання теореми Віка для ефективної одновузло- вої задачі	63
2.3.3 Одновузлова функція Гріна	65
2.3.4 Електронний енергетичний спектр та його перебудова при наявності поперечного псевдоспінового поля	69
2.4 Висновки	74

3	Псевдоспін-електронна модель інтеркаляції іонів в кристалах	76
3.1	Вступ	76
3.2	Гамільтоніан моделі та його перетворення	77
3.3	Термодинамічні функції у наближенні середнього поля	79
3.4	Фазові переходи у випадку інтеркалянта акцепторного типу ($g > 0$)	81
3.5	Фазові переходи у випадку інтеркалянта донорного типу ($g < 0$) . .	84
3.6	Висновки	89
4	Фазові діаграми моделі Бозе-Фермі-Хаббарда: нестійкість нормальної (МІ) фази	91
4.1	Вступ	91
4.2	Наближення хаотичних фаз	92
4.3	Нестійкість нормальної фази та фазові діаграми	95
4.4	Висновки	100
5	Фазові переходи в моделі Бозе-Фермі-Хаббарда в границі важких ферміонів та жорстких бозонів у випадку $T = 0$	102
5.1	Вступ	102
5.2	Чотиристанова модель	103
5.3	Наближення середнього поля	105
5.4	Термодинамічний потенціал та параметр порядку	107
5.5	Спінодалі при $T = 0$	110
5.6	Фазовий перехід першого роду до надплинної фази	112
5.7	Фазові діаграми при $T = 0$	117
5.8	Розділення фаз в режимі фіксованого хімічного потенціалу ферміонів	124
5.9	Висновки	126
6	Фазові переходи в моделі Бозе-Фермі-Хаббарда в границі важких ферміонів та жорстких бозонів при ненульових температурах	130
6.1	Вступ	130
6.2	Гамільтоніан моделі та рівняння для параметру порядку	131

6.3	Фазові діаграми	133
6.4	Висновки	152
7	Енергетичний спектр ферміонів у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда	155
7.1	Вступ	155
7.2	Гамільтоніан моделі та його перетворення при наявності бозе-конденсату	156
7.3	Чотиристанове наближення	160
7.4	Спектр ферміонів при $T = 0$	162
7.5	Густини ферміонних енергетичних станів у нормальній фазі (NO) та у фазі з бозе-конденсатом (SF)	165
7.6	Висновки	168
	Висновки	171
	Список використаних джерел	173
A	Базові рівняння теорії динамічного середнього поля	186
B	Різночасові розщеплення функцій Гріна	188
B	Список публікацій здобувача	191
Г	Апробація результатів дисертації	194

ВСТУП

Актуальність теми.

Протягом останніх років у фізиці квантових багаточастинкових систем значна увага зосереджена на нових явищах, у яких суттєвим чином проявляються колективні ефекти, що пов'язані з взаємодією та взаємним впливом частинок (квазі-частинок), які описуються різною статистикою - Бозе, Фермі, або змішаною (типу статистики Паулі, де при теоретичному опису використовується псевдоспіновий формалізм).

Серед таких об'єктів особливої актуальності набули оптичні ґратки з ультрахолодними бозе- та фермі-атомами і їх атомними сумішами. Найбільше зацікавлення, в першу чергу, викликає конденсація бозе-атомів (відкрита експериментально в [1] у системі ^{87}Rb атомів), там же було передбачено, що атомарний газ в фазі моттівського діелектрика (MI-фазі) може розглядатись як новий стан матерії з унікальними властивостями. Згодом, конденсація була отримана і для сумішей бозе (^{87}Rb) та фермі (^{40}K) атомів, де спостережено низку нових ефектів, зумовлених взаємодією бозе- і фермі-підсистем. Було вивчено, зокрема, залежність переходу до надплинної (SF-фази) від домішкової концентрації ферміонів у порівнянні з відповідним MI-SF переходом в чистому бозонному газі. Особливе зацікавлення бозон-ферміонними сумішами зумовлене ще й тим, що за допомогою резонансу Фешбаха можна змінювати константи міжчастинкових взаємодій і впливати тим самим на згаданий перехід та на фізичні властивості в цілому.

З другого боку, міжсорткова квантова взаємодія проявляється і при іонній інтеркаляції в кристалах. У цьому випадку інтеркальовані (домішкові) частинки при модельному ґратковому описі виступають як жорсткі бозони, а характер просторового розподілу інтеркалянта визначається як прямою взаємодією між

впровадженими атомами, так і їх взаємодією з електронною підсистемою базового кристалу.

Теоретичні дослідження ґраткових чистих та змішаних бозе-фермі систем розвиваються переважно на базі ґраткових моделей Бозе-Хаббарда (БХ) та Бозе-Фермі-Хаббарда (БФХ) [2], а у випадку жорстких бозонів псевдоспін-ферміонної та псевдоспін-електронної моделі [3] (останню можна розглядати як граничний випадок моделі БФХ). ПЕМ є однією з тих, що активно використовується в фізиці сильноскорельованих електронних систем. Початково вона була запропонована до опису високотемпературних надпровідників і дозволила описати роль ангармонічної підсистеми іонів кисню у появі неоднорідних станів та явищі бістабільності [4]. Псевдоспінове представлення також використовується для опису іонних провідників та інтеграції іонів в кристалах [5]. На базі згаданих моделей найбільш повно вивченні фазові переходи між різними (однорідними, модульованими і т.н.) фазами, а для оптичних ґраток - в першу чергу переходи до надплинної фази. Залишається важливим питання про вплив ферміонної (чи електронної) підсистеми на фазові стани системи. Заслуговує уваги ситуація, коли можна вважати заданими хімічні потенціали бозонів та ферміонів. Такий термодинамічний режим дозволяє більш повно описувати фазові переходи 1-го роду та розшарування фаз.

Окремою проблемою є взаємний вплив підсистем на формування ефективної взаємодії між ферміонами (електронами) через бозони та між бозонами через ферміони. Цей ефект добре вивчений в літературі [6]. Разом з тим, прояви згаданого впливу в одночастинкових спектрах (особливо це стосується ферміонів) з'ясовані ще недостатньо. Тут викликає інтерес можливість перебудови чи модифікації таких спектрів при фазових переходах і, зокрема, при появі бозе-конденсату.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дисертаційна робота виконана в ІФКС НАН України згідно з планами робіт в рамках держбюджетних тем “Розвиток аналітичних методів теорії енергетичного спектру та динаміки сильнокорельованих систем частинок” (номер держреєстрації 0105U002085), “Розробка сучасних теоретичних методів та їх застосування до вивчення властивостей конденсованих систем” (Шифр теми БТ 01102, номер держ-

реєстрації 0102U001794), “Розвиток і застосування методів аналітичної теорії та комп’ютерного експерименту для опису явищ переносу в іон-електронних системах”. (номер держреєстрації 0107U002081), “Моделювання фізичних властивостей квантових ґраткових систем з багаточастинковими кореляціями” (номер держреєстрації 0108U001154), “Квантові багаточастинкові ґраткові системи: динамічний відгук і ефекти сильних кореляцій” (номер держреєстрації 0112U007761), “Багатомасштабність і структурна складність конденсованої речовини: теорія і застосування” (номер держреєстрації 0112U007762).

Мета і задачі дослідження.

Основними *об’єктами дослідження* у дисертаційній роботі є системи бозе- та фермі-частинок з сильними кореляціями (кристалічні сполуки з перехідними та рідкісноземельними елементами, інтеркальовані кристали, атоми у оптичних ґратках), що описуються псевдоспін-електронною моделлю та моделлю Бозе-Фермі-Хаббарда. *Предметом дослідження* є вивчення енергетичного спектру та фазових переходів у таких моделях. Для вирішення поставлених задач використані такі *методи дослідження*: техніка операторів Хаббарда та застосування теореми Віка для них, апарат двочасових та температурних функцій Гріна, підхід динамічного середнього поля, наближення хаотичних фаз та самоузгодженого поля, наближення типу Хаббард I.

Метою дисертаційної роботи є вивчення впливу ферміонної підсистеми у змішаних квантових системах бозе- та фермі-частинок на термодинамічні властивості, рівноважні стани та фазові переходи між ними (зокрема на явище бозе-конденсації) в режимі заданих хімічних потенціалів частинок, а також особливостей ферміонного спектру в таких системах у різних квантових станах, у тому числі у надіclinній фазі. Для досягнення мети досліджень поставлено такі задачі:

- Розрахунок енергетичного електронного спектру ПЕМ в рамках методу ДСП, дослідження впливу псевдоспін-електронної взаємодії, локального поля асиметрії та тунельного розщеплення рівнів на умови існування та кількість електронних підзон.

- Дослідження термодинаміки інтеркаляції іонів в кристалах в рамках ґраткової псевдоспінової моделі з врахуванням впливу електронної підсистеми.
- Дослідження фазових переходів при ненульових температурах в моделі БФХ для ультрахолодних сумішей бозе- та фермі-атомів у оптичних ґратках в наближенні хаотичних фаз з використанням формалізму операторів Хаббарда; встановлення областей існування надплинної фази та фази моттівського діелектрика.
- Побудова для випадку жорстких бозонів та “важких” ферміонів у термодинамічному режимі заданих хімічних потенціалів частинок. Дослідження можливості зміни роду фазового переходу до надплинної фази при різних температурах.
- Розрахунок електронного енергетичного спектру моделі БФХ у границі сильної хаббардівської кореляції в наближенні жорстких бозонів та дослідження умов появи додаткових підзон в ферміонному спектрі за наявності бозе-конденсату.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, семи розділів, висновків та списку використаних джерел. Обсяг дисертації становить 194 сторінки включно зі списком використаних джерел, що містить 145 найменувань. Результати роботи проілюстровано на 73 рисунках.

У **вступі** вказано актуальний стан даної тематики, сформульовано мету, методи та завдання яке поставлено в дослідженні, вказано новизну та практичне значення отриманих результатів.

Перший розділ присвячено огляду як теоретичних, так і експериментальних робіт які стосуються термодинамічних властивостей та енергетичних спектрів багаточастинкових бозе-фермі систем на ґратках. Розглянуто основні теоретичні моделі, зокрема псевдоспін-електронну модель та модель Бозе-Фермі-Хаббарда, та методи їх дослідження. Наведено також області застосування таких моделей, обговорено у тому числі основні експериментальні спостереження, які мають відношення до модельного опису інтеркаляції іонів у кристалах та стосуються впливу

фермі-атомів на термодинаміку бозе-фермі атомних сумішей у оптичних ґратках.

Другий розділ присвячено дослідженню електронного енергетичного спектру псевдоспін-електронної моделі у наближенні сплаву в рамках теорії динамічного середнього поля (ДСП). Розрахунок спектру проведено за допомогою методу функцій Гріна. Ефективну одновузлову задачу, яка складає основу цього підходу і встановлює функціональну залежність між одновузловою електронною функцією Гріна і когерентним потенціалом, розв'язано у наближенні сплаву, застосовуючи два способи. Перший з них ґрунтується на наближеній аналітичній схемі, в основі якої є проектування у рівняннях руху на підпростір хаббардівських операторів фермі-типу та техніка різночасових розчеплень. Другий спосіб пов'язаний з використанням теорії збурень у мацубарівському представленні з застосуванням модифікованої форми теореми Віка для X -операторів, що відповідає наближенню сплаву. Досліджено особливості електронного зонного спектру ПЕМ, пов'язані з появою енергетичної щілини та переходом метал-діелектрик. Розглянуто ділянку спектру, утворену близькими хаббардівськими підзонами, які визначають положення хімічного потенціалу при електронному заповненні, близькому до половинного. Встановлено умови відкриття щілини залежно від значень параметра одновузлової взаємодії електронів U , асиметрії локального ангармонічного потенціалу $\hbar$ та параметра тунелювання Ω . Окремо проаналізовано випадок нескінченного відштовхування електронів на вузлі (коли виключаються подвійно заповнені стани), досліджено загальну перебудову зонного спектру шляхом злиття або появи нових підзон, пов'язаних з електронним переходами, які супроводжуються перевертанням псевдоспінів (тунельним перестрибуванням частинок у локально ангармонічній підсистемі).

У **третьому** розділі дисертації ПЕМ застосовується до опису термодинаміки іонної інтеркаляції у кристалах. Модель доповнено шляхом врахування перенесення інтеркальованих іонів між їх рівноважними позиціями в кристалі. Вивчено вплив взаємодії іонів з електронами провідності на рівноважні стани підсистеми інтеркалянта. Для дослідження термодинаміки моделі застосовано наближення середнього поля (НСП) стосовно псевдоспін-електронної взаємодії та перенесення

інтеркальованих іонів (таке наближення відповідає т.зв. моделі детермонованих зон). Взято до уваги можливість формування модульованих фаз. Побудовано фазові діаграми, що визначають області існування різних фаз: однорідних фаз з різними концентраціями інтеркалянта, модульованих фаз типу CDW та фаз з великою рухливістю домішкових іонів (з $\langle S_i^x \rangle \neq 0$). Встановлено умови, за яких взаємодія інтеркальованих іонів з електронами провідності сприяє розшаруванню на “бідну” та “багату фази” або ж появі модульованих фаз залежно від заповнення електронних зон, типу домішкових іонів (донорні чи акцепторні домішки), а також ступеня іонного міжвузлового перенесення. Проаналізовано вплив останнього на стійкість нормальних фаз.

Четвертий розділ присвячено розгляду фазової поведінки та нестійкості щодо появи бозе-конденсату у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда яку використовують при описі суміші ультрахолодних бозе- та фермі- атомів у оптичних ґратках. Звернуто увагу на вплив ферміонів на перехід від нормальної (МІ) до надплинної (SF) фази; розраховано лінії спінодалей, які є лініями фазових переходів (ФП) 2-го роду коли термодинамічно можливою є їх реалізація. Для встановлення умов стабільності МІ фази відносно появи бозе-конденсату застосовано критерій розбіжності бозонної функції Гріна $\ll b|b^+ \gg_{q,\omega}$ при $\omega = 0$, $\vec{q} = 0$. При цьому, з метою базисного врахування одновузлових взаємодій використано формалізм операторів Хаббарда що діють на базисі вузлових станів. Побудовано фазові діаграми (W, μ) та (T, μ) для ненульових температур та виділено на них області, де бозе-конденсат виникає з малою (великою) концентрацією ферміонів (що відповідає існуванню двох типів бозе-конденсату у БФ-сумішах). Розглянуто випадки притягання та відштовхування між бозонами і ферміонами за скінченної бозонної кореляції U хаббардівського типу. Досліджено ефект “відриву” від осі абсцис областей SF фази при активаційному механізмі перенесення бозонів.

У **п'ятому** розділі більш детально розглянуто термодинаміку моделі БФХ у випадку “важких” ферміонів (при гранично малому значенні параметра перенесення ферміонів t'_{ij}). Використано наближення жорстких бозонів та безспінових (спін-поляризованих) ферміонів і в рамках ефективної чотиристанової моделі, ви-

ходячи з умов термодинамічної рівноваги, проаналізовано фазовий перехід MI-SF (не обмежуючись критерієм стабільності нормальної (MI) фази для знаходження точки переходу). Розрахунки проведено при $T = 0$ в режимі фіксованих хімічних потенціалів бозонів μ та ферміонів μ' . Ми обмежилися при цьому випадком відштовхування між бозонами і ферміонами ($U' > 0$). Досліджено особливості у залежностях параметра порядку бозе-конденсату φ та термодинамічного потенціалу Ω від зімічного потенціалу бозонів μ та виявлено області його значень, де рід фазового переходу MI-SF змінюється з другого на перший. Побудовано фазові діаграми (μ', μ) та $(|t_0|, \mu)$, які визначають області існування різних фаз при $T = 0$ за умови заданих значень $|t_0|$ (параметра перенесення бозонів) та μ . Проаналізовано перебудову фазових діаграм при зміні хімічного потенціалу ферміонів.

У **шостому розділі**, розгляд термодинаміки моделі БФХ у ґратці жорстких бозонів та “важких” ферміонів, проведений на основі 4-станової моделі у розділі 5 у рамках великого канонічного ансамблю для $T = 0$, поширено на ненульові температури. Застосовано аналогічний підхід: бозон-ферміонну взаємодію $U' > 0$ враховано точно, а перенесення бозонів по ґратці - у НСП.

Проаналізовано поведінку параметра порядку φ та термодинамічного потенціалу Ω як функцій μ та μ' при ненульових температурах. Виділено термодинамічно стійкі стани; розраховано лінії спінодалей та побудовано фазові діаграми на площині (T, μ) . Досліджено випадки коли проявляється “реентрант” поведінка (існування SF фази як проміжної при зміні температури) а також встановлено умови, за яких лінії фазових переходів не накладаються на спінодали і переходи є 1-го роду.

Проаналізовано стрибки концентрацій $\Delta \bar{n}_B$ та $\Delta \bar{n}_F$ на лінії фазових переходів 1-го роду при різних температурах та встановлено умови фазового розширення, яке може відбуватись при заданих концентраціях частинок.

Сьомий розділ присвячено дослідженню ферміонного спектру моделі Бозе-Фермі-Хаббарда (БФХ) в рамках методу, що базується на застосуванні операторів Хаббарда для базисного врахування одновузлових кореляцій. Як і в розділах 5 і 6, розглянуто випадок жорстких бозонів і відштовхувальної бозон-ферміонної

взаємодії ($U' > 0$), однак враховано перенесення ферміонів ($t'_{ij} \neq 0$), спіни яких зорієнтовані в одному напрямку. Для дослідження ферміонного спектру використано підхід двочасових температурних функцій Гріна $\langle\langle a_i | a_j^+ \rangle\rangle$ побудованих на фермі-операторах записаних у Х-представленні. Розрахунки проведено у наближенні середнього поля для бозонів та наближенні Хаббард-I для ферміонів. Знайдено ферміонний спектр (при $T = 0$) та розраховано відповідні спектральні густини. Досліджено трансформацію спектру, яка полягає у його розщепленні і появі при переході до фази SF з бозе-конденсатом додаткових підзон, що є наслідком змішування станів з різним числом бозонів і, відповідно, виникнення нових ферміонних переходів.

Дисертаційна робота завершується **Висновками** та **Списком використаних джерел**.

Наукова новизна одержаних результатів.

1. Вперше в рамках схеми ДСП показано, що взаємодія з локально ангармонічними модами коливань кристалічної ґратки приводить до суттєвої зміни умов появи моттівської щілини в енергетичному спектрі сильно скорельованих електронів у металах, що описуються псевдоспін-електронною моделлю (в т.ч в кристалах з перехідними і рідкісноземельними елементами).
2. Виявлено ефект додаткового розщеплення електронного спектру псевдоспін-електронної моделі, зумовленого взаємодією сильноскорельованих електронів з псевдоспіновим полем; на прикладі нижньої хаббардівської підзони показано, що появу нових підзон у спектрі генерує реорієнтаційна динаміка псевдоспінів сукупно з асиметрією локальних полів.
3. В рамках псевдоспінового опису та з врахуванням взаємодії з електронами провідності вперше досліджено вплив іонного перенесення на термодинаміку інтеркальованих домішкових іонів у кристалах; встановлено умови, за яких така взаємодія сприяє модуляції їх просторового розподілу або фазовому розшаруванню на області з різними концентраціями (у випадку домішок як донорного так і акцепторного типу). Вперше виявлено можливість появи

фази з високою рухливістю частинок інтеркалянта в залежності від рівня їх хімічного потенціалу та інтенсивності перескокової динаміки.

4. В рамках моделі Бозе-Фермі-Хаббарда при точному врахуванні одновузлової взаємодії між частинками вперше побудовано (T, μ) фазові діаграми для бозон-ферміонної суміші у оптичних ґратках та встановлено області нестійкості МІ- фази при різних концентрації (n') ферміонів та ненульових температурах; виявлено появу нових областей SF фази у порівнянні з чистою бозе-системою.
5. Виходячи з моделі БФХ у границі жорстких бозонів і “важких” ферміонів, вперше показано, що фазові переходи з МІ до SF фази у режимі фіксованих хімічних потенціалів частинок можуть змінювати свій рід з 2-го на 1-ий у певних областях значень μ та μ' ; при заданих концентраціях частинок виникатиме при цьому фазове розшарування. При ненульових температурах можуть існувати “реентрант” переходи з послідовністю фаз МІ-SF-МІ.
6. Виявлено та описано перебудову одночастинкового ферміонного енергетичного спектру моделі БФХ, що проявляється в розщепленні зонного спектру та появі нових підзон у фазі з бозе-конденсатом.

Практичне значення отриманих результатів. Розвинений в роботі підхід, що ґрунтується на методі динамічного середнього поля та використанні обмеженого одновузлового базису, може скласти основу для подальшого розгляду енергетичного спектру систем, що описуються узагальненими псевдоспін-електронним моделями (з $S \geq 1$ чи збільшеною кількістю локальних електронних станів), а також спектру бозон-ферміонних сумішей у оптичних ґратках при виході за межі наближення жорстких бозонів.

Результати, отримані при дослідженні впливу електронів провідності на іонну інтеркаляцію у кристалах та побудові фазових діаграм, можуть бути використані при інтерпретації даних експерименту, що стосуються термодинаміки інтеркаляції і фазових станів іонної підсистеми в іонних провідниках.

Схема розрахунку термодинамічних характеристик та побудови фазових ді-

аграм моделі БФХ може бути безпосередньо перенесена на випадок притягальної одновузлової взаємодії між бозонами і ферміонами, а також відсутнього обмеження на заповнення бозонних станів. З іншого боку, отримані теоретично фазові діаграми можуть бути використані для інтерпретації отриманих експериментально результатів дослідження бозон-ферміонних сумішей в оптичних ґратках.

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи проф. І. В. Стасюк. Усі викладені в дисертації результати автор отримав самостійно або при своїй безпосередній участі. У роботах виконаних зі співавторами здобувачеві належить: у роботах [1,5] проведення аналітичних розрахунків та отримання остаточних виразів для функцій Гріна, чисельний розв’язок отриманих рівнянь та побудова графіків. В роботах [2,3,4] до особистого внеску автора відноситься проведення низки числових розрахунків, графічне представлення результатів та участь в їх обговоренні. В роботах [7,8] автором отримано рівняння для параметру порядку та критерії стійкості фаз, проведено числові розрахунки; автору належить графічне представлення результатів та участь в обговоренні та інтерпретації отриманих результатів.

Апробація роботи здійснена під час доповідей і обговорення основних результатів на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Ці результати також доповідались, обговорювались та опубліковані у матеріалах таких конференцій: V, VI, VII міжнародні школи - конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, (Дрогобич, Національний педагогічний університет, 27-30.06.2005 р., 23-26.09.2008 р., 29.09-1.10.2010 р.); IV Міжнародна наукова конференція “Фізика неупорядкованих систем”, (Львів, 14-16 жовтня 2008 р.); The 3-rd conference “Statistical physics: modern trends and applications” (Lviv, 23-25 June, 2009); Конференція молодих вчених “Проблеми теоретичної фізики” (Київ, Інститут теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України, 24-27 грудня 2013 р.).

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковано у восьми журнальних статтях та восьми тезах доповідей на конференціях.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Квантові системи фермі- та бозе-частинок із сильними короткосяжними кореляціями є предметом теоретичних досліджень вже на протязі декількох останніх десятиліть. Одна з основних ідей, яка лежить в основі цього напрямку була сформульована М. М. Боголюбовим у його відомій монографії “Лекції з квантової статистики”, виданій у Києві в 1949 [7]. Ним було показано, що у випадку сильної локалізації електронів на атомах у кристалі, коли їх хвильові функції, що відносяться до сусідніх атомів, слабо перекриваються, відносні величини матричних елементів міжелектронної взаємодії можна класифікувати за ступенем такого перекриття. Максимальним (і таким, що значно перевищує інші) є матричний елемент $\langle ii|V|ii\rangle \equiv U$, розрахований на електронних хвильових функціях того ж орбітального стану атома (у випадку відсутності орбітального виродження). Відповідно, була сформульована модель, що носила назву “полярної моделі металу”. У наступних дослідженнях ця модель знайшла своє продовження в 1960-х роках у роботах Дж. Хаббарда [8], де поряд з взаємодією U , як і у Боголюбова, був врахований міжвузловий рух електронів по кристалу, який описувався за допомогою міжвузлових матричних елементів т.зв. електронного перенесення t_{ij} . Така відносно проста модель, відома у літературі як модель Хаббарда, до цього часу є базовою при описі енергетичного спектру та термодинаміки ґраткових систем квантових частинок з сильними короткосяжними взаємодіями.

До числа таких фізичних систем відносяться: кристалічні сполуки з перехідними та рідкісноземельними елементами та системи зі змінною валентністю; високотемпературні надпровідники; магнетики з колективізованими електрона-

ми; іонні (протонні) провідники; оптичні ґратки з бозе- та фермі-атомами...Серед явищ і властивостей, які переважно вивчаються (і в яких проявляється ефект короткосяжних кореляцій), можна відзначити: переходи метал-діелектрик, зарядові впорядкування, магнітні фазові переходи та аномалії, виникнення надпровідного стану, фазові розшарування, а останнім часом - фазові переходи, пов'язані з бозе-конденсацією ультрахолодних атомів у штучно створених ґраткових структурах (т. зв. оптичні ґратки). Серед моделей, які при цьому використовуються, слід відзначити (крім згаданої вище моделі Хаббарда) такі її узагальнення, модифікації чи спрощення, як модель Фалікова-Кімбала, псевдоспін-електронну модель, модель жорстких бозонів, моделі Бозе-Хаббарда та Бозе-Фермі-Хаббарда. Останні дві моделі з перелічених були запропоновані для опису систем бозе-частинок (чи змішаних систем з бозе- і фермі-частинками) на ґратках з локальною взаємодією типу хаббардівського відштовхування U . В свою чергу, модель жорстких бозонів є граничним випадком моделі Бозе-Хаббарда з $U \rightarrow 0$, що елімінує стани з заповненням $n_i > 1$. При переході до псевдоспінового опису з $S_i = n_1 - 1/2$ і врахуванні взаємодії з фермі-частинками (наприклад, електронами) модель жорстких бозонів переходить у псевдоспін-електронну модель.

Незважаючи на достатньо довгу історію використання згаданих вище моделей, ряд проблем, що виникають при їх застосуванні до конкретних фізичних об'єктів та явищ, потребують свого вирішення. Це стосується, зокрема задач, які розглядаються у даній дисертаційній роботі. Саме виходячи з цього розглянемо деякі аспекти та приклади застосування чистих та змішаних ґраткових моделей, де присутні, поряд з ферміонами, бозони, при дослідженні ефектів, зумовлених короткосяжними кореляціями.

1.1. Псевдоспін-електронна модель та її застосування

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ) записується у вигляді:

$$H = \sum_i [U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + (g S_i^z - \mu)(n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) - h S_i^z - \Omega S_i^x] + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma}, \quad (1.1)$$

де, окрім кореляції електронів (U) також присутня одновузлова взаємодія з псевдоспінами (g) та енергія тунельного розщеплення (Ω); поле h описує асиметрію локального ангармонічного потенціалу. Гамільтоніан у формі (1.1) (з включенням тільки доданку g) був використаний Мюллером з метою опису ангармонічних коливань в кисневій підсистемі високотемпературних надпровідних кристалів типу YBaCuO [3]. Для них характерними є сильні анагармонічні коливання іонів кисню O_4 перпендикулярно до площин надпровідності. Згідно наявних даних (незважаючи на їх неоднозначність) було встановлено існування двох різних рівноважних позицій для іонів O_4 та виявлено зв'язок між цими позиціями та електронними станами в площинах $Cu_2 - O_2$, який грає важливу роль в кристалах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$; як наслідок, було зроблено висновок про присутність сильної електрон-коливної взаємодії. В псевдоспіновому представленні, у випадку коли псевдоспінова змінна $S_i^z = \pm 1/2$ визначає положення іонів O_4 , такий зв'язок описується доданком $gS_i^z n_{i\sigma}$.

В контексті ідеї, що пов'язує вплив ангармонічності на температуру переходу до надпровідного стану [9–12], було розглянуто (розрахунки за допомогою квантового методу Монте-Карло) можливий зв'язок між надпровідним спарюванням та ангармонічністю ґратки [13]. Згодом ці міркування було доповнено аналізом електронного спектру ПЕМ [14], псевдоспінової та колективної динаміки [15, 16], розрахунками зарядових та парних псевдоспінових кореляцій та поведінки діелектричної сприйнятливості [17].

В подальших дослідженнях основну увагу було приділено термодинаміці моделі в особливих випадках та певних спрощеннях: модель з нескінченно великою кореляцією ($U \rightarrow \infty$), коли відсутні стани з подвійним електронним заповненням; спрощена ПЕМ з $U = 0$ та $\Omega = 0$; спрощена ПЕМ з $U = 0$ та врахуванням тунельної динаміки ($\Omega \neq 0$); двопідґраткова ПЕМ, адаптована до опису шаруватої структури типу YBaCuO.

Було проведено (в режимі фіксованих значень хімічного потенціалу ($\mu = const$)) дослідження фазових переходів між станами з різним числом заповнення електронів та різними орієнтаціями псевдоспінів, а також фазового розшаруван-

ня (у випадку фіксованої концентрації ($n = const$)) [18, 19]. Можливість появи подвійно модульованої або неспівмірної фази (у випадку слабого зв'язку) було розглянуто в [20–23]. Нестабільність ПЕМ стосовно переходу до надпровідної фази було проаналізовано в [24]. У випадку двопідграткової ПЕМ структурні нестабільності сегнетоелектричного типу та явище бістабільності було досліджено в [25–29]. Так, зокрема, в роботі [26] за допомогою теорії збурень за переносом t_{ij} для одно-підграткової ПЕМ виявлено суттєву роль електронних взаємодій у формуванні зарядовпорядкованого стану, показано, при яких значеннях поля виникає модуляція з подвоєним періодом ґратки і знайдено температуру фазового переходу в залежності від концентрації ферміонів. За допомогою двопідграткової ПЕМ (яка є узагальненням моделі Міцуї і відповідає центросиметричній кристалічній структурі високотемпературних надпровідників YBaCuO) виявлено [25] можливість існування нецентросиметричної фази та побудовано фазові діаграми на площинах (T, h) та (T, n) при врахуванні далекосяжної псевдоспін-псевдоспінової взаємодії у наближенні середнього поля та точному врахуванні короткосяжної взаємодії в межах двочастинкового кластера.

Для граничного випадку відсутності перенесення електронів проведено розрахунки діелектричної сприйнятливості ПЕМ для низьких температур в різних режимах: фіксованого хімічного потенціалу та фіксованої концентрації електронів [27]; було також показано, що вплив тунельного розщеплення рівнів на поведінку сприйнятливості є суттєвим для областей, де знімається виродження основного стану. В режимі постійного хімічного потенціалу досліджено роль електронного перенесення у фазових переходах зі зміною концентрації електронів та середнього значення псевдоспіна, та показано, що ефективна взаємодія, спричинена цим зонним рухом електронів, може сприяти появі сегнетоелектричної фази [28]. В режимі постійного значення концентрації електронів для двопідграткової ПЕМ виявлено наявність фазового розшарування причиною якого є пряма взаємодія між псевдоспінами, або ефективна взаємодія між електронами, викликана їх перенесенням, та розщепленням спектру, що при цьому виникає. Також, за допомогою узагальненого наближення хаотичних фаз (УНХФ) термодинаміку псевдоспін-електронної

моделі було досліджено в [30, 31].

Було показано [15, 16], що ПЕМ володіє цікавою колективною динамікою псевдоспінів. Відповідні зміни в спектрі формуються в залежності від електронної концентрації та температури; спектр є різним в залежності від великого чи малого значення g а його форма також залежить і від параметрів h та Ω . В роботах [24, 32, 33] було досліджено внески в інтенсивності раманівських спектрів пов'язані зі згаданими колективними псевдоспінівими збудженнями (що відповідають коливанням фононного типу ангармонічних підсистем в структурах YBaCuO) а також їх електронними переходами в межах єдиної та між підзонами.

ПЕМ дуже тісно пов'язана з моделлю Фалікова-Кімбала (ФК) [34], де за подібні фазові переходи (між станами з різними концентраціями частинок та з- або без- просторової модуляції) відповідає взаємодія між локалізованими та рухомими частинками (електронами). Спрощена ПЕМ відповідає ФК у випадку, коли немає тунельного розщеплення рівнів в ПЕМ та якщо локалізовані та рухомі частинки у моделі ФК мають різні хімічні потенціали (можна здійснити перехід до моделі Фалікова-Кімбала, поклавши $S_i^z = \tilde{n}_i - 1/2$ та $h = \tilde{\mu}$, де $\tilde{n}_i$ та $\tilde{\mu}$ - число заповнення та хімічний потенціал локалізованих ферміонів, відповідно).

У підході динамічного середнього поля (ДСП), де гамільтоніан з сильними кореляціями розглядається у границі безмежної вимірності простору ($d \rightarrow \infty$), має місце переформулювання задачі і перехід до розв'язання одновузлової задачі, описаної ефективним гамільтоніаном [35–37] (див. також огляд [38]). Тільки для найпростіших випадків, таких, як розрахунок спектру рухомих частинок в моделі Фалікова-Кімбала, можна отримати точні аналітичні розв'язки задачі. Точний аналітичний розв'язок існує для псевдоспін-електронної моделі у випадку відсутності поперечного поля [18]. Разом з тим, слід згадати про можливість застосування наближених аналітичних підходів, зокрема: Хаббард-I, Хаббард-III, наближення сплаву (НС), модифіковане наближення сплаву (МНС), тощо, див. [39, 40]. У роботі [18], при застосуванні методу ДСП до псевдоспін-електронної моделі у випадку $\Omega = 0$, було виявлено існування переходу типу метал-діелектрик, коли в електронному спектрі з'являється щілина при значенні константи взаємодії

$$g = g_c \equiv t_{(\vec{q}=0)}.$$

Варто відзначити, що ПЕМ також отримала застосування при описі провідності молекулярних та кристалічних систем з водневими зв'язками [41]. Крім того, модель є застосовною і до дослідження термодинаміки процесів, пов'язаних із іонною інтеркаляцією в шаруватих структурах (див. [42]), де в елементарній комірці існують дві різні позиції для імовірної інтеркаляції домішкового іона та є можливість перестрибувань між цими позиціями (наприклад, інтеркаляція іона Li^+ в матрицю TiO_2 , розглянута в [43]). Спеціальна версія ПЕМ для моделювання електронних властивостей та впливу електричного поля на границях $\text{CuO}_2/\text{SrTiO}_3$ в гетероструктурах *HTSC/STO* була запроваджена в [44].

Можна зробити, таким чином, наступні висновки. Різні дослідження термодинаміки та енергетичного спектру ПЕМ показали різноманітність фаз та фазових переходів в цій моделі. В залежності від термодинамічного режиму досліджень вони проявляються в (i) переходах між різними однорідними чи між однорідною та модульованою фазами зі співмірним або неспівмірним періодом модуляції (в режимі $\mu = \text{const}$) чи в (ii) переходами в область розділення фаз (режим $n = \text{const}$). Останні існують коли при $\mu = \text{const}$ відповідний фазовий перехід є першого роду. Такі фазові переходи можуть бути реалізовані при зміні температури T , поля h , хімічного потенціалу μ (у випадку (i)) та інших параметрів моделі. Фазові діаграми можна побудувати як у випадку слабого зв'язку ($g < W$) [22, 23] так і сильного ($g \gg W$) [16].

Мікроскопічне пояснення фазових переходів в стандартній ПЕМ (без прямої псевдоспін-псевдоспін взаємодії) пов'язане з непрямою ефективною взаємодією між псевдоспінами, що виникає через підсистему електронів та носить динамічний характер. Форма такої взаємодії залежить від концентрації електронів, температури та інших параметрів моделі. Зокрема, модульована фаза виникає при проміжних значеннях μ (це відповідає заселеності електронних рівнів, близькій до половинного заповнення) як для випадку слабого, так і для сильного зв'язку (проте механізми формування ефективної взаємодії для цих випадків є різними).

Двопідграткова ПЕМ є окремим випадком, близьким до реальних ВТНП си-

стем типу YBaCuO . Фазові переходи, що описані нею, пов'язані з появою сегнето-електричного стану чи з стрибкоподібною зміною взаємної орієнтації псевдоспінів в підгратках та можуть мати відношення до явища бістабільності чи розділення фаз.

Ще однією важливою властивістю ПЕМ є те, що при $\Omega \neq 0$ в моделі може виникати надпровідна фаза. Така фаза буде конкурувати з модульованою фазою і буде стабільною у випадку електронного заповнення, близького до верхнього (або нижнього) краю електронної зони.

З результатів, отриманих в методі ДСП для спрощеної ПЕМ (з $U = 0, \Omega = 0$) [18] видно, що спектр електронів буде відрізнятися для різних випадків ($g \gg W$) та ($g < W$): існуватиме щілина в спектрі, пов'язана зі взаємодією (навіть при $U = 0$), чи буде лише одна зона, відповідно. Подібний спектр також можна отримати в наближеннях, що базуються на схемі Хаббард-I (т. зв. УНХФ) в першому випадку, чи за допомогою методу Хартрі-Фока (в другому). Перше з них застосовне для т. зв. сильного зв'язку (у області $g \gg W$), а друге – для слабого зв'язку (коли $g < W$).

Найбільш детальне дослідження енергетичного спектру повної ПЕМ (з $U \neq 0, \Omega \neq 0$) у наближенні, що відповідає підходу Хаббард-I, було проведено в [14]. Кореляційне розщеплення, яке при цьому отримано, стосується великих значень константи взаємодії. Перебудова спектру електронів у широкому діапазоні значень параметрів моделі та ефект зникнення чи появи щілин під впливом таких факторів, як внутрішні псевдоспінові поля (поперечне Ω та повздовжнє h) залишалися поза увагою дослідників і не були достатнім чином вивчені. Однією з важливих задач, є у цьому зв'язку, дослідження умов існування переходу Мотта у електронному спектрі ПЕМ та впливу на такий перехід зміни зовнішніх чинників, які можуть модифікувати форму локальних потенціалів і тим самим параметрів моделі. Ця проблема вивчається у даній дисертації, для її розв'язання застосовано підхід ДСП.

1.2. Граткова модель інтеркаляції в кристалах

В загальному випадку в області фізики та хімії термін “інтеркаляція” означає наступне - *впровадження або розміщення “гостьових” компонентів у матрицю-“господар” з наявною чи здатною до формування в ній в ході процесу системою “гостьових” позицій, що володіє далеким порядком.* [45]. “Гостьовими” (для їх позначення використовується термін “інтеркалянт”) можуть виступати іони, атоми, молекули, гідрато (сольвато) - комплекси, що перебувають в довільному агрегатному стані.

Види відомих кристалічних ґраток, придатних до інтеркалювання, умовно розділяються на три групи за вимірністю [46]: лінійна (наприклад, $(\text{SN})_x$, поліацитилен); двовимірна (наприклад, TiS_2 , V_3O_8); тривимірна (наприклад, перовскіт (BaTiO_3 , ReO_3), рутил (TiO_2), гекса- і тригональний оксид вольфраму (WO_3)) [45]. За електронною структурою має місце розподіл на метали (наприклад Bi , Sb), напівпровідники (ZrS_2 , TlInSe_2 , ...) і діелектрики (TiO_2 , глинисті мінерали і т.п.) [45].

“Гостьові” компоненти (інтеркалянти) зручно розділити на три основні групи згідно характеру і величини електронної спорідненості (або енергетичної структури верхніх орбіталей) [45]:

- донори електронів, такими є *s*-елементи (Li , Na , K , Rb , Ca , Ba ; гідразин, аміак, і т.п.);
- акцептори електронів (*p*-елементи періодичної системи - F , Cl , Br , I ; SbCl_5 , AsF_6 , бензонітрил);
- проміжні, такими будуть *d*-елементи типу Cu , In , Co , Ni ; неорганічні сполуки AlCl_3 , InCl та органічні - антрацен і т.п.

Зважаючи на те, що даний поділ є досить умовним, важливо зазначити, що одна і та ж частинка-інтеркалянт (особливо якщо вона належить третій з вищеперерахованих груп) може виступати як донором, так і акцептором електронів в залежності від типу матеріалу “господаря”.

Властивість інтеркалянта займати чітко визначені місця в структурі “господаря” дає можливість формування впорядкованої чи неупорядкованої підсистеми для нього і отримання переходів “лад-безлад” як функції складу, температури або тиску. Спостерігати такі надгратки важче у випадку літєвих комплексів (наприклад $\text{Li} - \text{TiS}_2$), в той час коли для іонів срібла для того самого “господаря” впорядкування отримується суттєво легше.

Даумас та Херольд в 1969 році запропонували найбільш ґрунтовну, на даний момент, модель, яка пояснює інтеркалювання у шаруватих структурах, де зв’язок між ковалентно-зв’язаними атомними шарами має ван-дер Ваальсовий характер (напівпровідникові кристали GaSe , InSe і т.п.). В рамках моделі припускається, що впроваджений компонент може бути присутній в кожній ван-дер-ваальсовій області і має місце утворення кластерів для формування острівців або доменів внаслідок взаємодії притягування інтеркалянта всередину шару “господаря”. Домінуючою силою, що призводить до притягання всередині шару, буде енергія пружної напруги. Кулонівська взаємодія в даній моделі не є такою істотною за рахунок екранування Томаса-Фермі.

Важливою задачею теорії інтеркаляції є знаходження зв’язку між властивостями підсистем “господаря” та інтеркалянта та фазовими характеристиками їх співіснування. Вважається, що суттєвий вплив на такі характеристики мають сила зв’язку в системі інтеркалянт-інтеркалат, характер взаємодії між частинками інтеркалянта та фазовий стан матриці інтеркалата. Так, найчастіше, у випадку слабкої взаємодії атомів інтеркалянта між собою та з шарами кристалічної матриці і при їх високих ступенях вільності коливального руху спостерігається однорідний фазовий склад (наприклад Li_xTiS_2 ($0 < x < 1$) [47]; Cu_xTiS_2 ($0 < x < 0.7$) [48]; графіт в H_2SO_4 , HClO_4 , HBF_4 , H_2F_2 [49]. Збільшення концентрації впровадженого інтеркалянта часто призводить до переходу до двофазної системи (наприклад для $\text{Li}_x\text{Mo}_6\text{S}_8$ та $\text{Li}_x\text{Mo}_6\text{Se}_8$ в інтервалі $0 < x < 1$ [50]). Для таких областей концентрації інтеркалянта може бути успішно застосована модель ґраткового газу.

Фазові переходи в інтеркальованих системах відбуваються не тільки при зміні ступеня інтеркаляції (x), але, також, і при зміні тиску, температури і т.д.

Наприклад, встановлено (методом рентгенівської спектроскопії), що у випадку інтеркаляції атомів бром у графіті при різних температурах існують три різні структури: рідиноподібна ($T > 373K$), несумірна ($T > 350K$) і сумірна ($T < 350K$) [51]. Для опису такої ситуації було успішно застосовано модель однокомпонентної двовимірної рідини в анізотропному зовнішньому полі [52].

Слід зазначити, що після досягнення рівноважного стану система інтеркалянта може бути як нейтральною, так і зарядженою зі знаками плюс або мінус. А отже, “гостьові” частинки можуть виступати як донорами, так і акцепторами електронів. Крім того, одна і та ж частинка інтеркалянта в різних матеріалах може по різному проявляти здатність до обміну зарядами. Так, наприклад в [53] показано, що атоми літія з донорними властивостями будуть повністю іонізовані в графіті (C_6Li); в той час як для Li_xTiS_2 повна іонізація зберігається лише до $x = 0.8$, і при подальшому рості ступеня інтеркаляції залишає за собою деяку густину s -електронів [54–56]. Було показано ([46]), що у випадку металічних та напівметалічних фаз є характерною донорна передача електронів від інтеркалянта шарам матриці “господаря”, в той час, коли для напівпровідників і діелектриків ситуація стає набагато складнішою.

Як зазначено в [45], першою робочою моделлю зонної структури інтеркальованих сполук була модель “детермінованих зон” [57]. Згідно її положень, впроваджена частинка створює нові електронні стани в зонній структурі матриці і (ймовірно) зміщує енергію всіх зон в однаковій мірі, при цьому вважається що зонна структура “господаря” в інших відношеннях не змінюється. Припускають (див. [58]), що розщеплення рівнів довгоперіодичним модулюючим потенціалом частинок інтеркалянта та утворення при цьому мінізонного спектру відповідає цій моделі. Перше історичне підтвердження даної моделі було отримано в результаті вимірювання оптичного поглинання в матеріалах $H - NbSe_2$ до і після інтеркаляції циклопропіламіном [59].

Вважається, що лужні метали при інтеркаляції передаватимуть всі, або майже всі, зовнішні s -електрони до d -зон матеріалу матриці у дихалькогенідах перехідних металів. Так, наприклад, при інтеркалюванні натрієм MoS_2 переходить зі

початкового стану напівпровідника в добрий метал і оптичні спектри поглинання показують зникнення рівнів екситонів при збільшенні рівня інтеркаляції за рахунок екранування Томаса-Фермі вільними носіями заряду [47].

Модель “детермінованих зон” (зважаючи на свою простоту) не є універсальною в поясненні явища інтеркаляції. Вже в 1979 році [60] було виявлено сильний зсув краю міжзонного поглинання в інфрачервону область в сполуках M_xSrS_2 та M_xHfS_2 де ($M = Fe, Cu$) для значень $0 < x \leq 0.22$. Чим більшим є ступінь інтеркаляції - тим більшою є величина зсуву. Високе значення діелектричної проникності понижує енергію іонізації шарів і призводитиме до утворення вузьких зон в забороненій зоні. Підтвердження утворення таких глибоких рівнів в забороненій зоні (що узгоджується з термодинамічним ефектом самокомпенсації) було також отримано в роботах [61–63]

В моделі “детермінованих зон” ріст концентрації вільних носіїв пов’язують з передачею електронів від інтеркалянта до зони провідності чи їх захопленням впровадженими частинками із зони валентності. Крім того, для невироджених напівпровідників та діелектриків такий ріст можливий і за рахунок росту концентрації мілких донорних (акцепторних) рівнів. У металах або сильновироджених напівпровідниках (коли рівень Фермі є високо в зоні провідності) можливим є випадок, коли заповнення зони провідності відбувається повністю, енергія Фермі при цьому значно зростає і для концентрацій інтеркалянта, що відповідають повній заповненості, спостерігаємо перехід метал – напівпровідник, чи метал – діелектрик. Якщо ж зона заповнена частково - спостерігаємо посилення металічної поведінки процесів переносу.

Цікавою є властивість, яку проявляють лужні метали в дихалькогенідах перехідних металів. Вони передають більшість (або всі) s -електрони до d -зон провідності матриці, внаслідок чого металічний характер провідності посилюється. Так, наприклад, напівпровідник MoS_2 після інтеркаляції натрієм переходить в добрий метал, а у випадку його сполуки з калієм навіть отримується перехід у надпровідний стан при температурі $6.5\ K$ [64].

Модель “детермінованих зон” також передбачає відповідну поведінку пито-

мого опору і коефіцієнта Холла для Li_xTiS_2 і підтверджується (див. [65]) тим, що останній практично не залежить від температури і сполука інтеркалювання є провідником n -типу. Температурна залежність електроопору має металічний характер, як і TiS_2 і концентрація електронів, оцінена згідно значенню коеф. Холла, чітко слідує значенню x .

Цікавим з точки зору аналізу провідності є матеріал “господаря” графіт, оскільки він дозволяє відстежити вплив донорних і акцепторних інтеркалянтів. Так, при донорній інтеркаляції в π -зони графіту вводяться електрони, при акцепторній - дірки. Також, варто відмітити, що, в основному, цілочисельна передача заряду характерна для донорів, а дробова - для акцепторів. Це вказує на те, що в донорних сполуках буде утворюватись більше заряджених центрів, ніж в акцепторних і з цим можна пов'язати більшу (для акцепторів) електропровідність.

Теоретичний опис інтеркаляції іонів в кристали є актуальною задачею сучасної фізики. Оксиди металів як місця для впровадження іонів (наприклад іонів літію) є дуже багатообіцяючим матеріалом для електродів. Варто зазначити, що такий опис зводився до цього часу, в основному, до числових розрахунків *ab initio* та методу функціоналу густини. Наприклад квантово-хімічний метод Хартрі-Фока та метод функціоналу густини були застосовані в [66–68] для дослідження інтеркаляції літію в кристал TiO_2 . Було показано, що літій майже повністю іонізується внаслідок інтеркаляції (атом Li втрачає свій валентний електрон). При інтеркаляції літію в TiO_2 відбувається фазове розшарування на бідну ($\text{Li}_{\sim 0.01}\text{TiO}_2$) та багату ($\text{Li}_{\sim 0.5-0.6}\text{TiO}_2$) на літій фази. Така двофазова поведінка призводить до постійного значення електрохімічного потенціалу [43, 69] у широкому інтервалі значень концентрації інтеркалянта (це використовується при конструюванні батарей). В роботі [70] було проведено симуляцію методом Монте-Карло для дослідження інтеркаляції з використанням гамільтоніану, що включає тільки взаємодію між іонами.

Модельні розрахунки для інтеркаляції іонів в кристали беруть свій початок з роботи [5] де іонна підсистема розглядалась як ґратковий газ частинок, що підлягають статистиці Паулі. Серед інших робіт, присвячених інтеркаляції, до-

слідженої в рамках моделі ґраткового газу, варто відмітити [71–73]. Окремо слід згадати роботу [74], в якій було виконано вихід за рамки моделі ґраткового газу, зокрема було показано, що зміщення іонів господаря при інтеркаляції можуть призвести до ефективного притягання між іонами Li і появи плато на кривій розрядки.

Згодом, в низці робіт для опису інтеркаляції поширення отримала псевдоспін-електронна модель. Так, у роботі [75] ПЕМ з $S = 1$ було показано, що для дипольних інтеркальованих частинок можливою є різка зміна концентрації частинок при плавній (типу плато) зміні їх хімічного потенціалу. Так само, для ПЕМ у випадку цілого значення псевдоспіну отримано точний розв’язок моделі для основного стану та у наближенні середнього поля у випадку відмінних від нуля температур [42]. Розраховано фазові діаграми з розшаруванням на “бідну” та “багату” фази і виявлено області, де хімічний потенціал залишається сталим при значній зміні концентрації інтеркалянта.

Для ПЕМ з двома орбітальними станами на вузлі було досліджено термодинаміку моделі в наближенні середнього поля та проаналізовано можливість фазових переходів, пов’язаних зі зміною концентрації інтеркальованих іонів та значним зростанням електростатичної ємності системи [76]. У випадку, коли розглядалась інтеркаляція літієм анатазу TiO_2 [77], описано співіснування двох фаз з різною концентрацією інтеркалянта і різною симетрією кристалічної ґратки та наявність двох позицій (з їх знакозмінним заселенням внаслідок внутрішнього п’єзоефекту) для можливого впровадження Li в октаедри киснів; показано існування фазових переходів як першого, так і другого роду.

Дослідження, проведені в [43, 69], показало, що взаємодія інтеркальованих іонів Li з електронами провідності у матриці TiO_2 може приводити до стрибкоподібної зміни їх концентрації при певному значенні хімічного потенціалу. Це є свідченням фазового переходу 1-го роду і вказує на зміну характеру міжіонної взаємодії (електрони провідності можуть сприяти ефективному притяганням між домішковими іонами). Разом з тим, необхідним є більш ґрунтовне вивчення термодинаміки інтеркаляції у випадках донорних і акцепторних домішок, яке можна

провести в рамках підходу, що ґрунтується на ПЕМ. Важливо при цьому проаналізувати умови, за яких внаслідок взаємодії з електронами (чи дірками) провідності виникає "полиця" на залежності $\mu(n)$ для інтеркалянта, пов'язана із фаховим розшаруванням. Цікавою проблемою є також з'ясування ролі при цьому міжвузлової динаміки (перестрибувань) інтеркальованих іонів. Ці питання розглядаються в дисертації на основі ПЕМ, узагальненої відповідним чином.

1.3. Сильно скорельовані бозе- та фермі-атоми в оптичних ґратках. Модель Бозе-Фермі-Хаббарда

Фізика бачаточастинкових систем з сильними короткосяжними кореляціями є одним з важливих напрямків сучасних досліджень. Новим поштовхом для досліджень стало винайдення особливих властивостей надхолодних систем атомів в періодичному полі, утвореному інтерференцією когерентних лазерних променів. В утворених таким чином оптичних ґратках, у випадку бозе-атомів, відбувається перехід в стан з бозе-конденсатом при дуже низьких температурах ($T < 10^{-7} \dots 10^{-8} K$). Експериментально таке явище вперше було спостережено в 2002-2003 [1, 78] в системі атомів ^{87}Rb . Бозе-конденсація в такому випадку виникає внаслідок фазового переходу другого роду з так званої фази моттівського діелектрика (МД) в надплинну фазу (НП). Теоретичний опис явища базується на моделі Бозе-Хаббарда [79, 80], що бере до уваги два основних фактори, що означають термодинаміку та енергетичний спектр системи бозе-частинок – тунелювання t між сусідніми мінімумами потенціалів в ґратці та короткосяжну одновузлову відштовхувальну взаємодію U хаббардівського типу.

Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad (1.2)$$

де μ - хімічний потенціал. Конкуренція між цими двома факторами визначає рівноважний стан системи, а характерною ознакою даної моделі є існування двох фаз - надплинної та фази моттівського діелектрика. У випадку, коли домінуючою

є кінетична енергія ($t/U \gg 1$), основним станом системи є надплинна фаза (SF), в протилежному випадку - основним станом є моттівський діелектрик (MI). Дана модель розглядалась за допомогою різних теоретичних підходів: наближення середнього поля [81], наближення хаотичних фаз [82, 83], наближення сильного зв'язку [84] та квантовий метод Монте-Карло [85]. Також, було сформульовано бозонний варіант методу динамічного середнього поля [86]. В границі $U \rightarrow \infty$ гамільтоніан (1.2) зводиться до моделі жорстких бозонів.

Моделі типу ґраткового газу з статистикою частинок типу Паулі часто використовуються для опису іонних провідників та розрахунку їхньої провідності починаючи з робіт Махана [5] та інших [87, 88]. Одночастинковий спектр, зокрема, було розраховано для одновимірного випадку в роботі [88]. Як було вже згадано, модель Бозе-Хаббарда може бути прямо застосована до опису оптичних ґраток. Крім того, моделі такого типу можуть також бути корисними не тільки для дослідження іонної провідності, але і для опису інтеркаляції в кристалах (див. розділ 3) та кінетики іонної адсорбції на кристалічній поверхні [89].

У роботі [90] розглянуто випадок скінченного значення одновузлової взаємодії U та вивчено фазові переходи в моделі БХ при ненульових температурах (більшість попередніх робіт для моделі БХ були обмежені випадком $T = 0$). Особлива увага в [90] була присвячена дослідженню впливу температурної активації іонного переносу (коли параметр переносу залежить від температури) на форму фазових діаграм. Даний вплив може бути важливим для іонних провідників і раніше був досліджений тільки для границі жорстких бозонів [91].

У найпростіших випадках, бозе-конденсація у системі бозе-атомів, що знаходяться у оптичній ґратці, виникає в результаті фазового переходу 2-го роду з фази моттівського діелектрика (MI-фаза) до надплинної фази (SF-фази). У багатьох дослідженнях, що ґрунтуються на моделі Бозе-Хаббарда, було побудовано фазові діаграми, які визначають для $1D$, $2D$ та $3D$ ґраток різної структури та симетрії умови існування SF фази при $T = 0$ та при ненульових температурах [82, 83, 90, 92–95], та досліджено особливості одночастинкового спектру [96–98]. Розширення моделі шляхом включення міжвузлових взаємодій дало можливість

описати появу модульованих фаз, і зокрема, фази суперсолід [99, 100].

З другого боку, було встановлено, що при врахуванні в рамках моделі збуджених коливних станів (які можуть бути заселені шляхом помпування) бозе-частинок у квантових ямах чи додаткових (спінових) ступенів вільності у випадку бозе-атомів з $S \geq 1$ рід фазового переходу MI-SF може змінюватись при певних умовах з 2-го на 1-ий [101–103]. Ефект зумовлений конкуренцією між виграшем у енергії при появі бозе-конденсату, що формується частинками у збудженому стані, та енергією їх збудження.

Паралельно з надхолодними бозонними системами, бозон-ферміонні суміші в оптичних ґратках також активно розглядались останнім часом. Їхня експериментальна реалізація (суміші спін-поляризованих атомів $^{87}\text{Rb} - ^{40}\text{K}$ [104–106]) дозволяє побачити перехід МД-НП в присутності фермі-атомів. Важливим явищем, що спостерігалось, є загасання когерентності бозонів та розпад фракції НП фази при певних значеннях термодинамічних параметрів (хімічного потенціалу бозонів чи температури) внаслідок взаємодії з ферміонами. Це відображено в зміні умов існування НП та МД фаз та зміщення кривої НП-МД переходу на фазовій діаграмі. Можливими поясненнями цього явища розглядались перебудова тунельного розщеплення бозонів [104, 106, 107], вплив вищих бозонних рівнів [108, 109], міжвузлова взаємодія (включно з так званим кореляційним переносом [110]). Важливою якістю бозон-ферміонних сумішей є можливість існування нових квантових фаз, таких як фази з модуляцією густини частинок, суперсолід (СС) фази (з просторовою модуляцією як густини, так і параметру порядку бозе-конденсату), SF_f фази (з конденсатом ферміонних пар), та їх різних комбінацій [111]. Іншим важливим фактором для розгляду є формування так званих ферміонних композитів [112, 113], що є результатом спарювання ферміона з одним або більше бозонів (або однією або більше бозонних дірок) завдяки їхній ефективній взаємодії. Міжчастинкова взаємодія в такому випадку може змінюватись [114], використовуючи резонанс Фешбаха [115]. Ознакою цього є асиметрія між притяганням та відштовхуванням в поведінці бозон-ферміонних сумішей та на фазових діаграмах [2, 104].

Для опису бозон-ферміонних сумішей в оптичних ґратках використовується

модель Бозе-Фермі-Хаббарда, що була запропонована (разом з мікроскопічною трактовкою) в [2]. Її гамільтоніан є узагальненням оператора (1.2):

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} b_i^\dagger b_j - \sum_{ij} t'_{ij} f_i^\dagger f_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + U' \sum_i n_i^b n_i^f - \mu \sum_i b_i^\dagger b_i - \mu' \sum_i f_i^\dagger f_i, \quad (1.3)$$

тут є додаткові члени, що її описують; зокрема доданок з t' визначає амплітуду тунелювання ферміонів, доданок з U' - це бозон-ферміонна взаємодія. Останній доданок містить хімічний потенціал ферміонів. Згодом, в роботах [116, 117] були побудовані фазові діаграми при $T = 0$ (фазові діаграми основного стану) в наближенні середнього поля. Перенос іонів враховувався в рамках теорії збурень; також була врахована ефективна статична взаємодія між бозонами (у випадках $J_B = J_F = 0$; $J_B \neq 0, J_F = 0$; $J_B = J_F = J$, де J_B, J_F - параметри переносу іонів). Було знайдено області існування фаз з композитними ферміонами, що включають різні числа бозонів (або бозонних дірок). Аналіз було проведено в режимі фіксованої ферміонної густини.

В рамках подібного переходу при точному врахуванні бозон-ферміонної взаємодії були досліджені фазові переходи в VFH моделі з появою конденсату при $T \neq 0$ [90]. В обох випадках розгляд проводиться в рамках змішаного статистичного ансамблю - в режимі фіксованої конденсації феорміонів та заданого хімічного потенціалу бозонів.

Особливістю бозон-ферміонних сумішей є також поява, поруч із фазою CDW (з модуляцією густини частинок) та фазою суперсоліду SS з модуляцією параметра порядку конденсату (які відомі для чистих бозонних систем у оптичних ґратках), нових квантових фаз. Їх опис потребує виходу за межі наближення середнього поля і врахування динаміки перенесення бозонів і ферміонів. Тут, з одного боку, зонне переміщення ферміонів приводить до появи ефективної взаємодії $V_{BB}(w, \vec{q})$ між бозонами через ферміонне поле [118–120]. Залежно від значення хвильового вектора $\vec{q}$, при якому виникає нестабільність, це може бути причиною фазового розшарування або просторової модуляції і появи згаданих CDW чи SS

фаз [121].

У випадку половинного заповнення для ферміонів та при зростанні енергії їх відштовхування від бозонів SS-фаза переходить в фазу CDW [121]). Механізм появи фази SS досліджувався і деяких інших роботах (див. наприклад [111]).

З другого боку, при виродженні спінів можливим є зворотній ефект, коли відбувається спарювання ферміонів спричинене бозонами. Ця ситуація є аналогічною до формування куперівських пар в моделі БКШ, це було показано в низці робіт (див. [122–124]). Це спричиняє появу фази SF_f , де роль надплинної компоненти належить ферміонним парам, відповідні фазові діаграми побудовано в [111]. Бозе-конденсат підсилює спарювання ферміонів, в той час коли неконденсовані бозони дають вклад в появу CDW фази. При половинному заповненні для ферміонів спостерігаємо конкуренцію SF_f фази з антиферромагнітним впорядкуванням [125]. Інтегрування за ферміонними змінними також призводить до додаткової статичної взаємодії між бозонами U_{BB} , що сприяє переходу МД-НП або пригнічує його. У великій мірі це залежить від співвідношення мас бозе- та фермі-атомів (від співвідношення параметрів переносу t_F/t_B). Відповідні фазові діаграми отримані функціональним інтегруванням та підходом Гуцлівєра у випадку “легких” (суміш $^{87}\text{Rb} - ^{40}\text{K}$ атомів) та “важких” (суміш $^{23}\text{Na} - ^{40}\text{K}$ атомів) ферміонів показано в [119]. Також, було показано, що віртуальні переходи бозонів внаслідок впливу взаємодії U_{BF} на їхні збуджені стани в потенціальних ямах оптичної ґратки, призводять до розширення області МД фази при $T = 0$ (зсуву кривої фазових переходів на площині (t, μ) в напрямку більших значень співвідношення t/U). Подібну роль відіграє сповільнення в екрануванні ферміонами бозонів та “ефекті полярона” [126]. Воно проявляється в зменшенні параметру переносу бозонів t_B та їхньому сповільненні. Проте, для важких ферміонів область існування НП фази у випадку проміжних значень температури збільшується [120] (при подальшому зростанні T фаза SF зникає). Як було показано в [109, 116], “заморожені” ферміони здатні перешкоджати появі далекосяжних кореляцій надплинного типу і виникненню бозе конденсату. Існує, однак, критична концентрація ферміонів, нижче якої цей ефект відсутній ($\bar{n}_F^{crit} \sim 0.59$ для $d = 2$, $\bar{n}_F^{crit} \sim 0.31$ для

$d = 3$, див. [109]). У нашому випадку, говорячи про “важкі” ферміони, ми маємо скоріше на увазі гранично низькі значення параметра перенесення t_F . Міжчастинкові взаємодії, зокрема так звана “bond-charge” взаємодія, можуть мати значний вплив на перенос бозонів, як було показано в [110]. І це також може призводити до зміщення області переходу з МД в НП фазу.

Окремий напрямок в теоретичних дослідженнях бозонів та бозон-ферміонних сумішей в оптичних ґратках пов’язаний з використанням підходу жорстких бозонів, коли заповнення одновузлових станів підлягає принципу Паулі. Для атомів бозе на ґратці ця модель є граничним випадком моделі Бозе-Хаббарда при $U \rightarrow \infty$ і досить широко застосовується [5, 127–130]. Це наближення справедливо для області $0 \leq \bar{n}_B \leq 1$, але може бути використане для опису МД-НП переходу в множині точок $\mu_B = nU, n = 0, 1, 2, \dots$ при скінчених значеннях U (у випадку сильного переносу $t_B \ll U$) при $n \leq \bar{n}_B \leq n + 1$ для $T = 0$ в межах НП фази [82, 90]. В таких випадках, запропонована модель також прийнятна для опису відповідних фазових переходів при ненульовій температурі.

Для бозон-ферміонних сумішей модель БФХ в границі жорстких бозонів залишається ще не дуже детально вивченою. Можна виділити роботи [131, 132] де за допомогою псевдоспін-ферміонного підходу (що відповідає згаданій границі $U \rightarrow \infty$) було знайдено умови появи фаз SS та CDW при врахуванні ефективних міжчастикових взаємодій, що формуються ферміонною підсистемою. Як і в більшості згаданих вище публікацій, дослідження впливу ферміонів на бозе-конденсацію у сумішах та на появу модульованих фаз проводились за умови заданої концентрації фермі-частинок.

Разом з тим, представляє інтерес розвиток альтернативного підходу, у якому опис змішаної БФ-системи проводився б у рамках великого канонічного ансамблю (коли у ролі незалежних змінних виступають хімічні потенціали бозонів та ферміонів). Використання такої схеми може дати додаткову інформацію про картину фазових переходів у моделі БФХ, і є корисним, зокрема, при розгляді термодинаміки таких сумішей у гармонічних пастках. У цьому випадку, стан системи визначається значенням хімічних потенціалів частинок; вони змінюються

залежно від віддалі до центра пастки. Режим фіксованих хімічних потенціалів є і практично корисним; він полегшує аналіз фазових переходів у випадках, коли вони можуть бути 1-го роду. Саме про таку можливість йде мова у даній дисертації.

РОЗДІЛ 2

ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННОЇ МОДЕЛІ

2.1. Вступ

Даний розділ присвячений дослідженню електронного енергетичного спектру псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ), у якій електронна підсистема описується моделлю Хаббарда. Модель була вперше сформульована для опису високотемпературних надпровідників з локально ангармонічними елементами структури у кристалічній ґратці [3]; для опису останніх у моделі використовується псевдоспіновий формалізм. ПЕМ знайшла своє застосування і в інших задачах, де важливою є взаємодія квантових підсистем, що описуються різною статистикою. Прикладом, зокрема, є модельний опис термодинаміки інтеркаляції у кристалах. Можна також відзначити безпосередній зв'язок між ПЕМ і моделями, що використовуються в теорії фізичних явищ у бозон-ферміонних атомних сумішах в оптичних ґратках. Задачі, що при цьому виникають, є предметом вивчення у наступних розділах дисертації.

Наш розгляд у цьому розділі ми проводимо на основі наближення сплаву в рамках методу динамічного середнього поля (ДСП). Розглянуто випадок двох близьких електронних підзон хаббардівського типу, які визначають положення хімічного потенціалу при заданому наборі параметрів моделі. Ефективна одновузлова задача розв'язується за допомогою допоміжного ферміонного поля та з використанням процедури двочасового розщеплення функцій Гріна вищих порядків [40]. Досліджено умови виникнення енергетичної щілини в спектрі; розглянуто вплив локального поля асиметрії h та тунельного розщеплення рівнів на критичні

значення U_{crit} одновузлової хаббардівської взаємодії.

Завданням цього розділу є, також, дослідити перебудову електронного енергетичного спектру ПЕМ та описати ефект розщеплення зон при зміні поздовжнього та поперечного полів та константи псевдоспін-електронної взаємодії у випадку нескінченного хаббардівського відштовхування U електронів на вузлі ґратки. Виконані раніше дослідження цієї задачі в наближенні Хаббард-I [133] вказали на складну структуру спектру та наявність підзон.

В 2.2 розглядався електронний енергетичний спектр псевдоспін-електронної моделі для двох близьких взаємодіючих підзон. Недоліком такого наближення є, однак, те, що кореляційне розщеплення у спектрі зберігається при зміні параметрів моделі у широких межах. З метою виходу за його рамки ми, як і у випадку скінченних значень U , розраховуємо електронний енергетичний спектр моделі за допомогою методу динамічного середнього поля. Застосовано, разом з тим, іншу процедуру (2.3); вона базується на техніці мацубарівських функцій Гріна та на модифікації теореми Віка для операторів Хаббарда, яка, в дусі наближення сплаву, відповідає проектуванню на базис одновузлових станів, перетворений внаслідок врахування поперечного псевдоспінового поля. Досліджено вплив псевдоспін-електронної взаємодії, локального поля асиметрії та тунельного розщеплення рівнів на існування та кількість електронних підзон. Обговорено, також можливість застосування псевдоспін-електронної моделі до задачі про енергетичний спектр бозон-ферміонних сумішей на оптичних ґратках.

2.2. Електронний спектр псевдоспін-електронної моделі у наближенні сплаву в підході різночасових розщеплень.

2.2.1. Гамільтоніан моделі

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі у її традиційному формулюванні [3, 9, 11], для систем з локальним ангармонізмом кристалічної ґратки записують наступним чином:

$$H = \sum_i H_i + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}, \quad (2.1)$$

$$H_i = U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + E_0 (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) + g (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) S_i^z - \Omega S_i^x - h S_i^z, \quad (2.2)$$

де в одновузловому доданку гамільтоніана Ω - це тунельне розщеплення, g - константа псевдоспін-електронної взаємодії та h - поле асиметрії локального ангармонічного потенціалу; значення $S_i^z = \pm 1/2$ відповідають локалізації частинки в одному або іншому мінімумі такого потенціалу, а додатак $S_i^x = \frac{1}{2}(S_i^+ + S_i^-)$ описує тунельне перестрибування.

Другий доданок в 2.1 описує електронний перенос між вузлами ґратки, у яких розташовані ангармонічні потенціальні ями.

Одновузловий гамільтоніан розглядається як нульове наближення стосовно переносу електронів і таким чином зручно ввести наступний стандартний одновузловий базис $|R\rangle = |n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}, S_i^z\rangle$, з такими власними векторами [133]:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0, 0, \frac{1}{2}\rangle, & |2\rangle &= |1, 1, \frac{1}{2}\rangle, & |3\rangle &= |0, 1, \frac{1}{2}\rangle, & |4\rangle &= |1, 0, \frac{1}{2}\rangle, \\ |\tilde{1}\rangle &= |0, 0, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{2}\rangle &= |1, 1, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{3}\rangle &= |0, 1, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{4}\rangle &= |1, 0, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Якщо запровадити оператори Хаббарда на просторі вищезгаданих власних векторів, то оператори народження та знищення електронів та оператори псевдоспіна будуть записані наступним чином [133]:

$$\begin{aligned} c_{i,\uparrow} &= X_i^{14} + X_i^{\tilde{14}} + X_i^{32} + X_i^{\tilde{32}}, \\ c_{i,\downarrow} &= X_i^{13} + X_i^{\tilde{13}} - X_i^{42} - X_i^{\tilde{42}}, \\ S_i^z &= \frac{1}{2} \left(X_i^{11} - X_i^{\tilde{11}} + X_i^{22} - X_i^{\tilde{22}} + X_i^{33} - X_i^{\tilde{33}} + X_i^{44} - X_i^{\tilde{44}} \right), \\ S_i^x &= \frac{1}{2} \left(X_i^{1\tilde{1}} + X_i^{\tilde{1}1} + X_i^{2\tilde{2}} + X_i^{\tilde{2}2} + X_i^{3\tilde{3}} + X_i^{\tilde{3}3} + X_i^{4\tilde{4}} + X_i^{\tilde{4}4} \right). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Тоді одновузлова частина вихідного гамільтоніану H_i на мові операторів Хаббарда матиме вигляд:

$$\begin{aligned} H_i = & \left(E_0 + \frac{g}{2} - \frac{h}{2} \right) (X_i^{33} + X_i^{44}) + \left(E_0 - \frac{g}{2} + \frac{h}{2} \right) (X_i^{\tilde{3}\tilde{3}} + X_i^{\tilde{4}\tilde{4}}) \\ & + \frac{h}{2} (X_i^{\tilde{1}\tilde{1}} - X_i^{11}) + \left(U + 2E_0 + g - \frac{h}{2} \right) X_i^{22} + \left(U + 2E_0 - g + \frac{h}{2} \right) X_i^{\tilde{2}\tilde{2}} \\ & - \frac{\Omega}{2} (X_i^{1\tilde{1}} + X_i^{\tilde{1}1} + X_i^{2\tilde{2}} + X_i^{\tilde{2}2} + X_i^{3\tilde{3}} + X_i^{\tilde{3}3} + X_i^{4\tilde{4}} + X_i^{\tilde{4}4}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Цей гамільтоніан є діагональним за умови $\Omega = 0$, але у випадку ненульового тунельного розщеплення рівнів, щоб його здіагоналізувати, необхідно використувати перетворення [133]

$$\begin{pmatrix} R \\ \tilde{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi_r & \sin \phi_r \\ -\sin \phi_r & \cos \phi_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ \tilde{r} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

тут

$$\cos(2\phi_r) = \frac{n_r g - h}{\sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}}, \quad n_1 = 0, \quad n_3 = n_4 = 1, \quad n_2 = 2. \quad (2.7)$$

Таким способом ми отримуємо

$$H = \sum_{i,r} \varepsilon_r X_i^{rr} + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}. \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,\tilde{1}} &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{h^2 + \Omega^2}, \\ \varepsilon_{3,\tilde{3}} &= \varepsilon_{4,\tilde{4}} = E_0 \pm \frac{1}{2} \sqrt{(g - h)^2 + \Omega^2}, \\ \varepsilon_{2,\tilde{2}} &= 2E_0 + U \pm \frac{1}{2} \sqrt{(2g - h)^2 + \Omega^2}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Далі, використавши перетворення (2.7), отримаємо оператори народження та знищення електронів на мові операторів Хаббарда як:

$$c_{i,\sigma} = \sum_{m,n} A_{mn}^{\sigma} X_i^{nm}, \quad c_{i,\sigma}^{\dagger} = \sum_{m,n} A_{mn}^{\sigma} X_i^{mn}, \quad (2.10)$$

де $X_i^{mn} = |m\rangle\langle n|$ та:

$$\begin{aligned} A_{41}^{\uparrow} &= A_{41}^{\uparrow\sim} = \cos(\phi_4 - \phi_1), & A_{23}^{\uparrow} &= A_{23}^{\uparrow\sim} = \cos(\phi_2 - \phi_3), \\ A_{41}^{\uparrow\sim} &= -A_{41}^{\uparrow} = \sin(\phi_4 - \phi_1), & A_{23}^{\uparrow\sim} &= -A_{23}^{\uparrow} = \sin(\phi_2 - \phi_3), \\ A_{31}^{\uparrow} &= A_{31}^{\uparrow\sim} = \cos(\phi_3 - \phi_1), & A_{24}^{\uparrow} &= A_{24}^{\uparrow\sim} = -\cos(\phi_2 - \phi_4), \\ A_{31}^{\uparrow\sim} &= -A_{31}^{\uparrow} = \sin(\phi_3 - \phi_1), & A_{24}^{\uparrow\sim} &= -A_{24}^{\uparrow} = -\sin(\phi_2 - \phi_4). \end{aligned}$$

2.2.2. Рівняння руху для електронної функції Гріна

Нашою метою є розрахунок електронної функції Гріна ПЕМ та дослідження на цій основі електронного енергетичного спектру. Розгляд проведемо в рамках теорії динамічного середнього поля (див. додаток А). Тут основою є розв'язання ефективної одновузлової задачі. Переформулюємо її, використовуючи підхід, запропонований в [40]. Він ґрунтується на запровадженні ефективного гамільтоніана:

$$\tilde{H}_{\text{eff}} = H_0 + V \sum_{\sigma} (c_{\sigma}^{\dagger} \xi_{\sigma} + \xi_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma}) + H_{\xi}, \quad (2.11)$$

де H_0 - одновузлова частина вихідного гамільтоніана. Тут вводиться доданок, що відповідає за перенос електрона з даного вузла до ефективного оточення і навпаки. Гамільтоніан даного оточення H_{ξ} є невідомим, але функція Гріна

$$\Upsilon_{\sigma}(\omega) = \langle \langle \xi_{\sigma} | \xi_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}^{(H_{\xi})}, \quad (2.12)$$

для ферміонів оточення вважається заданою функцією, що визначається самоузгоджено. Оператори ξ_{σ} та $\xi_{\sigma}^{\dagger}$ описують т.зв. допоміжне фермі-поле.

Як було показано в [40], в цьому випадку мають місце співвідношення:

$$\left\langle \exp \left(-\beta \tilde{H}_{\text{eff}} \right) \right\rangle^{(H_\xi)} = \exp(-\beta H_{\text{eff}}), \quad (2.13)$$

та

$$2\pi V^2 \Upsilon_\sigma(\omega) = J_\sigma(\omega), \quad (2.14)$$

де $J_\sigma(\omega)$ - когерентний потенціал задачі у частотному представленні.

В нашому випадку ми маємо наступний ефективний гамільтоніан, який використовуємо для знаходження функції Гріна $G_\sigma^{(a)}(\omega)$ та отримання аналітичного виразу для функціонального співвідношення (A.10):

$$\tilde{H}_{\text{eff}} = \sum_r \varepsilon_r X^{rr} + V \left(c_\uparrow^\dagger \xi_\uparrow + \xi_\uparrow^\dagger c_\uparrow + c_\downarrow^\dagger \xi_\downarrow + \xi_\downarrow^\dagger c_\downarrow \right) + H_\xi. \quad (2.15)$$

Оператори $c_\uparrow, c_\downarrow$ записують тут на мові операторів Хаббарда згідно (2.10). Відповідно, одновузлова функція $G_\sigma^{(a)}(\omega)$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) є лінійною комбінацією функцій Гріна на X -операторах

$$\begin{aligned} G_\uparrow^{(a)}(\omega) \equiv \langle \langle c_\uparrow | c_\uparrow^\dagger \rangle \rangle &= \langle \langle (X^{14} + X^{\tilde{1}4}) \cos(\phi_4 - \phi_1) + (X^{1\tilde{4}} - X^{\tilde{1}4}) \sin(\phi_4 - \phi_1) \\ &+ (X^{32} + X^{\tilde{3}2}) \cos(\phi_2 - \phi_3) + (X^{3\tilde{2}} - X^{\tilde{3}2}) \sin(\phi_2 - \phi_3) | (X^{41} + X^{\tilde{4}1}) \cos(\phi_4 - \phi_1) \\ &+ (X^{4\tilde{1}} - X^{\tilde{4}1}) \sin(\phi_4 - \phi_1) + (X^{23} + X^{\tilde{2}3}) \cos(\phi_2 - \phi_3) \\ &+ (X^{2\tilde{3}} - X^{\tilde{2}3}) \sin(\phi_2 - \phi_3) \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} G_\downarrow^{(a)}(\omega) \equiv \langle \langle c_\downarrow | c_\downarrow^\dagger \rangle \rangle &= \langle \langle (X^{13} + X^{\tilde{1}3}) \cos(\phi_3 - \phi_1) + (X^{1\tilde{3}} - X^{\tilde{1}3}) \sin(\phi_3 - \phi_1) \\ &- (X^{42} + X^{\tilde{4}2}) \cos(\phi_2 - \phi_4) + (X^{4\tilde{2}} - X^{\tilde{4}2}) \sin(\phi_2 - \phi_4) | (X^{31} + X^{\tilde{3}1}) \cos(\phi_3 - \phi_1) \\ &+ (X^{3\tilde{1}} - X^{\tilde{3}1}) \sin(\phi_3 - \phi_1) - (X^{24} + X^{\tilde{2}4}) \cos(\phi_2 - \phi_4) \\ &+ (X^{2\tilde{4}} - X^{\tilde{2}4}) \sin(\phi_2 - \phi_4) \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Нашим завданням є розрахунок функцій Гріна типу $\langle\langle X^{mn}|X^{pq}\rangle\rangle_\omega$. Для їх знаходження записуються рівняння руху для операторів Хаббарда. Наприклад, для оператора X^{14}

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}X^{14}(t) &= [X^{14}, \tilde{H}_{\text{eff}}] = (\varepsilon_4 - \varepsilon_1)X^{14} + V \cos(\phi_4 - \phi_1)(X^{11} + X^{44})\xi_\uparrow \\ &+ V \sin(\phi_4 - \phi_1) \left(X^{\tilde{44}} + X^{\tilde{11}} \right) \xi_\uparrow + V X^{12}\xi_\downarrow^+ \cos(\phi_2 - \phi_4) + V X^{\tilde{12}}\xi_\downarrow^+ \sin(\phi_2 - \phi_4) \\ &+ V X^{34}\xi_\downarrow \cos(\phi_3 - \phi_1) + V X^{\tilde{34}}\xi_\downarrow \sin(\phi_3 - \phi_1). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Схожі комутатори отримуються для всіх інших операторів Хаббарда, що входять у вирази (2.16), (2.17). Як результат, наприклад, для $\langle\langle X^{14}|X^{41}\rangle\rangle_\omega$ отримуємо рівняння:

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_4 + \varepsilon_1) \langle\langle X^{14}|X^{41}\rangle\rangle &= \frac{1}{2\pi} \langle X^{11} + X^{44} \rangle + V \langle\langle (X^{11} + X^{44}) \cos(\phi_4 - \phi_1) \xi_\uparrow | X^{41} \rangle\rangle \\ &+ V \langle\langle \sin(\phi_4 - \phi_1) (X^{\tilde{44}} + X^{\tilde{11}}) \xi_\uparrow | X^{41} \rangle\rangle + V \langle\langle X^{12} \xi_\downarrow^+ \cos(\phi_2 - \phi_4) | X^{41} \rangle\rangle \\ &+ V \langle\langle X^{\tilde{12}} \xi_\downarrow^+ \sin(\phi_2 - \phi_4) | X^{41} \rangle\rangle + V \langle\langle X^{34} \xi_\downarrow \cos(\phi_3 - \phi_1) | X^{41} \rangle\rangle \\ &+ V \langle\langle X^{\tilde{34}} \xi_\downarrow \sin(\phi_3 - \phi_1) | X^{41} \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (2.19)$$

яке пов'язує її з функціями Гріна вищих порядків.

Наступним кроком є виділення незвідних частин для таких функцій Гріна, використовуючи підхід, описаний в [134, 135].

Похідні $i\frac{d}{dt}X^{pq}(t)$ виражаються як суми звідних (спроектованих на підпростір, сформований ферміонними операторами X^{pq}) та незвідних частин (таких, що описують непружне розсіяння квазічастинок). Таким чином, комутатори (2.18) записуються у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} [X^{14}, \tilde{H}_{\text{eff}}] &= (\varepsilon_4 - \varepsilon_1)X^{14} + \alpha_1^{14}X^{14} + \alpha_2^{14}X^{\tilde{14}} + \alpha_3^{14}X^{\tilde{14}} + \alpha_4^{14}X^{\tilde{14}} + \alpha_5^{14}X^{32} \\ &+ \alpha_6^{14}X^{\tilde{32}} + \alpha_7^{14}X^{\tilde{32}} + \alpha_8^{14}X^{32} + Z^{14}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Оператори Z^{pq} визначаються з умови ортогональності до операторів базового підпростору:

$$\langle \{Z^{pq}, X^{rs}\} \rangle = 0. \quad (2.21)$$

Ці рівняння визначають коефіцієнти α_i^{mn} ; для них ми отримуємо наступну систему рівнянь :

$$\hat{\mathbf{X}} \times \begin{pmatrix} \alpha_1^{14} \\ \alpha_2^{14} \\ \alpha_3^{14} \\ \alpha_4^{14} \end{pmatrix} = \mathbf{\Phi}_{14}, \quad (2.22)$$

$$\hat{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \langle X^{11} + X^{44} \rangle & 0 & \langle X^{44} \rangle & \langle X^{11} \rangle \\ 0 & \langle X^{11} + X^{44} \rangle & \langle X^{14} \rangle & \langle X^{44} \rangle \\ \langle X^{44} \rangle & \langle X^{11} \rangle & \langle X^{11} + X^{44} \rangle & 0 \\ \langle X^{11} \rangle & \langle X^{44} \rangle & 0 & \langle X^{44} + X^{11} \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

де $\mathbf{\Phi}_{14}$ - вектор, компонентами якого є лінійні комбінації добутків операторів Хаббарда та ξ -операторів.

$$\begin{aligned} \Phi_{14}^1 &= V \sin(\phi_4 - \phi_1) \langle \xi_{\uparrow} X^{41} - X^{41} \xi_{\uparrow} \rangle + V \langle X^{42} \xi_{\downarrow}^+ \cos(\phi_2 - \phi_4) \\ &\quad + X^{42} \xi_{\downarrow}^+ \sin(\phi_2 - \phi_4) \rangle + V \langle X^{31} \xi_{\downarrow} \cos(\phi_3 - \phi_1) + X^{31} \xi_{\downarrow} \sin(\phi_3 - \phi_1) \rangle, \\ \Phi_{14}^2 &= 0, \\ \Phi_{14}^3 &= V \langle X^{41} \xi_{\uparrow} \cos(\phi_4 - \phi_1) - X^{41} \xi_{\uparrow} \sin(\phi_4 - \phi_1) \rangle + V \langle X^{42} \xi_{\downarrow}^+ \cos(\phi_2 - \phi_4) \rangle \\ &\quad + V \langle X^{42} \xi_{\downarrow}^+ \sin(\phi_2 - \phi_4) \rangle, \\ \Phi_{14}^4 &= V \langle X^{41} \xi_{\uparrow} \cos(\phi_4 - \phi_1) + X^{41} \xi_{\uparrow} \sin(\phi_4 - \phi_1) \rangle + V \langle X^{31} \xi_{\downarrow} \cos(\phi_3 - \phi_1) \rangle \\ &\quad + V \langle X^{31} \xi_{\downarrow} \sin(\phi_3 - \phi_1) \rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Аналогічним чином визначаються коефіцієнти $\alpha_5^{14}, \alpha_6^{14}, \alpha_7^{14}, \alpha_8^{14}$.

В результаті, оператор Z^{14} записується як проекція на простір базових операторів:

$$\begin{aligned}
Z^{14} = & V \cos(\phi_4 - \phi_1) (X^{11} + X^{44}) \xi_{\uparrow} + V \sin(\phi_4 - \phi_1) (X^{\tilde{44}} + X^{1\tilde{1}}) \xi_{\uparrow} \\
& + V X^{12} \xi_{\downarrow}^+ \cos(\phi_2 - \phi_4) + V X^{1\tilde{2}} \xi_{\downarrow}^+ \sin(\phi_2 - \phi_4) \\
& + V X^{34} \xi_{\downarrow} \cos(\phi_3 - \phi_1) + V X^{\tilde{3}4} \xi_{\downarrow} \sin(\phi_3 - \phi_1) \\
& - \alpha_1^{14} X^{14} - \alpha_2^{14} X^{\tilde{14}} - \alpha_3^{14} X^{1\tilde{4}} - \alpha_4^{14} X^{\tilde{1}4} - \alpha_5^{14} X^{32} - \alpha_6^{14} X^{\tilde{3}2} \\
& - \alpha_7^{14} X^{\tilde{3}2} - \alpha_8^{14} X^{3\tilde{2}}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Аналогічно перетворюються рівняння руху для інших операторів Хаббарда $X^{\tilde{14}}, X^{1\tilde{4}} \dots X^{3\tilde{2}}$. Остаточного отримуємо:

$$\hat{\mathbf{B}} \begin{pmatrix} \langle\langle X^{14} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{\tilde{14}} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{1\tilde{4}} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{\tilde{1}4} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{32} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{\tilde{3}2} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{3\tilde{2}} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle X^{\tilde{3}2} | X^{41} \rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\langle X^{11} + X^{44} \rangle}{2\pi} + \langle\langle Z^{14} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{\tilde{14}} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{1\tilde{4}} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{\tilde{1}4} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{32} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{\tilde{3}2} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{3\tilde{2}} | X^{41} \rangle\rangle \\ \langle\langle Z^{\tilde{3}2} | X^{41} \rangle\rangle \end{pmatrix}, \tag{2.26}$$

де

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{41} - \alpha_1^{14} & \dots & -\alpha_1^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_2^{14} & \dots & -\alpha_2^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_3^{14} & \dots & -\alpha_3^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_4^{14} & \dots & -\alpha_4^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_5^{14} & \dots & -\alpha_5^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_6^{14} & \dots & -\alpha_6^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_7^{14} & \dots & -\alpha_7^{\tilde{3}2} \\ -\alpha_8^{14} & \dots & \omega - \varepsilon_{2\tilde{3}} - \alpha_8^{\tilde{3}2} \end{pmatrix}. \tag{2.27}$$

(тут $\varepsilon_{pq} = \varepsilon_p - \varepsilon_q$).

Для отримання рівнянь для функцій Гріна типу $\langle\langle Z^{mn} | X^{41} \rangle\rangle$ проводиться диференціювання за другим часовим аргументом; після процедури проектування типу (2.19) матимемо, наприклад:

$$\begin{aligned}
\langle\langle Z^{14}|X^{41}\rangle\rangle(\omega - \varepsilon_{41}) = & \langle\langle Z^{14}|X^{41}\rangle\rangle\alpha_1^{14} + \langle\langle Z^{14}|X^{\widetilde{41}}\rangle\rangle\alpha_2^{14} + \langle\langle Z^{14}|X^{\widetilde{14}}\rangle\rangle\alpha_3^{14} \\
& + \langle\langle Z^{14}|X^{\widetilde{14}}\rangle\rangle\alpha_4^{14} + \langle\langle Z^{14}|X^{23}\rangle\rangle\alpha_5^{14} + \langle\langle Z^{14}|X^{\widetilde{23}}\rangle\rangle\alpha_6^{14} + \langle\langle Z^{14}|X^{\widetilde{23}}\rangle\rangle\alpha_7^{14} \\
& + \langle\langle Z^{14}|X^{\widetilde{23}}\rangle\rangle\alpha_8^{14} + \langle\langle Z^{14}|Z^{41}\rangle\rangle, \tag{2.28}
\end{aligned}$$

Аналогічно отримуються рівняння для функцій Гріна зі всіма іншими операторами Хаббарда в правій частині функції. Остаточно, для матричної функції Гріна:

$$\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow} = 2\pi \begin{pmatrix} \langle\langle X^{14}|X^{41}\rangle\rangle & \dots & \langle\langle X^{14}|X^{\widetilde{23}}\rangle\rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle\langle X^{\widetilde{32}}|X^{41}\rangle\rangle & \dots & \langle\langle X^{\widetilde{32}}|X^{\widetilde{23}}\rangle\rangle \end{pmatrix}, \tag{2.29}$$

записується наступне рівняння:

$$\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow} = \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0 + \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0 \hat{\mathbf{P}}_{\uparrow} \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0. \tag{2.30}$$

Тут $\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0$ - незбурена функція Гріна:

$$\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0 = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \hat{\mathbf{I}}_{\uparrow}, \tag{2.31}$$

$$\hat{\mathbf{I}}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} A_{14}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{\widetilde{14}}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{\widetilde{14}}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{\widetilde{14}}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{32}^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{\widetilde{32}}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{\widetilde{32}}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{\widetilde{32}}^{-1} \end{pmatrix}, \tag{2.32}$$

де $A_{pq} = \langle X^{pp} + X^{qq} \rangle$.

Матриця

$$\hat{\mathbf{P}}_{\uparrow} = 2\pi\hat{\mathbf{I}}_{\uparrow} \begin{pmatrix} \langle\langle Z^{14}|Z^{41}\rangle\rangle & \dots & \langle\langle Z^{14}|Z^{23}\rangle\rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle\langle Z^{\tilde{3}2}|Z^{41}\rangle\rangle & \dots & \langle\langle Z^{\tilde{3}2}|Z^{23}\rangle\rangle \end{pmatrix} \hat{\mathbf{I}}_{\uparrow}, \quad (2.33)$$

має зміст матриці розсіяння. Будучи вираженою через незвідні функції Гріна, вона містить поправки другого та вищих порядків V . Виділення в $\hat{P}_{\uparrow}$ незвідних частин дозволяє отримати масовий оператор $\hat{M}_{\uparrow}$ [40]

$$\hat{\mathbf{P}}_{\uparrow} = \hat{\mathbf{M}}_{\uparrow} + \hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0\hat{\mathbf{M}}_{\uparrow} + \hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0\hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0\hat{\mathbf{M}}_{\uparrow} + \dots, \quad \hat{\mathbf{M}}_{\uparrow} = \hat{\mathbf{P}}_{\uparrow}|_{\text{ir}}. \quad (2.34)$$

У цьому випадку рівняння (2.30) трансформується в рівняння типу Дайсона:

$$\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow} = \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0 + \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0\hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}; \quad (2.35)$$

з розв'язком

$$\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow} = \left(1 - \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0\hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}\right)^{-1} \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0. \quad (2.36)$$

2.2.3. Різночасові розщеплення незвідних функцій Гріна

Для розрахунку функцій Гріна, що входять у вирази для елементів матриці $\hat{\mathbf{P}}_{\uparrow}$, використовується метод різночасових розщеплень [136]. Ця процедура в нашому випадку означає незалежне усереднення добутоків операторів Хаббарда та ξ -операторів. Як було показано, для функції Z^{14} отримано вираз (2.25), що можна записати як:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V}Z^{14} &= \cos(\phi_4 - \phi_1)(\widetilde{X^{11} + X^{44}})\xi_{\uparrow} + \widetilde{X^{12}\xi_{\downarrow}^+} \cos(\phi_2 - \phi_4) \\ &+ \sin(\phi_4 - \phi_1)(\widetilde{X^{\tilde{4}4} + X^{1\tilde{1}}})\xi_{\uparrow} + \widetilde{X^{1\tilde{2}}\xi_{\downarrow}^+} \sin(\phi_2 - \phi_4) \end{aligned}$$

$$+\widetilde{X^{34}\xi_{\downarrow}}\cos(\phi_3-\phi_1)+\widetilde{X^{34}\xi_{\downarrow}}\sin(\phi_3-\phi_1), \quad (2.37)$$

де, для отримання явних виразів для операторів $(X^{pq}+\widetilde{X^{rs}})\xi_{\sigma}$ та $\widetilde{X^{rs}\xi_{\sigma}}$ треба розв'язати рівняння (2.22) для коефіцієнтів α_k^{pq} .

Розглянемо окремо частини функції $\langle\langle Z^{14}|Z^{41}\rangle\rangle$.

1. Функція Гріна $\langle\langle(\widetilde{X^{11}+X^{44}})\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^+(\widetilde{X^{11}+X^{44}})\rangle\rangle_{\omega}\equiv I_1(\omega)$, згідно спектральної теореми

$$I_1(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega'}\left(e^{\beta\omega'}+1\right)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{-i\omega't}\left\langle\xi_{\uparrow}^+(t)(X^{11}+X^{44})_t(X^{11}+X^{44})\xi_{\uparrow}\right\rangle^{\text{ir}}.$$

Проводячи різночасове розщеплення та розраховуючи середні у цих кореляторах в нульовому наближенні:

$$\begin{aligned}\langle\xi_{\uparrow}^+(t)(X^{11}+X^{44})_t(X^{11}+X^{44})\xi_{\uparrow}\rangle^{\text{ir}} &\approx \langle(X^{11}+X^{44})_t(X^{11}+X^{44})\rangle\langle\xi_{\uparrow}^+(t)\xi_{\uparrow}\rangle, \\ \langle(X^{11}+X^{44})_t(X^{11}+X^{44})\rangle &\approx \langle(X^{11}+X^{44})^2\rangle=A_{14},\end{aligned} \quad (2.38)$$

як кінцевий результат отримаємо

$$I_1(\omega)=A_{14}\left\langle\left\langle\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^+\right\rangle\right\rangle. \quad (2.39)$$

2. Функція Гріна $\langle\langle(\widetilde{X^{1\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}})\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^+(\widetilde{X^{1\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}})\rangle\rangle_{\omega}\equiv I_2(\omega)$: Тут

$$\begin{aligned}\left\langle\xi_{\uparrow}^+(t)\left(X^{\tilde{1}\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}\right)_t\left(X^{1\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}\right)\xi_{\uparrow}\right\rangle^{\text{ir}} &\approx \left\langle\left(X^{\tilde{1}\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}\right)_t\left(X^{1\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}\right)\right\rangle\left\langle\xi_{\uparrow}^+(t)\xi_{\uparrow}\right\rangle, \\ \left\langle\left(X^{\tilde{1}\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}\right)_t\left(X^{1\tilde{1}}+X^{4\tilde{4}}\right)\right\rangle &=\left\langle X_t^{\tilde{1}\tilde{1}}X_t^{1\tilde{1}}+X_t^{4\tilde{4}}X_t^{4\tilde{4}}\right\rangle \\ &=\exp[i(\varepsilon_{\tilde{1}}-\varepsilon_1)t]\left\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}}\right\rangle+\exp[i(\varepsilon_4-\varepsilon_{\tilde{4}})t]\left\langle X^{4\tilde{4}}\right\rangle.\end{aligned} \quad (2.40)$$

З використанням такого наближення матимемо

$$I_2(\omega)=\frac{1}{2}\left\langle X^{4\tilde{4}}+X^{\tilde{4}\tilde{4}}\right\rangle\left\langle\left\langle\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^+\right\rangle\right\rangle_{\omega-\varepsilon_4+\varepsilon_{\tilde{4}}}+\frac{1}{2}\left\langle X^{1\tilde{1}}+X^{\tilde{1}\tilde{1}}\right\rangle\left\langle\left\langle\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^+\right\rangle\right\rangle_{\omega-\varepsilon_{\tilde{1}}+\varepsilon_1}$$

$$+\frac{1}{2\pi}\langle X^{\widetilde{44}}-X^{44}\rangle\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{th}\frac{\beta\omega'}{2}\left[-2\text{Im}\left\langle\left\langle\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^{+}\right\rangle\right\rangle_{\omega'+i\delta}\right]d\omega'}{\omega-\omega'-\varepsilon_4+\varepsilon_4}\quad(2.41)$$

$$+\frac{1}{2\pi}\langle X^{11}-X^{\widetilde{11}}\rangle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{th}\frac{\beta\omega'}{2}\left[-2\text{Im}\left\langle\left\langle\xi_{\uparrow}|\xi_{\uparrow}^{+}\right\rangle\right\rangle_{\omega'+i\delta}\right]d\omega'}{\omega-\omega'-\varepsilon_1+\varepsilon_1}.\quad(2.42)$$

Аналогічним чином розраховуються функції Гріна $\langle\langle\widetilde{X^{12}\xi_{\downarrow}^{+}}|\widetilde{\xi_{\downarrow}X^{21}}\rangle\rangle$, $\langle\langle\widetilde{X^{34}\xi_{\downarrow}^{+}}|\widetilde{\xi_{\downarrow}X^{43}}\rangle\rangle$, і тд. (див. додаток Б).

2.2.4. Близькі підзони у наближенні сплаву

В даному підході за розсіяння відповідає тільки когерентний потенціал. Це призводить до нехтування середніх $\langle X^{mn}\xi_{\sigma}\rangle$ [39, 40] та до нехтування доданків $R_{(1,2)\uparrow}^{pq}(\omega)$ у виразах для незвідних функцій Гріна. Таким чином, матриця незвідних одновузлових функцій Гріна є у наближенні типу сплаву діагональною:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0 &= \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0(14\dots 4\widetilde{1}) & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0(32\dots 2\widetilde{3}) \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0(14\dots 4\widetilde{1}) &= \begin{pmatrix} \frac{A_{14}}{\omega-\varepsilon_{41}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A_{\widetilde{14}}}{\omega-\varepsilon_{\widetilde{41}}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A_{1\widetilde{4}}}{\omega-\varepsilon_{41}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A_{\widetilde{1}\widetilde{4}}}{\omega-\varepsilon_{\widetilde{41}}} \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^0(32\dots 2\widetilde{3}) &= \begin{pmatrix} \frac{A_{32}}{\omega-\varepsilon_{23}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A_{\widetilde{32}}}{\omega-\varepsilon_{\widetilde{23}}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A_{3\widetilde{2}}}{\omega-\varepsilon_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A_{\widetilde{3}\widetilde{2}}}{\omega-\varepsilon_{\widetilde{23}}} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad(2.43)$$

Матриця масового оператора в такому випадку має вигляд

$$\hat{\mathbf{M}}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}(14\dots 4\widetilde{1}) & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{M}}_{\uparrow}(32\dots 2\widetilde{3}) \end{pmatrix},\quad(2.44)$$

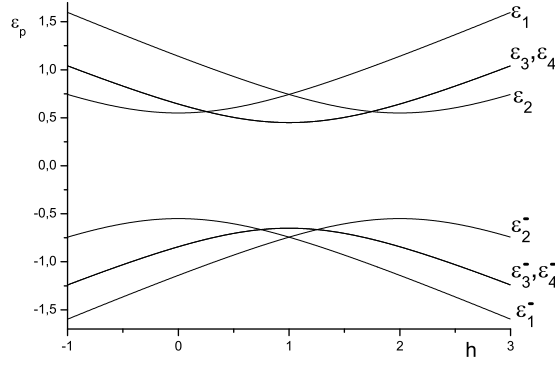


Рис. 2.1. Одновузлові енергетичні електронні рівні ε_p як функції h при $\Omega = 1.1$, $n = 1.0$, $g = 1.0$, $U = 0.2$.

$$\hat{M}_{\uparrow}(14 \dots 4\tilde{1}) = J_{\uparrow}(\omega) \begin{pmatrix} \frac{\cos^2 \phi_{41}}{A_{14}} & 0 & \frac{\sin 2\phi_{41} \langle X^{11} \rangle}{2A_{14}A_{1\tilde{4}}} & \frac{-\sin 2\phi_{41} \langle X^{44} \rangle}{2A_{14}A_{1\tilde{4}}} \\ 0 & \frac{\cos^2 \phi_{41}}{A_{1\tilde{4}}} & \frac{\sin 2\phi_{41} \langle X^{44} \rangle}{2A_{1\tilde{4}}A_{1\tilde{4}}} & \frac{-\sin 2\phi_{41} \langle X^{11} \rangle}{2A_{1\tilde{4}}A_{1\tilde{4}}} \\ \frac{\sin 2\phi_{41} \langle X^{11} \rangle}{2A_{1\tilde{4}}A_{14}} & \frac{\sin 2\phi_{41} \langle X^{44} \rangle}{2A_{1\tilde{4}}A_{1\tilde{4}}} & \frac{\sin^2 \phi_{41}}{A_{1\tilde{4}}} & 0 \\ \frac{-\sin 2\phi_{41} \langle X^{44} \rangle}{2A_{14}A_{1\tilde{4}}} & \frac{-\sin 2\phi_{41} \langle X^{11} \rangle}{2A_{1\tilde{4}}A_{1\tilde{4}}} & 0 & \frac{\sin^2 \phi_{41}}{A_{14}} \end{pmatrix},$$

$$\hat{M}_{\uparrow}(32 \dots 2\tilde{3}) = J_{\uparrow}(\omega) \begin{pmatrix} \frac{\cos^2 \phi_{32}}{A_{32}} & 0 & \frac{\sin 2\phi_{23} \langle X^{33} \rangle}{2A_{32}A_{3\tilde{2}}} & \frac{-\sin 2\phi_{23} \langle X^{22} \rangle}{2A_{32}A_{3\tilde{2}}} \\ 0 & \frac{\cos^2 \phi_{32}}{A_{3\tilde{2}}} & \frac{\sin 2\phi_{23} \langle X^{22} \rangle}{2A_{3\tilde{2}}A_{3\tilde{2}}} & \frac{-\sin 2\phi_{23} \langle X^{33} \rangle}{2A_{3\tilde{2}}A_{3\tilde{2}}} \\ \frac{\sin 2\phi_{23} \langle X^{33} \rangle}{2A_{3\tilde{2}}A_{32}} & \frac{\sin 2\phi_{23} \langle X^{22} \rangle}{2A_{3\tilde{2}}A_{3\tilde{2}}} & \frac{\sin^2 \phi_{32}}{A_{3\tilde{2}}} & 0 \\ \frac{-\sin 2\phi_{23} \langle X^{22} \rangle}{2A_{32}A_{3\tilde{2}}} & \frac{-\sin 2\phi_{23} \langle X^{33} \rangle}{2A_{3\tilde{2}}A_{3\tilde{2}}} & 0 & \frac{\sin^2 \phi_{23}}{A_{32}} \end{pmatrix}.$$

Відповідно, матриця функції Гріна, як і матриця масового оператора, складаються з двох незалежних блоків:

$$\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}(14 \dots 4\tilde{1}) & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}(32 \dots 2\tilde{3}) \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Використовуючи рівняння (2.35) та (2.44) отримуємо елементи матриць $\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}(14 \dots 4\tilde{1})$ та $\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}(32 \dots 2\tilde{3})$. Підставляючи їх у співвідношення (2.16), отримуємо кінцевий вираз для одновузлової функції Гріна $\hat{\mathbf{G}}_{\uparrow}^{(a)}(\omega)$. В загальному цей вираз дуже громіздкий. Внески від індивідуальних електронних переходів з енергіями ε_{pq} між вихідними одновузловими рівнями $|p\rangle$ та $|q\rangle$ залежать від їхнього положення в спектрі. Ці рівні чутливі до значень параметрів h, Ω та U і крім

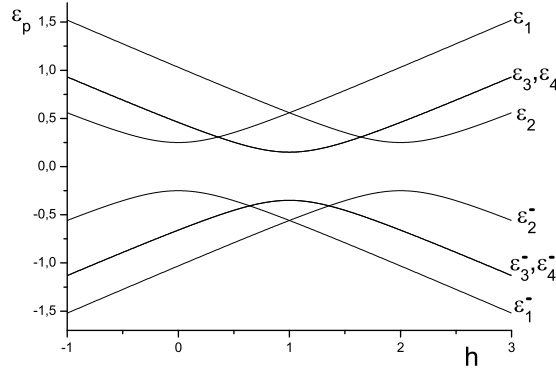


Рис. 2.2. Одновузлові енергетичні електронні рівні ε_p як функції h при $\Omega = 0.5$, $n = 1.0$, $g = 1.0$, $U = 0.2$.

того визначаються середніми $A_{pq} = \langle X^{pp} + X^{qq} \rangle$, де у нульовому наближенні $\langle X^{pp} \rangle \sim \exp(-\beta\varepsilon_p)$ (що означає, що для низьких температур можуть враховуватись тільки рівні з найнижчими енергіями). Залежності одновузлових електронних енергетичних рівнів від поля асиметрії h при різних значеннях тунельного розщеплення Ω вказано на рис. 2.1 та 2.2. У цьому випадку тільки рівні $\varepsilon_1 \dots \varepsilon_4$ з від'ємним значенням проекції псевдоспіна є важливими. Енергії електронних переходів між рівнями з рисунку 2.2 вказані на рис. 2.3. При заданих значеннях поля h деякі пари електронних переходів стають близькими за значенням енергії, а отже виникають близькі підзони у спектрі ферміонів. При $h \sim 0$ такою парою є переходи $\widetilde{23}$ та $\widetilde{41}$; хімічний потенціал електронів для таких переходів знаходиться в цій області для концентрацій близьких до половинного заповнення $n \sim 1$ [14]. В цьому випадку дуже важливим є параметр $\Delta = \varepsilon_{\widetilde{23}} - \varepsilon_{\widetilde{41}}$, що має зміст енергії ефективної взаємодії електронів на вузлі (енергії появи пари “надлишковий електрон”-“дірка”) при наявності взаємодії з псевдоспіном [137]. При $\Delta < 0$ енергії переходів змінюють їхнє відносне положення, що відповідає ефективному притяганню. На рис. 2.4 показано діаграму, де такі області зображено на площині (Ω, U) при різних значеннях h . Підзони $(\widetilde{14})$ та $(\widetilde{32})$ є близькими та можуть накладатись при $\Delta \lesssim W$, де W це напівширина вихідної електронної зони ($W < g, U$). Такий випадок з накладанням і розглядається нами далі.

Функція Гріна $G_{\uparrow}^{(a)}(\omega)$ для випадку, коли накладаються підзони $(\widetilde{14})$ та $(\widetilde{32})$,

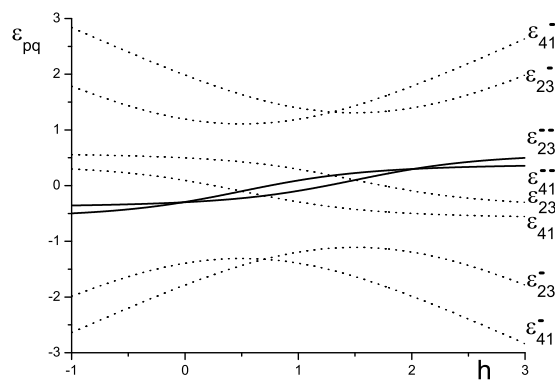


Рис. 2.3. Енергії одновузлових електронних переходів $\varepsilon_{pq} = \varepsilon_p - \varepsilon_q$ як функція h .
 $n = 1.0$, $g = 1.0$, $U = 0.2$, $\Omega = 0.5$.

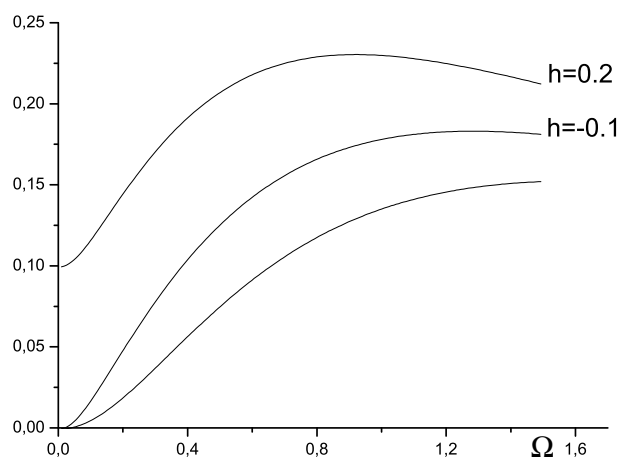


Рис. 2.4. Діаграма $\Delta = 0$. В області нижче кривої параметр Δ від'ємний.

записується наступним чином:

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}^{(a)}(\omega) &= \left\langle \left\langle X^{\widetilde{14}} | X^{\widetilde{41}} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle X^{\widetilde{32}} | X^{\widetilde{23}} \right\rangle \right\rangle \\ &= \frac{\left\langle X^{\widetilde{11}} + X^{\widetilde{44}} \right\rangle \cos^2 \phi_{41}}{\omega - \varepsilon_{\widetilde{41}} - J_{\uparrow} \cos^2(\phi_4 - \phi_1)} + \frac{\left\langle X^{\widetilde{33}} + X^{\widetilde{22}} \right\rangle \cos^2 \phi_{32}}{\omega - \varepsilon_{\widetilde{23}} - J_{\uparrow} \cos^2(\phi_3 - \phi_2)}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Це частковий випадок рівняння (A.10) для двох близьких підзон в наближенні сплаву. Отже, використовуючи властивість локальності функції $\Xi_{\sigma}(\omega)$ та рівняння (A.8) та (A.9), ми отримуємо наступний функціональний зв'язок функції Гріна $G_{\uparrow}^{(a)}(\omega)$ та когерентного потенціалу $J_{\uparrow}(\omega)$:

$$G_{\uparrow}^{(a)}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{G_{\uparrow}^{(a)}(\omega) + J_{\uparrow}(\omega) - t_k} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\rho_0(t)}{G_{\uparrow}^{(a)}(\omega) + J_{\uparrow}(\omega) - t_k}. \quad (2.47)$$

Визначаючи звідси функцію Гріна $G_{\uparrow}(\omega)$, для ґратки Бете з напівеліптичною густиною станів $\rho_0(t) = \frac{2}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - t^2}$, отримуємо, $G_{\uparrow}(\omega) = \frac{4}{W^2} J_{\uparrow}(\omega)$ [133]. Відповідно, з (2.44) випливає рівняння для когерентного потенціалу

$$J_{\uparrow} = \frac{W^2}{4} \left[\frac{\left\langle X^{\widetilde{11}} + X^{\widetilde{44}} \right\rangle \cos^2 \phi_{41}}{\omega - \varepsilon_{\widetilde{41}} - J_{\uparrow} \cos^2 \phi_{41}} + \frac{\left\langle X^{\widetilde{33}} + X^{\widetilde{22}} \right\rangle \cos^2 \phi_{32}}{\omega - \varepsilon_{\widetilde{23}} - J_{\uparrow} \cos^2 \phi_{32}} \right]. \quad (2.48)$$

Також врахуємо, що для цього випадку:

$$\left\langle X^{\widetilde{11}} + X^{\widetilde{44}} \right\rangle \cong 1 - \frac{n}{2}, \quad \left\langle X^{\widetilde{33}} + X^{\widetilde{22}} \right\rangle \cong \frac{n}{2}, \quad (2.49)$$

і рівняння для знаходження хімічного потенціалу має вигляд:

$$\left\langle X^{\widetilde{44}} \right\rangle = \left\langle X^{\widetilde{33}} \right\rangle, \quad (2.50)$$

де середні від операторів Хаббарда розраховуються, використовуючи спектральну теорему для відповідних компонент функцій Гріна (2.45). Такими чином, шляхом розв'язування рівнянь (2.48) та (2.50) знаходиться хімічний потенціал та визначаються краї підзон як функції середньої концентрації електронів.

Залежність хімічного потенціалу від n показано в границі $T \rightarrow 0, (\beta \rightarrow \infty)$ на рис. 2.5; розглянуто випадок, коли дві близькі підзони $\widetilde{14}$ та $\widetilde{32}$ не накладаються. Можливість існування двох розділених підзон чи об'єднання їх в одну (коли щілина в спектрі зникає) залежить від значень параметрів моделі. На рисунку 2.6 показано обидва випадки. Існує критичне значення параметра взаємодії на вузлі U_{eff} , при якому густина станів $\rho(\omega)$ змінює свою топологію (щілина існує при $U > U_{\text{eff}}$). Залежності U_{eff} від поля асиметрії та тунельного розщеплення рівнів показано на рис. 2.7 та 2.8 відповідно.

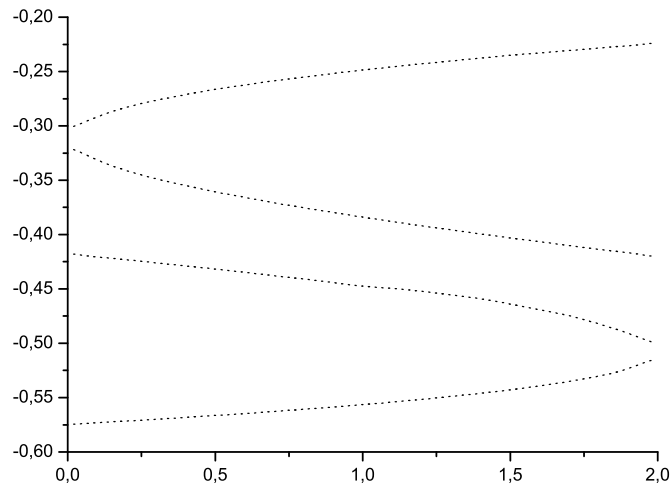
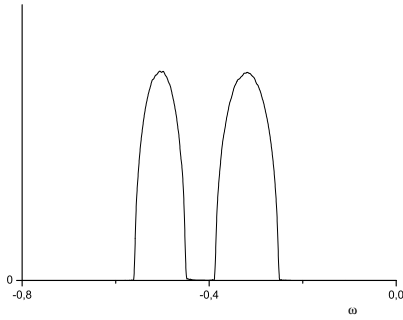
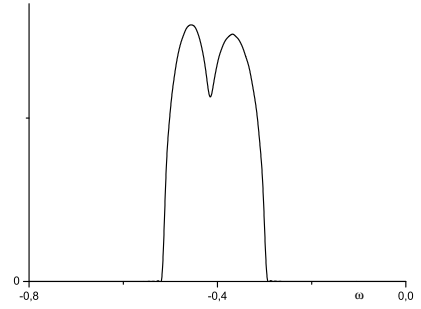


Рис. 2.5. Залежність хімічного потенціалу та країв підзон $\widetilde{14}$ та $\widetilde{32}$ від n при нульовій температурі. Підзона $\widetilde{14}$ є нижньою. $g = 1.0$, $W = 0.1$, $U = 0.3$, $\Omega = 0.5$, $h = -0.1$.

Розраховане критичне значення параметру тунельного розщеплення як функція поля асиметрії h при різних значеннях U подано на рис. 2.9. Щілина в спектрі виникає, коли Ω є меншим за певне критичне значення.



(a)



(b)

Рис. 2.6. Густина станів $\rho(\omega)$ при різних значеннях параметру взаємодії на вузлі U . $U = 0.3$: дві розділені підзони, $U = 0.2$: одна спільна підзона. $\Omega = 0.5$, $h = -0.1$, $n = 1.0$.

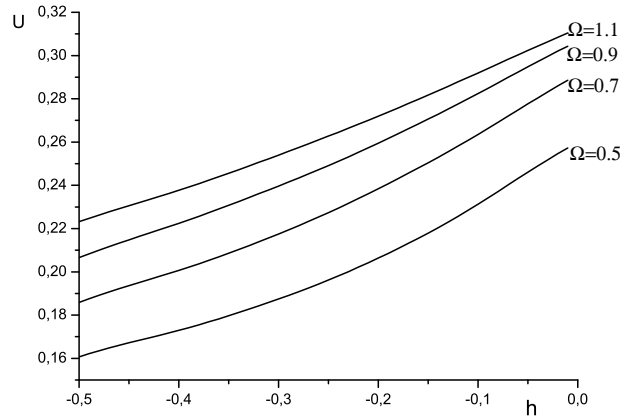


Рис. 2.7. Залежність критичного значення кулонівського потенціалу U_{eff} від поля h при різних значеннях тунельного розщеплення Ω ; $n = 1.0$, $g = 1.0$, $W = 0.1$.

2.3. Електронний спектр псевдоспін-електронної моделі у границі $U \rightarrow \infty$

2.3.1. Гамільтоніан моделі на редукованому базисі

У даному параграфі ми проведемо більш повний аналіз структури електронного спектру ПЕМ, звертаючи основну увагу на перебудову його енергетичних зон при зміні параметрів, що характеризують локальний ангармонізм ґратки. На відміну від попереднього дослідження, обмежимося граничним випадком $U \rightarrow \infty$ (коли виключаються стани $|2\rangle$ та $|\tilde{2}\rangle$ з подвійним заповненням електронних рівнів). Проводячи розгляд в рамках методу ДСП і наближення сплаву, застосуємо

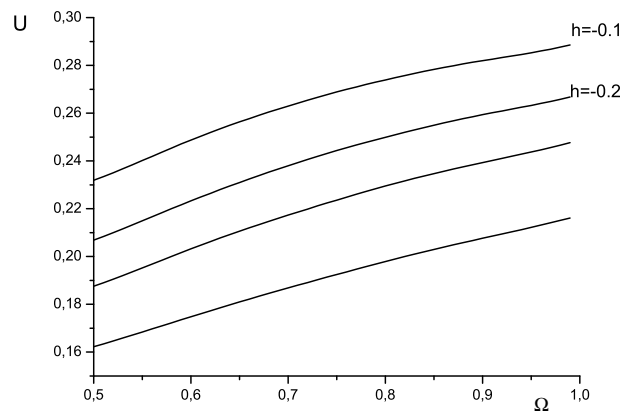


Рис. 2.8. Залежність критичного значення кулонівського потенціалу U_{eff} від тунельного розщеплення рівнів Ω при різних значеннях поля асиметрії h $n = 1.0, g = 1.0, W = 0.1$.

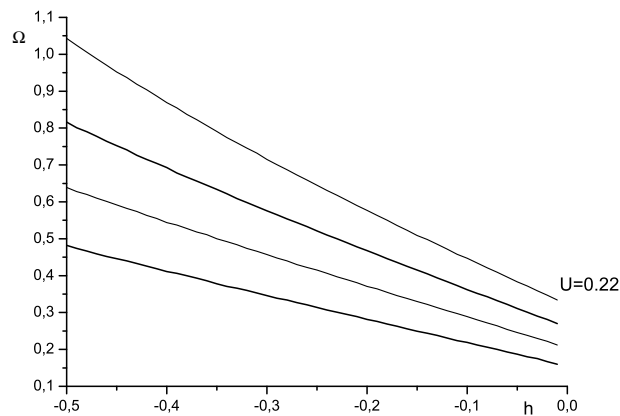


Рис. 2.9. Критичне значення параметру тунельного розщеплення Ω як функція поля асиметрії h при різних значеннях U ; $n = 1.0, g = 1.0, W = 0.1$.

інший спосіб розрахунку одновузлової електронної функції Гріна $G_{\sigma}^{(a)}$, пов'язаний з використанням теорії збурень у мацубарівському представленні.

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі буде мати в загальному такий самий вигляд, як і раніше

$$H = \sum_i H_i + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}, \quad (2.51)$$

$$H_i = -\mu(n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) + g(n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})S_i^z - \Omega S_i^x - hS_i^z. \quad (2.52)$$

Однак тепер доданок $Un_{\uparrow}n_{\downarrow}$ відсутній, оскільки задача розглядається на редукованому базисі, що складається з шести станів

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0, 0, \frac{1}{2}\rangle, & |3\rangle &= |0, 1, \frac{1}{2}\rangle, & |4\rangle &= |1, 0, \frac{1}{2}\rangle, \\ |\tilde{1}\rangle &= |0, 0, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{3}\rangle &= |0, 1, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{4}\rangle &= |1, 0, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Вводимо оператори Хаббарда на просторі вищезгаданих власних векторів; тоді оператори народження та знищення електронів (в границі, коли стани $|2\rangle, |\tilde{2}\rangle = |1, 1, \pm\frac{1}{2}\rangle$ відсутні) запишуться наступним чином [133]

$$c_{i,\uparrow} = X_i^{14} + X_i^{\tilde{14}}, \quad c_{i,\downarrow} = X_i^{13} + X_i^{\tilde{13}} \quad (2.54)$$

Одновузлова частина вихідного гамільтоніану на мові операторів Хаббарда матиме наступний вигляд

$$\begin{aligned} H_i &= (-\mu + \frac{g}{2} - \frac{h}{2})(X_i^{33} + X_i^{44}) + (-\mu - \frac{g}{2} + \frac{h}{2})(X_i^{\tilde{33}} + X_i^{\tilde{44}}) + \frac{h}{2}(X_i^{\tilde{11}} - X_i^{11}) \\ &+ \frac{\Omega}{2}(X_i^{1\tilde{1}} + X_i^{\tilde{1}1} + X_i^{\tilde{33}} + X_i^{3\tilde{3}} + X_i^{\tilde{44}} + X_i^{4\tilde{4}}). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Цей гамільтоніан є діагональним за умови $\Omega = 0$, але у випадку ненульового тунельного розщеплення рівнів, щоб його здіагоналізувати, необхідно використувати перетворення [133]; аналогічне до (2.6)

$$\begin{pmatrix} R \\ \tilde{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi_r & \sin \phi_r \\ -\sin \phi_r & \cos \phi_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ \tilde{r} \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

Тут

$$\cos(2\phi_r) = \frac{n_r g - h}{\sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}}, \quad n_1 = 0, n_3 = n_4 = 1. \quad (2.57)$$

Таким чином отримуємо

$$H = \sum_{i,r} \varepsilon_r X_i^{rr} + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}, \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,\tilde{1}} &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{h^2 + \Omega^2}, \\ \varepsilon_{3,\tilde{3}} &= \varepsilon_{4,\tilde{4}} = -\mu \pm \frac{1}{2} \sqrt{(g - h)^2 + \Omega^2}. \end{aligned}$$

Далі, використавши перетворення (2.56), можемо записати

$$\begin{aligned} c_{i,\uparrow} &= \cos \phi_{41} (X_i^{14} + X_i^{\tilde{14}}) + \sin \phi_{41} (X_i^{14} - X_i^{\tilde{14}}), \\ c_{i,\downarrow} &= \cos \phi_{31} (X_i^{13} + X_i^{\tilde{13}}) + \sin \phi_{31} (X_i^{13} - X_i^{\tilde{13}}), \\ \cos \phi_{41} &= \cos(\phi_4 - \phi_1), \quad \cos \phi_{31} = \cos(\phi_3 - \phi_1), \\ \sin \phi_{41} &= \sin(\phi_4 - \phi_1), \quad \sin \phi_{31} = \sin(\phi_3 - \phi_1). \end{aligned} \quad (2.59)$$

де оператори Хаббарда вже діють на новому базисі

2.3.2. Переформулювання теореми Віка для ефективної одновузлової задачі

Для встановлення явного вигляду співвідношення (A.10) необхідно розрахувати одновузлову електронну функцію Гріна. Використаємо розклад за степенями когерентного потенціалу $J_\sigma(\omega)$, коли в ролі збурення виступає гамільтоніан взаємодії (2.11) з допоміжним фермі-полем. Для нульового наближення:

$$-\langle TX^{qp}(\tau)X^{pq}(\tau')\rangle_0 = -g_0^{qp}(\tau - \tau')\langle X^{qq} + X^{pp}\rangle_0. \quad (2.60)$$

В частотному представленні $g_0^{qp}(\omega_n) = -(i\omega_n - \lambda_{pq})^{-1}$, $\lambda_{pq} = \varepsilon_p - \varepsilon_q$.

Використовуємо теорему Віка для операторів Хаббарда [138]:

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{X^{41}(\tau')X^{14}(\tau)} &= -g_0^{14}(\tau - \tau')(X^{11} + X^{44})_{\tau'}, \\ \overleftrightarrow{X^{\widetilde{41}}(\tau')X^{14}(\tau)} &= 0, \\ \overleftrightarrow{X^{\widetilde{41}}(\tau')X^{14}(\tau)} &= -g_0^{14}(\tau - \tau')X^{\widetilde{44}}(\tau'), \\ \overleftrightarrow{X^{\widetilde{41}}(\tau')X^{14}(\tau)} &= -g_0^{14}(\tau - \tau')X^{\widetilde{11}}(\tau'). \end{aligned}$$

Як результат такого спарювання виникають оператори Хаббарда бозе типу.

Наближення сплаву (див [39, 40]) в загальному випадку означає нехтування недіагональними операторами Хаббарда при спарюванні операторів за теоремою Віка. Використовуючи таке наближення, отримуємо наступний результат:

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{c_{\uparrow}^+(\tau')X^{14}(\tau)} &= -g_0^{14}(\tau - \tau')(X^{11} + X^{44})_{\tau'} \cos \phi_{41}, \\ \overleftrightarrow{c_{\downarrow}^+(\tau')X^{14}(\tau)} &= 0, \\ \overleftrightarrow{c_{\uparrow}^+(\tau')X^{\widetilde{14}}(\tau)} &= -g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau')(X^{\widetilde{11}} + X^{\widetilde{44}})_{\tau'} \cos \phi_{41}, \\ \overleftrightarrow{c_{\downarrow}^+(\tau')X^{\widetilde{14}}(\tau)} &= 0, \\ \overleftrightarrow{c_{\uparrow}^+(\tau')X^{\widetilde{14}}(\tau)} &= g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau')(X^{\widetilde{11}} + X^{44})_{\tau'} \sin \phi_{41}, \\ \overleftrightarrow{c_{\downarrow}^+(\tau')X^{\widetilde{14}}(\tau)} &= 0, \\ \overleftrightarrow{c_{\uparrow}^+(\tau')X^{\widetilde{14}}(\tau)} &= -g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau')(X^{11} + X^{\widetilde{44}})_{\tau'} \sin \phi_{41}, \\ \overleftrightarrow{c_{\downarrow}^+(\tau')X^{\widetilde{14}}(\tau)} &= 0. \end{aligned} \quad (2.61)$$

І тепер, використовуючи (2.61) можемо записати

$$\overleftrightarrow{c_{\uparrow}^+(\tau')c_{\uparrow}(\tau)} = -g_0^{14}(\tau - \tau')(X^{11} + X^{44})_{\tau'} \cos^2 \phi_{41}$$

$$\begin{aligned}
& -g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau')(X^{\widetilde{11}} + X^{\widetilde{44}})_{\tau'} \cos^2 \phi_{41} \\
& -g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau')(X^{\widetilde{11}} + X^{44})_{\tau'} \sin^2 \phi_{41} \\
& -g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau')(X^{11} + X^{\widetilde{44}})_{\tau'} \sin^2 \phi_{41}
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Цей результат означає, що у випадку наближення типу сплаву спарювання операторів фермі розкладається на суму доданків, що є проєкціями на одновузлові стани (як наслідок дії операторів X^{rr}). Таке спрощення можна трактувати як модифікацію процедури спарювань X -операторів, яка не враховує процесів розсіювання, пов'язаних зі зміною локальних станів.

Остаточно перепишемо співвідношення (2.62) у такому вигляді

$$\begin{aligned}
& \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau') c_{\uparrow}(\tau) = \\
& -[g_0^{14}(\tau - \tau') \cos^2 \phi_{41} + g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau') \sin^2 \phi_{41}] X^{11}(\tau') \\
& -[g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau') \cos^2 \phi_{41} + g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau') (\sin^2 \phi_{41})] X^{\widetilde{11}}(\tau') \\
& -[g_0^{14}(\tau - \tau') \cos^2 \phi_{41} + g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau') \sin^2 \phi_{41}] X^{44}(\tau') \\
& -[g_0^{\widetilde{14}}(\tau - \tau') \cos^2 \phi_{41} + g_0^{\widetilde{144}}(\tau - \tau') \sin^2 \phi_{41}] X^{\widetilde{44}}(\tau') \equiv \\
& -g_{0\uparrow}^{(1)} X^{11}(\tau') - g_{0\uparrow}^{(\widetilde{1})} X^{\widetilde{11}}(\tau') - g_{0\uparrow}^{(4)} X^{44}(\tau') - g_{0\uparrow}^{(\widetilde{4})} X^{\widetilde{44}}(\tau') = - \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)} X^{rr}(\tau'),
\end{aligned} \tag{2.63}$$

де запроваджено спроектовані одновузлові функції $g_{0\uparrow}^{(r)}$ нульового наближення. Формула (2.63) складає зміст т. зв. модифікованої теореми Віка для операторів Хаббарда. І це є основною відмінністю від ідеального ферміонного випадку, де результатом спарювання є функція Гріна.

2.3.3. Одновузлова функція Гріна

В загальному випадку для розрахунку електронної функції Гріна ефективної одновузлової задачі ми виходимо з її означення

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = - \frac{\langle T c_{\sigma}(\tau) c_{\sigma}^+(\tau') e^{-\beta H_{eff}} \rangle}{\langle e^{-\beta H_{eff}} \rangle} = - \frac{\langle T c_{\sigma}(\tau) c_{\sigma}^+(\tau') \tilde{\sigma}(\beta) \rangle_0}{\langle \tilde{\sigma}(\beta) \rangle_0}. \tag{2.64}$$

Окремо розраховуємо чисельник та знаменник цього виразу, використовуючи розклад за степенями когерентного потенціалу $J_\sigma(\tau - \tau')$, який виникає в результаті спарювання за теоремою Віка операторів допоміжного фермі-поля ($-V^2 \langle \xi_\sigma(\tau) \xi_\sigma^+(\tau') \rangle = J_\sigma(\tau - \tau')$). Нижче показано другий порядок такого розкладу - з чотирма операторами народження та знищення електронів:

$$\begin{aligned}
\langle T c_\uparrow(\tau) c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau_2) \rangle_0 &= -\langle T \overbrace{c_\uparrow^+(\tau) c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} \overbrace{c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau_2)}^{\leftarrow} \rangle_0 \\
&+ \langle T \overbrace{c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} \overbrace{c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow(\tau_2)}^{\leftarrow} \rangle_0 \\
&= -\sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau_1) \langle X^{rr} \rangle_0 + \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau_1) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau') \langle X^{rr} \rangle_0,
\end{aligned} \tag{2.65}$$

та

$$\begin{aligned}
\langle T c_\uparrow(\tau) c_\uparrow^+(\tau') c_\downarrow^+(\tau_1) c_\downarrow(\tau_2) \rangle_0 &= -\langle T \overbrace{c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} \overbrace{c_\downarrow^+(\tau_1) c_\downarrow(\tau_2)}^{\leftarrow} \rangle_0 \\
&= -\sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau') g_{0\downarrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau_1) \langle X^{rr} \rangle_0.
\end{aligned} \tag{2.66}$$

Спарювання операторів фермі в цьому випадку виконано згідно (2.63). Діагональні оператори Хаббарда, що виникли при проміжних кроках такої процедури, перемножуємо, використовуючи правило $X^{rr} X^{pp} = X^{rr} \delta_{rp}$. Як результат, залишаються тільки середні $\langle X^{rr} \rangle_0$.

Розглянемо ще третій порядок в нашому розкладі - з шістьма операторами народження та знищення електронів:

$$\begin{aligned}
&\langle T c_\uparrow(\tau) c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau_2) c_\uparrow^+(\tau_3) c_\uparrow(\tau_4) \rangle_0 \\
&= -\langle T \overbrace{c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau_2) c_\uparrow^+(\tau_3) c_\uparrow(\tau_4) \rangle_0 \\
&+ \langle T c_\uparrow^+(\tau') \overbrace{c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} c_\uparrow(\tau_2) c_\uparrow^+(\tau_3) c_\uparrow(\tau_4) \rangle_0 \\
&+ \langle T c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow^+(\tau_1) \overbrace{c_\uparrow(\tau) c_\uparrow(\tau_2)}^{\leftarrow} c_\uparrow^+(\tau_3) c_\uparrow(\tau_4) \rangle_0 \\
&+ \langle T c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau_2) \overbrace{c_\uparrow^+(\tau_3) c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} c_\uparrow(\tau_4) \rangle_0 \\
&= -\langle T \overbrace{c_\uparrow^+(\tau') c_\uparrow(\tau)}^{\leftarrow} \overbrace{c_\uparrow^+(\tau_1) c_\uparrow(\tau_2)}^{\leftarrow} \overbrace{c_\uparrow^+(\tau_3) c_\uparrow(\tau_4)}^{\leftarrow} \rangle_0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle T \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau') c_{\uparrow}(\tau) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_1) c_{\uparrow}(\tau_4) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_3) c_{\uparrow}(\tau_2) \rangle_0 \\
& + \langle T \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau') c_{\uparrow}(\tau_2) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_1) c_{\uparrow}(\tau) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_3) c_{\uparrow}(\tau_4) \rangle_0 \\
& - \langle T \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau') c_{\uparrow}(\tau_4) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_1) c_{\uparrow}(\tau) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_3) c_{\uparrow}(\tau_2) \rangle_0 \\
& + \langle T \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau') c_{\uparrow}(\tau_4) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_1) c_{\uparrow}(\tau_2) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_3) c_{\uparrow}(\tau) \rangle_0 \\
& - \langle T \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau') c_{\uparrow}(\tau_2) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_3) c_{\uparrow}(\tau) \overleftarrow{c_{\uparrow}^+}(\tau_1) c_{\uparrow}(\tau_4) \rangle_0.
\end{aligned} \tag{2.67}$$

Остаточню

$$\begin{aligned}
& \langle T c_{\uparrow}(\tau) c_{\uparrow}^+(\tau') c_{\uparrow}^+(\tau_1) c_{\uparrow}(\tau_2) c_{\uparrow}^+(\tau_3) c_{\uparrow}(\tau_4) \rangle_0 \\
& = \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau_1) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_4 - \tau_3) \langle X^{rr} \rangle_0 \\
& - \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_4 - \tau_1) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau_3) \langle X^{rr} \rangle_0 \\
& - \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau_1) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_4 - \tau_3) \langle X^{rr} \rangle_0 \\
& + \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_4 - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau_1) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau_3) \langle X^{rr} \rangle_0 \\
& - \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_4 - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau_1) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau_3) \langle X^{rr} \rangle_0 \\
& + \sum_r g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_2 - \tau') g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau - \tau_3) g_{0\uparrow}^{(r)}(\tau_4 - \tau_1) \langle X^{rr} \rangle_0.
\end{aligned} \tag{2.68}$$

Подібну процедуру виконуємо і у випадку вищих порядків розкладу. Використовуючи діаграмні зображення, маємо можливість розділити звідні та незвідні “вакуумні” (без зовнішніх вершин) частини діаграм. Перші, в частотному представленні, формують геометричну прогресію. Другі - мають вигляд закритих кілець різної довжини (створених незбуреними функціями Гріна та лініями когерентного потенціалу) та після підсумовування дають експоненційний внесок в підпросторах $|r\rangle$.

Таким чином, для чисельника функції Гріна $\langle T c_{\uparrow}(\tau) c_{\uparrow}^+(\tau') \rangle_{num}$ отримується:

$$\begin{aligned}
& \langle T c_{\uparrow}(\tau) c_{\uparrow}^+(\tau') \rangle_{num} \\
& = \sum_r \left[g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) - g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) J_{\uparrow}(\omega_n) g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) + g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) J_{\uparrow}(\omega_n) g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) J_{\uparrow}(\omega_n) g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) \right]
\end{aligned}$$

$$- \dots] \langle X^{rr} \rangle_0 e^{Q_r} = \sum_r \frac{g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n)}{1 + g_{0\uparrow}^{(r)}(\omega_n) J_{\uparrow}(\omega_n)} \langle X^{rr} \rangle_0 e^{Q_r}. \quad (2.69)$$

Тут:

$$Q_r = \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n) J_{\sigma}(\omega_n) - \frac{1}{2} \left[\sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n) J_{\sigma}(\omega_n) \right]^2 \quad (2.70)$$

$$+ \frac{1}{3} \left[\sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n) J_{\sigma}(\omega_n) \right]^3 - \dots = \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} \ln(1 + g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n) J_{\sigma}(\omega_n)).$$

Зокрема,

$$Q_{1,\tilde{1}} = \sum_{\omega_n} \ln(1 + g_{0\uparrow}^{(1,\tilde{1})}(\omega_n) J_{\uparrow}(\omega_n)) + \sum_{\omega_n} \ln(1 + g_{0\downarrow}^{(1,\tilde{1})}(\omega_n) J_{\downarrow}(\omega_n)),$$

$$Q_{3,\tilde{3}} = \sum_{\omega_n} \ln(1 + g_{0\downarrow}^{(3,\tilde{3})}(\omega_n) J_{\downarrow}(\omega_n)), \quad (2.71)$$

$$Q_{4,\tilde{4}} = \sum_{\omega_n} \ln(1 + g_{0\uparrow}^{(4,\tilde{4})}(\omega_n) J_{\uparrow}(\omega_n)). \quad (2.72)$$

Подібним способом розраховуємо знаменник $\langle \tilde{\sigma}(\beta) \rangle_0$

$$\langle \tilde{\sigma}(\beta) \rangle_0 = 1 - \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \sum_{\sigma} J_{\sigma}(\tau_1 - \tau_2) \times \langle T c_{\sigma}^{+}(\tau_1) c_{\sigma}(\tau_2) \rangle_0 \quad (2.73)$$

$$+ \frac{1}{2!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_4 \times \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} J_{\sigma}(\tau_1 - \tau_2) J_{\sigma'}(\tau_3 - \tau_4) \times$$

$$\times \langle T c_{\sigma}^{+}(\tau_1) c_{\sigma}(\tau_2) c_{\sigma'}^{+}(\tau_3) c_{\sigma'}(\tau_4) \rangle_0 - \dots$$

В діаграмному представленні цей ряд виражається як набір “вакуумних” діаграм. Кінцевий вираз можна представити через внески Q_r вищезгаданих кільцевих діаграм:

$$\langle \sigma(\beta) \rangle_0 = \sum_r \left[1 + Q_r + \frac{1}{2!} Q_r^2 + \frac{1}{3!} Q_r^3 + \dots \right] \langle X^{rr} \rangle_0 = \sum_r e^{Q_r} \langle X^{rr} \rangle_0. \quad (2.74)$$

Остаточно отримується аналітичний вираз:

$$\langle T c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \rangle = \frac{\sum_r \frac{g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)}{1+g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)J_{\sigma}(\omega_n)} \langle X^{rr} \rangle_0 e^{Q_r}}{\sum_p e^{Q_p} \langle X^{pp} \rangle_0}, \quad (2.75)$$

де $\sigma = \uparrow$ чи $\downarrow$.

2.3.4. Електронний енергетичний спектр та його перебудова при наявності поперечного псевдоспінового поля

В результаті отримано замкнуту систему рівнянь для розрахунку функції Гріна $G_{\uparrow}^{(a)}(\omega)$ та когерентного потенціалу $J_{\uparrow}(\omega)$

$$\begin{aligned} G_k^{\sigma}(\omega) &= \frac{1}{[\Xi_{\sigma}(\omega)]^{-1} - t_k}, \\ G_{\sigma}^{(a)}(\omega) &= \frac{1}{[\Xi_{\sigma}(\omega)]^{-1} - J_{\sigma}(\omega)} = \frac{1}{N} \sum_k G_k^{\sigma}(\omega), \\ G_{\sigma}^{(a)}(\omega) &= \frac{\sum_r \frac{g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)}{1+g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)J_{\sigma}(\omega_n)} \langle X^{rr} \rangle_0 e^{Q_r}}{\sum_p e^{Q_p} \langle X^{pp} \rangle_0}, \\ Q_r &= \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} \ln(1 + g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)J_{\sigma}(\omega_n)). \end{aligned} \quad (2.76)$$

Для розрахунку $\langle X^{rr} \rangle_0$ ми використовуємо ітераційний процес: наступне значення $\langle X^{rr} \rangle_0$ залежить від попереднього $\langle X^{rr} \rangle_0'$ як

$$\langle X^{rr} \rangle_0 = \frac{\langle X^{rr} \rangle_0' e^{Q_r}}{\sum_{p=1, \tilde{1}, 4, \tilde{4}} \langle X^{pp} \rangle_0 e^{Q_p}}.$$

Початкові значення для середніх розраховуються згідно розподілу Больцмана на $\langle X^{rr} \rangle_0 = \frac{e^{-\beta\lambda_r}}{\sum_p e^{-\beta\lambda_p}}$.

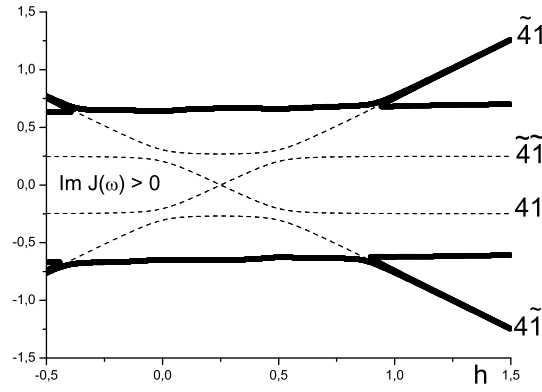


Рис. 2.10. Залежність меж електронних енергетичних зон від поля асиметрії h ($g = 0.5, \Omega = 0.1, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$) Тут і надалі пунктирна лінія показує енергетичні переходи pq (з енергією $\lambda_{pq} = \varepsilon_p - \varepsilon_q$) у випадку відсутності переносу.

Для обчислення суми за $\vec{k}$ ми використовуємо, як і раніше, напівеліптичну густину станів $\rho_0(t) = \frac{2}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - t^2}$. В цьому випадку $J_\sigma(\omega) = \frac{W^2}{4} G_\sigma^{(a)}(\omega)$ [35]. Кінцеве рівняння для когерентного потенціалу $J_\sigma(\omega)$ є наступним:

$$J_\sigma(\omega_n) = \frac{W^2}{4} \frac{\sum_r \frac{g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)}{1 + g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n) J_\sigma(\omega_n)} \langle X^{rr} \rangle_0 e^{Q_r}}{\sum_p e^{Q_p} \langle X^{pp} \rangle_0}. \quad (2.77)$$

Згідно звичної процедури, ми виконуємо аналітичне продовження на вісь дійсних частот ($i\omega_n \rightarrow \omega - i\delta$); розглядаються тільки розв'язки з $\Im J_\sigma(\omega) > 0$. Межі електронних енергетичних зон визначаються з умови $\Im J_\sigma(\omega) \rightarrow 0$. Їхні залежності від поля асиметрії та константи зв'язку наведено на рис. 2.10-2.13 Варто відмітити вплив тунельного розщеплення Ω на ширину існуючих зон (для цього треба порівняти рисунки зі значенням $g = 0.5$; видно, що збільшення Ω з 0.1 to 0.3 призводить до помітного розширення та додаткового розщеплення зон).

Також відзначимо, що псевдоспін-електронна взаємодія g приводить до появи двох додаткових зон у випадку $h \approx \frac{g}{2}$ та появи однієї зони в інших випадках (це впливає з порівняння графіків з різними g та однаковими Ω).

Залежності меж електронних зон від константи псевдоспін-електронної вза-

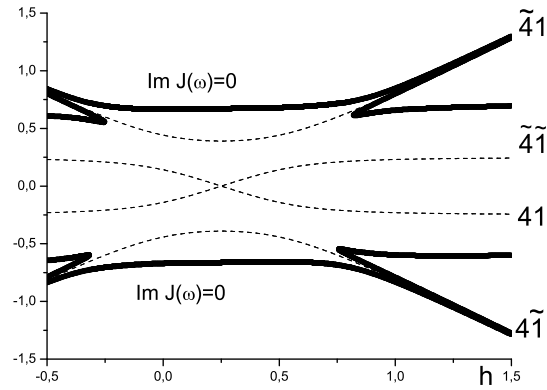


Рис. 2.11. Залежність меж електронних енергетичних зон від поля асиметрії h ($g = 0.5, \Omega = 0.3, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

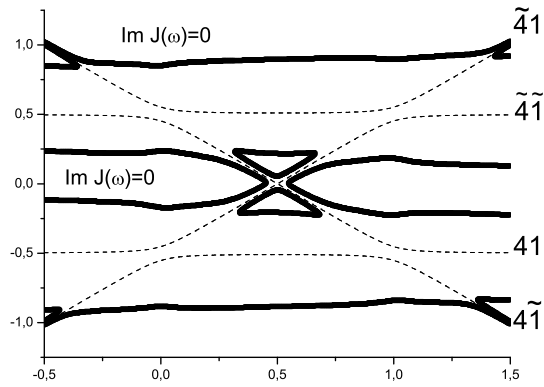


Рис. 2.12. Залежність меж електронних енергетичних зон від поля асиметрії h ($g = 1.0, \Omega = 0.1, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

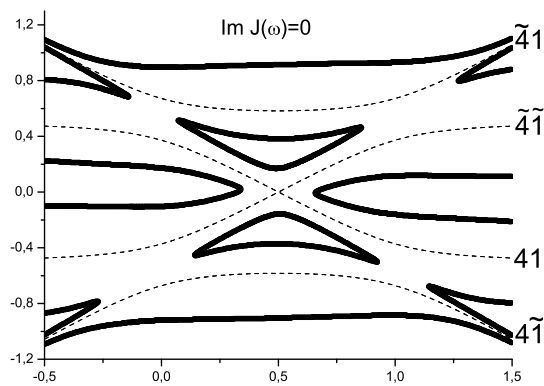


Рис. 2.13. Залежність меж електронних енергетичних зон від поля асиметрії h ($g = 1.0, \Omega = 0.3, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

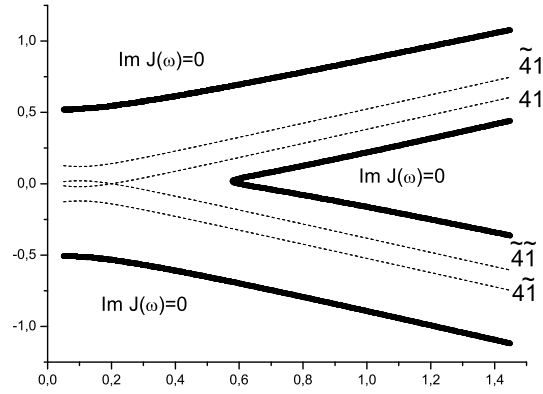


Рис. 2.14. Залежність меж електронних енергетичних зон від константи псевдоспін-електронної взаємодії g ($h = 0.1, \Omega = 0.1, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

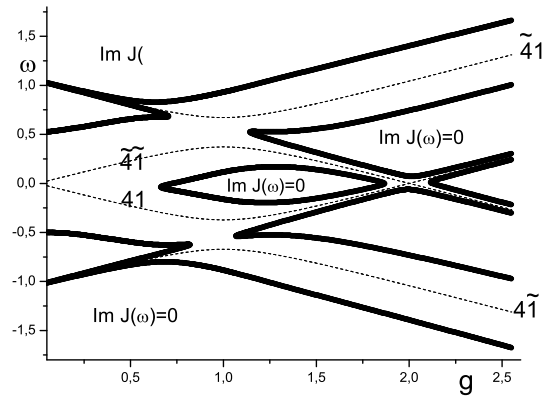


Рис. 2.15. Залежність меж електронних енергетичних зон від константи псевдоспін-електронної взаємодії g ($h = 1.0, \Omega = 0.3, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

ємодії g показано на рис. 2.14, 2.15. Варто відмітити, що існує також певне критичне значення $g \approx W$, при якому виникає додаткова щілина в спектрі. Такий результат подібний до отриманого в [18] для псевдоспін-електронної моделі без тунельного розщеплення.

Збільшення величини параметра тунелювання Ω також (як у випадку з залежністю від поля h) веде до збільшення ширини енергетичних зон. При $g \approx 2h$ в спектрі з'являються додаткові енергетичні зони.

Залежності електронних енергетичних зон від параметра тунелювання по-

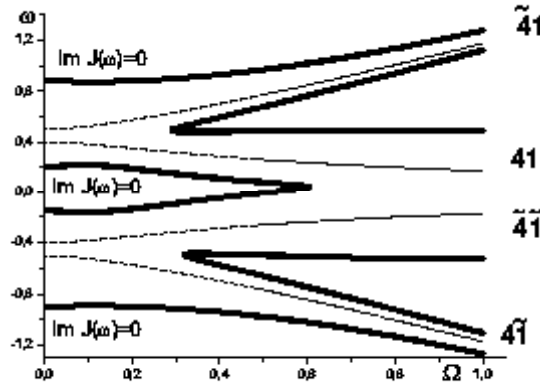


Рис. 2.16. Залежність електронних енергетичних зон від константи тунелювання Ω ($g = 1.0, h = 0.1, T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

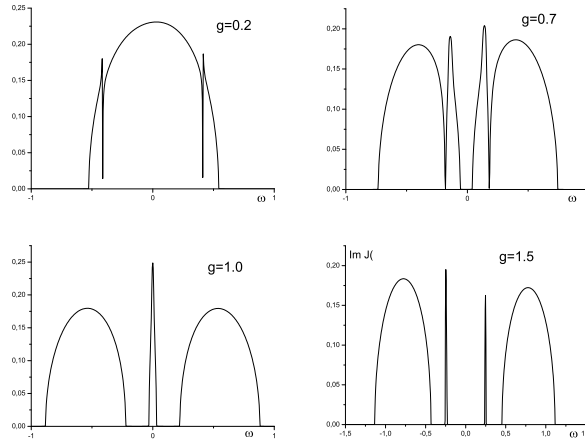


Рис. 2.17. Густина електронних станів при різних значеннях псевдоспін-електронної взаємодії g ($T = 0.02, \mu = 0, W = 0.5$)

дано на рис. 2.16; очевидним є існування двох критичних значень $\Omega \approx 0.3$ (злиття зон) та $\Omega \approx 0.6$ (поява нових зон).

На рис. 2.17 показано густини станів $\rho_\sigma(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_\sigma^{(a)}(\omega - i0^+)$ для різних величин константи псевдоспін-електронної взаємодії g . Тут (як і раніше для $g \approx W$) спостерігається розщеплення однієї зони і згодом при $g \approx 2h$ з'являються дві центральні зони; при подальшому збільшенні g ми отримуємо чотири зони в спектрі електронів.

2.4. Висновки

З метою з'ясування впливу псевдоспінової (локально ангармонічної) підсистеми на електронний енергетичний спектр ПЕМ проведено його розрахунки для двох випадків – проміжних та безмежно великих значень енергії хаббардівської одновузлової кореляції U . У першому з них задача розглядається для двох взаємодіючих близьких енергетичних підзон. Для цього використано наближення динамічного середнього поля. Ефективна одновузлова задача розв'язана у підході допоміжного ферміонного поля з використанням процедури різночасового розщеплення функцій Гріна вищих порядків та у випадку наближення сплаву.

Розглянуто випадок близьких підзон (14) та (32). Це реалізовано при $h \sim 0$ та для хімічного потенціалу електронів, розташованого в цій області значень енергій (що має місце для випадку половинного заповнення). Така задача є схожою до стандартної моделі Хаббарда, проте в нашому випадку ефективні параметри одновузлового спектру та перенесення електронів є функціями вихідних параметрів моделі (поля h , тунелювання Ω , константи взаємодії g). Тому, критичне значення U_{crit} , при якому відкривається щілина в спектрі, залежить від Ω та h . Для розглянутих значень модельних параметрів показано, що U_{crit} зростає зі зростанням Ω та при спаданні абсолютного значення h .

Досліджено також граничний випадок великого хаббардівського відштовхування ($U \rightarrow \infty$). Для розрахунку спектру нижньої хаббардівської підзони (яка залишається у цій границі) застосовано, як і вище, метод динамічного середнього поля та наближення сплаву; ефективну одновузлову задачу розв'язано тут за допомогою оригінального підходу, який ґрунтується на модифікації теореми Віка, що відповідає цьому наближенню. Показано, що електронні переходи з можливістю одночасного перевороту псевдоспіну (чи при незмінній його орієнтації) виявляють себе в ускладненні електронного спектру, в якому з'являються додаткові підзони. Має місце розщеплення зон та поява нових щілин; ефект залежить від значень поздовжнього поля h , константи взаємодії g та поперечного поля Ω .

Отримані результати вказують, що в реальних системах, у яких присутній

локальний ангармонізм коливань гратки, перехід метал-діелектрик (за який відповідають звичайно короткосяжні електронні кореляції) може бути спричиненим цією ангармонічною підсистемою. Зміною параметрів локального ангармонізму (тобто форми потенційної ями), можна досягнути появи щілини. З таким ефектом може бути пов'язаний механізм впливу зовнішнього тиску на згадані вище переходи метал-діелектрик в кристалічних системах з перехідними та рідкісноземельними елементами, що мають істотні ангармонізми гратки.

Додаткові щілини в ферміонному спектрі можуть виникати, зокрема при збільшенні поперечного поля Ω . У випадку, коли ПЕМ застосовна до бозон-ферміонних сумішей на гратці, збільшення параметру Ω відповідає заглибленню у фазу з бозе-конденсатом ($\Omega \sim \sum t_{ij}^b \langle S_j^x \rangle$). Додаткові щілини можуть тут виникати при певних критичних значеннях параметра порядку $\langle S^x \rangle$. Ця задача більш детально досліджується у розділі 7. Зазначимо, що в нашому дослідженні (що базується на стандартній версії ПЕМ) перенесення бозонів враховується в наближенні середнього поля. В той же ж час, внесок від колективної динаміки псевдоспінів у електронний спектр може бути важливим, оскільки обмін квантами псевдоспінових (бозонних) збуджень формує ефективну взаємодію між ферміонами [111].

РОЗДІЛ 3

ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННА МОДЕЛЬ ІНТЕРКАЛЯЦІЇ ІОНІВ В КРИСТАЛАХ

3.1. Вступ

При теоретичному описі іонної інтеркаляції в кристалах, поряд з *ab initio* квантово-хімічними розрахунками в рамках методу функціоналу густини та симуляціями Монте-Карло, корисним виявився підхід, що ґрунтується на ґраткових моделях. Моделі типу ґраткового газу успішно використовуються в теорії іонних кристалічних провідників, даючи можливість проаналізувати вплив міжчастинкової взаємодії на рівноважні стани підсистеми рухомих іонів та дослідити їх перескокову динаміку [5]. Необхідність врахування взаємодії впроваджених (інтеркальованих) іонів з електронною підсистемою, у тому числі з електронами провідності базової структури (кристала "господаря"), привела до псевдоспін-електронного опису інтеркаляції. До кола цих задач була перенесена модель, сформульована раніше для локально ангармонічних систем з сильними електронними кореляціями (див. розділ 2). Псевдоспінові змінні у випадку інтеркаляції пов'язані із заповненням n_i позицій, у яких можуть перебувати домішкові іони ($S_i^z = n_i - 1/2$). Врахування іон-електронної взаємодії в рамках ПЕМ, як було показано в [139], дає принципову можливість дослідити генезис і характер ефективної взаємодії між іонами через електрони (як зонні, так і у локалізованих станах). Більш ґрунтовно, однак, роль при цьому іонних перестрибувань між різними позиціями у ґратці не була досліджена.

Завданням цього розділу є дослідження впливу перенесення іонів на рівноважні стани системи інтеркальованих іонів. Як було показано в [139], ефективна

взаємодія між іонами може змінювати (в залежності від заповнення електронних зон) свій характер від відштовхування до притягання, призводячи до появи зарядо-впорядкованих модульованих фаз або до розділення фаз на однорідні фази з різною концентрацією частинок, відповідно. Для таких фаз чи фазових переходів перенесення іонів між локальними позиціями є несприятливим і призводить до появи фази типу надплинної.

Ми розглядаємо ґраткову систему, для якої за основу опису взято псевдоспін-електронну модель, і застосовуємо такий підхід для дослідження термодинаміки інтеркаляції іонів в кристалах. Взаємодію електронів та іонів записано у локальному наближенні; враховано можливість перенесення інтеркальованих іонів по вузлах ґратки. В рамках використання наближення середнього поля досліджено рівноважні стани моделі та побудовано відповідні фазові діаграми.

3.2. Гамільтоніан моделі та його перетворення

Гамільтоніан ґраткової моделі, яка описує підсистему інтеркальованих частинок і їх взаємодію з електронами провідності кристалу - "господаря", має у псевдоспіновому представленні вигляд [139]:

$$H = \sum_{ij} \Omega_{ij} S_i^+ S_j^- + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (g S_i^z n_{i\sigma} - \mu n_{i\sigma}) - \sum_i h S_i^z. \quad (3.1)$$

Псевдоспінова змінна S_i^z набуває два можливі значення; $S_i^z = 1/2$ коли є інтеркальований іон на вузлі i та $S_i^z = -1/2$ коли немає іона, $c_{i\sigma}^+$ та $c_{i\sigma}$ - це оператори народження та знищення ферміонів, відповідно. Розглядається також можливість переносу іонів та електронів між вузлами ґратки (перший та другий доданки в (3.1)) та взаємодія електронів з іонами інтеркалянта (величина взаємодії g); μ та h виконують роль хімічних потенціалів електронів та іонів, відповідно.

Залежно від знаку і величини константи взаємодії g , гамільтоніан (3.1) може описувати як інтеркалянт донорного типу (коли домішкові атоми віддають електрони у зону провідності кристала - "господаря"), так й інтеркалянт акцепторного типу (у цьому разі електрони переходять на домішкові атоми, покида-

ючи валентну зону). Першому з цих випадків відповідає взаємодія, яка понижує енергію зонних електронів ($g < 0$), а другому - яка її підвищує ($g > 0$). У ролі донорів виступають переважно інтеркальовані атоми Li, Na, K, Rb, Ca, Ba, ... для яких електронні стани валентних електронів розташовані поблизу дна зони провідності, у той час як акцепторами є атоми F, Cl, Br, I, ..., не враховуючи певного типу іонних груп [45]; тут актуальні домішкові рівні є поблизу верхнього краю валентної зони. Існує, разом з тим, можливість впровадження домішкових атомів із т. зв. проміжною окислювальною дією, до яких відносяться, зокрема, атоми групи перехідних елементів, таких як Cu, In, Co, Ni, ... [45]. Тут взаємодія з зонними електронами має більш складний характер, формується крім цього у забороненій щілині окрема домішкова електронна зона. Цей випадок не може бути зведений до простої моделі (3.1) і він не є предметом нашого розгляду.

Зауважимо, що гамільтоніан (3.1) схожий до того, що використовувався при дослідженні біполяронного механізму надпровідності для опису системи співіснуючих рухомих електронів та одновузлових електронних пар, коли оператори народження та знищення локалізованих пар (жорстких бозонів) підлягають статистиці Паулі для спінів 1/2 (див. наприклад [140]). Проте, відмінністю від нашої моделі є те, що в [140] хімічні потенціали електронів у парах та рухомих електронів були однаковими та використовувався режим фіксованої концентрації частинок.

Для дослідження термодинаміки моделі застосовуємо наближення середнього поля:

$$\begin{aligned} gn_i S_i^z &\rightarrow g\langle n_i \rangle S_i^z + gn_i \langle S_i^z \rangle - g\langle n_i \rangle \langle S_i^z \rangle, \\ \Omega S_i^+ S_j^- &\rightarrow \Omega \langle S_i^+ \rangle S_j^- + \Omega S_i^+ \langle S_j^- \rangle - \Omega \langle S_i^+ \rangle \langle S_j^- \rangle. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Псевдоспін-електронна взаємодія та перенос іонів в такому випадку враховані в дусі наближення середнього поля (НСП) - через внутрішнє самоузгоджене поле, що діє на електрони та псевдоспіни. Також, слід зазначити, що приймається $\langle S_i^+ \rangle = \langle S_i^- \rangle = \langle S_i^x \rangle, \langle S_i^y \rangle = 0$. Середнє значення $\langle S_i^x \rangle$ відіграє роль параметра порядку; для випадку надплинної фази (фази з конденсатом типу бозе) він пов'язаний із концентрацією частинок у конденсаті.

Застосування НСП до сильноскорельованих систем у границі слабкої взаємодії на вузлі дозволяє досить добре описати їхні властивості, коли відсутнє тунелювання між електронними рівнями. Це наближення аналогічне до наближення віртуального кристалу, що часто застосовується до змішаних систем. Для виходу за рамки НСП використовуються більш складні підходи, наприклад наближення когерентного потенціалу. Також слід зазначити, що у випадку моделі Бозе-Хаббарда кінетична енергія завжди розглядається в рамках НСП і такі підходи дають можливість отримати хороші оцінки критичного значення відштовхування на вузлі, при якому виникає фазовий перехід моттівський діелектрик - надплинна фаза [81, 141].

Випадок $\Omega = 0$ був розглянутий в роботах [22, 23]. Було показано, що у випадку коли хімічний потенціал знаходиться близько до центра зони, в системі виникає подвійна модуляція. Разом з тим у випадку, коли хімічний потенціал близький до країв зони, мають місце фазові переходи між однорідними фазами. Для проміжних значень хім. потенціалу виникають неспівмірні модульовані фази. В подальшому в наших розрахунках беруться до уваги тільки фази з подвійною модуляцією та однорідні фази.

3.3. Термодинамічні функції у наближенні середнього поля

Для врахування можливості формування модульованих фаз кристал розбивається на дві підгратки: $\langle \sum_{\sigma} n_{i\alpha\sigma} \rangle = n_{\alpha}$, $\langle S_{i\alpha}^z \rangle = \eta_{\alpha}$, де α - індекс підгратки ($\alpha = 1, 2$), та i - індекс елементарної комірки.

Гамільтоніан моделі у наближенні середнього поля

$$\begin{aligned}
 H^{MFA} = & \sum_{i\alpha\sigma} (g\eta_{\alpha} - \mu) n_{i\alpha\sigma} + \sum_{i\alpha} (g\eta_{\alpha} - h) S_{i\alpha}^z + \sum_{i\alpha, j\beta} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^+ c_{j\beta\sigma} \\
 & + \sum_{\alpha\beta i} 2\Omega^{\alpha\beta} \langle S_{\alpha}^x \rangle S_{i\beta}^x - g \sum_{i\alpha} n_{\alpha} \eta_{\alpha} - N\Omega \langle S_1^x \rangle \langle S_2^x \rangle, \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

де N - це кількість вузлів в ґратці, $\Omega \equiv \Omega^{12} = \Omega^{21} = \sum_i \Omega_{ij}^{12}$; $\Omega^{11} = \Omega^{22} = t^{11} = t^{22} = 0$.

Для діагоналізації гамільтоніана робиться перехід до $\mathbf{k}$ -представлення та виконується перетворення:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}1\sigma} &= \cos \phi_k \tilde{c}_{\mathbf{k}1\sigma} + \sin \phi_k \tilde{c}_{\mathbf{k}2\sigma}, \\ c_{\mathbf{k}2\sigma} &= -\sin \phi_k \tilde{c}_{\mathbf{k}1\sigma} + \cos \phi_k \tilde{c}_{\mathbf{k}2\sigma}, \\ \sin 2\phi_k &= \frac{t_{\mathbf{k}}}{\sqrt{(g\frac{\eta_1-\eta_2}{2})^2 + t_{\mathbf{k}}^2}}, \quad \cos 2\phi_k = \frac{-g\frac{\eta_1-\eta_2}{2}}{\sqrt{(g\frac{\eta_1-\eta_2}{2})^2 + t_{\mathbf{k}}^2}}; \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} S_{i\alpha}^z &= \sigma_{i\alpha}^z \cos \theta_\alpha + \sigma_{i\alpha}^x \sin \theta_\alpha, \quad S_{i\alpha}^x = \sigma_{i\alpha}^x \cos \theta_\alpha - \sigma_{i\alpha}^z \sin \theta_\alpha, \\ \sin \theta_\alpha &= \frac{2\Omega \langle S_\beta^x \rangle}{\tilde{\lambda}_\alpha}, \quad \cos \theta_\alpha = \frac{h - gn_\alpha}{\tilde{\lambda}_\alpha}, \\ \tilde{\lambda}_\alpha &= \sqrt{(gn_\alpha - h)^2 + (2\Omega \langle S_\beta^x \rangle)^2}, \quad \alpha \neq \beta. \end{aligned} \quad (3.5)$$

В результаті отримуємо:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\alpha\sigma\mathbf{k}} (\lambda_{\mathbf{k}\alpha} - \mu) \tilde{n}_{\mathbf{k}\alpha\sigma} - \sum_{i\alpha} \tilde{\lambda}_\alpha \sigma_{i\alpha}^z - g \frac{N}{2} (n_1 \eta_1 + n_2 \eta_2) - N \Omega \langle S_1^x \rangle \langle S_2^x \rangle, \\ \lambda_{\mathbf{k}\alpha} &= g \frac{\eta_1 + \eta_2}{2} + (-1)^\alpha \sqrt{(g\frac{\eta_1 - \eta_2}{2})^2 + t_{\mathbf{k}}^2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Як видно з цих формул, електронні зони змінюють своє положення при інтеркаляції (див. [139]). Крім того, подвоєння елементарної комірки спричиняє розщеплення в електронному спектрі [22].

Відзначимо у цьому зв'язку, що модель, в основу якої покладено зміщення енергії електронних зон “господаря”, є однією з базових при описі інтеркаляційних процесів (т. зв. “модель детермінованих зон” [57]). Вона знайшла своє підтвердження, починаючи з робіт Біла і Ліанга, де для системи MoS_2 при інтеркаляції Na_x (де натрій виступає як донор) було виявлено перехід напівпровідник-метал [59] внаслідок переміщення хімічного потенціалу електронів у зону провідності як наслідок її опускання (подібне має місце і для інших донорних інтекалянтів, наприклад для систем з літієм Li_xTiS_2 чи Li_xTiO_2).

Рівняння для електронної та іонної концентрацій отримуються шляхом усереднення за допомогою діагонального гамільтоніана (3.6):

$$n_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{1 + \cos 2\phi_k}{2} \left(e^{\frac{\lambda_{\mathbf{k}\alpha} - \mu}{T}} + 1 \right)^{-1} + \frac{1 - \cos 2\phi_k}{2} \left(e^{\frac{\lambda_{\mathbf{k}\beta} - \mu}{T}} + 1 \right)^{-1} \right),$$

$$\eta_\alpha = \frac{h - gn_\alpha}{2\tilde{\lambda}_\alpha} \operatorname{th} \left(\frac{\beta\tilde{\lambda}_\alpha}{2} \right),$$

$$\langle S_\alpha^x \rangle = -\frac{2\Omega \langle S_\beta^x \rangle}{2\tilde{\lambda}_\alpha} \operatorname{th} \left(\frac{\beta\tilde{\lambda}_\alpha}{2} \right). \quad (3.7)$$

Термодинамічний потенціал в такому випадку дорівнює

$$\begin{aligned} \frac{\Phi}{\frac{N}{2}} = & -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \ln \left(\left(1 + e^{\frac{\mu - \lambda_{\mathbf{k}1}}{T}} \right) \left(1 + e^{\frac{\mu - \lambda_{\mathbf{k}2}}{T}} \right) \right) \\ & - T \ln \left(4 \cosh \frac{\beta\tilde{\lambda}_1}{2} \cosh \frac{\beta\tilde{\lambda}_2}{2} \right) - g(n_1\eta_1 + n_2\eta_2) - 2\Omega \langle S_1^x \rangle \langle S_2^x \rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Отримано, таким чином, систему рівнянь, що визначає рівноважні значення параметрів порядку та концентрацій у підгратках. Для знаходження розв'язків, яким відповідають термодинамічно стійкі стани підсистеми інтеркалянт - електрони провідності, використовується умова абсолютного мінімуму потенціалу (3.8).

3.4. Фазові переходи у випадку інтеркалянта акцепторного типу ($g > 0$)

Для розв'язання системи рівнянь (3.7) та розрахунку термодинамічного потенціалу (3.8) використано числові методи. Підсумовування за хвильовим вектором проведено за допомогою напів-еліптичної густини станів $\rho(\epsilon) = \frac{2}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - \epsilon^2}$, $-W < \epsilon < W$, де W - півширина електронної зони (в подальшому бралось $W = 1$).

На рисунку 3.1 показано отриману залежність концентрації іонів $n_{\text{ion}\alpha} = \eta_\alpha + 1/2$ від їх хімічного потенціалу для випадку $g > 0$ в режимі фіксованого значення хімічного потенціалу електронів, де значення $\mu = 0$ відповідає середині електронної зони (подібна поведінка спостерігається і у випадку концентрації електронів як функції h) для наступного набору параметрів: $W = 1, g = 0.5, T = 0.05, \mu = 0, \Omega = 0(a), \Omega = 0.3(b)$.

Суцільні лінії відповідають однорідній фазі, коли $\langle S^x \rangle = 0$, пунктирна лінія відповідає випадку однорідної фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$, штрихова лінія відповідає випадку модульованої фази з $\eta_1 \neq \eta_2$ ($\langle S_{1,2}^x \rangle = 0$ коли $\Omega = 0$ та $\langle S_{1,2}^x \rangle \neq 0$ якщо $\Omega = 0.3$).

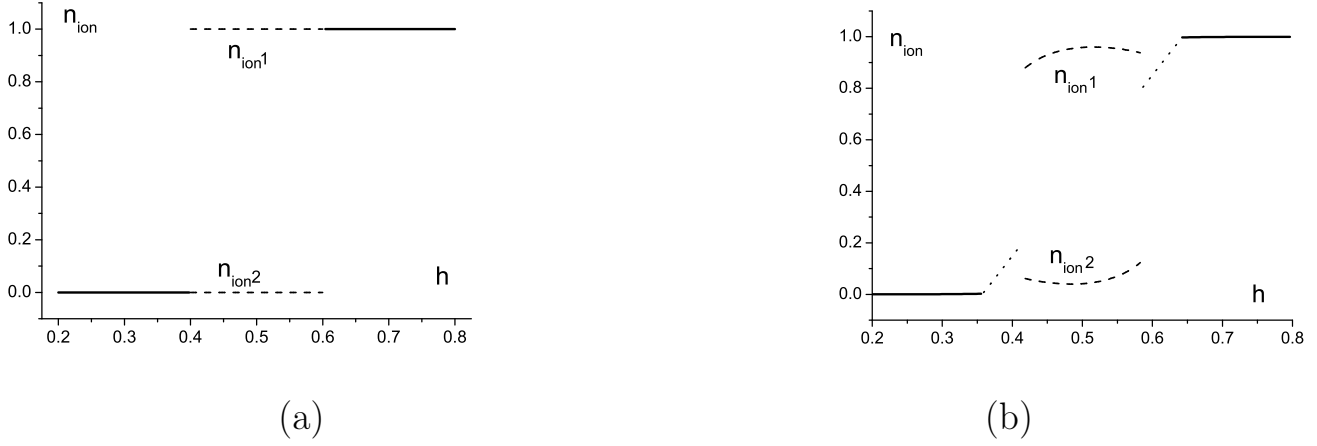


Рис. 3.1. Залежність концентрації іонів від хімічного потенціалу іонів. Значення параметрів: $g = 0.5$, $W = 1$, $\mu = 0$, $T = 0.05$, $\Omega = 0(a)$, $\Omega = 0.3(b)$.

З рис. 3.1 видно, що в системі відбувається фазовий перехід з однорідної в модульовану фазу (n_{ion1} та n_{ion2} - концентрації іонів в двох підгратках модульованої фази). Середні значення $\langle S^x \rangle$ рівні нулю у випадку $\Omega = 0$. При $\Omega \neq 0$ вже існує можливість виникнення фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$. Різка зміна іонної та електронної концентрацій має місце при переході з однорідної в модульовану фазу (відбувається фазовий перехід 1-го роду). Це означає, що у випадку фіксованої концентрації іонів існує фазове розшарування на дві (однорідну та модульовану) фази з різними числами заповнення іонів та електронів [23]. На рисунку 3.2 показано залежність

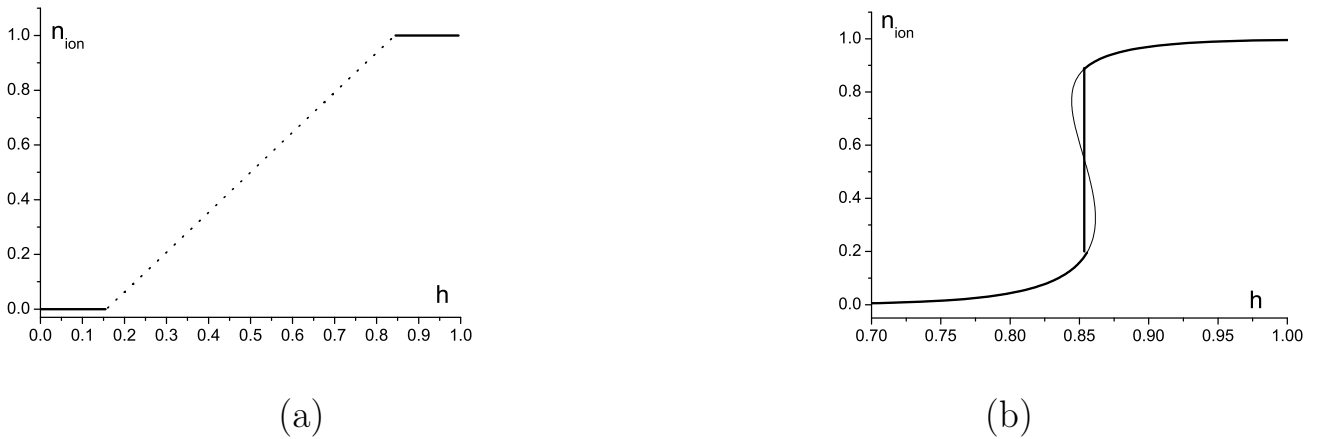


Рис. 3.2. Залежність концентрації іонів від хімічного потенціалу іонів. $g = 0.5$, $W = 1$, $T = 0.05$, $\Omega = 0.5$, $\mu = 0(a)$, $\Omega = 0$, $\mu = 0.6(b)$.

концентрації іонів від хімічного потенціалу іонів для випадків $\mu = 0$, $\Omega = 0.5(a)$ та $\mu = 0.6$, $\Omega = 0(b)$. Видно, що при великих значеннях параметра переносу іонів Ω ,

фазовий перехід в модульовану фазу (та фазове розшарування в режимі фіксованої концентрації) зникає. Разом з тим, коли хімічний потенціал знаходиться біля країв зон, виникає фазовий перехід першого роду між двома однорідними фазами з стрибкоподібною зміною іонної та електронної концентрацій, це показано на рис. 3.2(b).

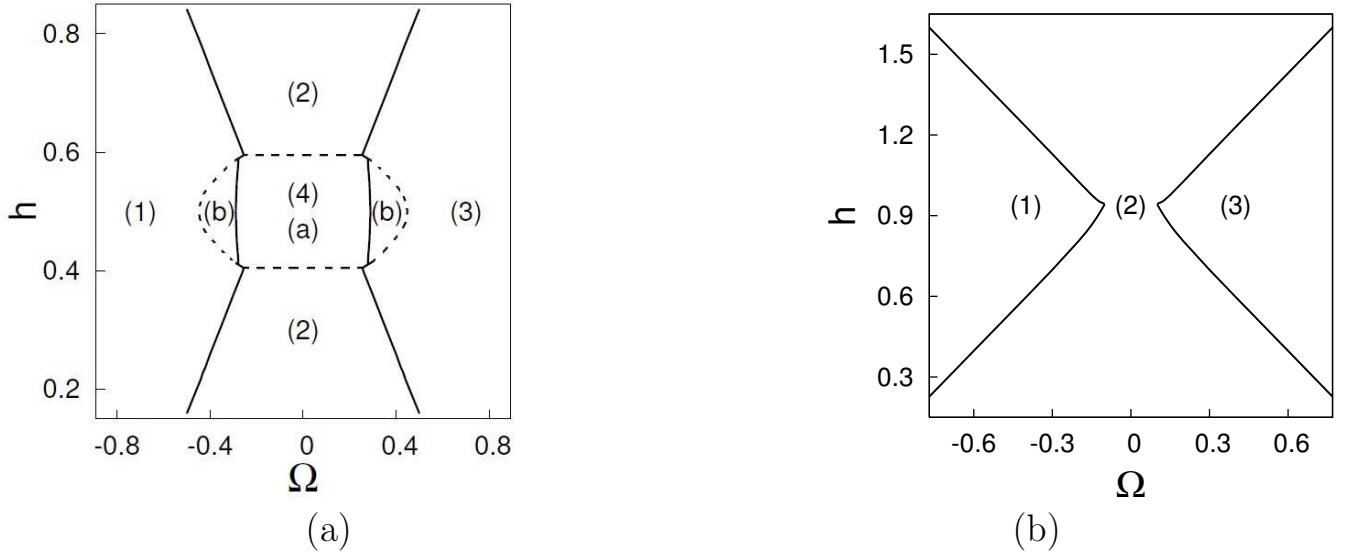


Рис. 3.3. Фазові діаграми на площині (h, Ω) ((a) – $\mu = 0, g = 0.4$, (b) – $\mu = 0.8, g = 0.5$). $W = 1, T = 0.05$. (1), (3) – однорідна фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ ((1): $\langle S_1^x \rangle = \langle S_2^x \rangle$, (3): $\langle S_1^x \rangle = -\langle S_2^x \rangle$); (2) – однорідна фаза з $\langle S^x \rangle = 0$; (4) – модульована фаза ((a): $\langle S_{1,2}^x \rangle = 0$, (b): $\langle S_{1,2}^x \rangle \neq 0$). Тут, і надалі, суцільні лінії відповідають фазовим переходам 2-го роду, штрихові лінії – фазовим переходам 1-го роду.

На рис. 3.3 показано фазові діаграми (h, Ω) для випадку $\mu = 0$ (в центрі зони) та $\mu = 0.8W$ (близько до краю зони). На рис. 3.4 показано фазові діаграми (h, μ) . З рис. 3.3, 3.4 видно, що при більших значеннях параметра переносу іонів Ω (та при достатньому відхиленні параметрів від симетричного значення $h = g$), реалізуються тільки однорідні фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ та $\langle S^x \rangle = 0$. Таким чином, можна зробити висновок, що наявність переносу іонів призводить до зникнення фазових переходів, які супроводжуються стрибкоподібною зміною іонної та електронної концентрації. Нові фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ є подібні до надплинної фази в системі жорстких бозонів. Можливість реалізації такого стану інтеркалянта є

наслідком присутності у гамільтоніані (3.1) першого доданка, який описує міжвузлове перестрибування інтеркальованих частинок. Якщо такий рух має квантову природу (тунелювання легких іонів H^+ , Li^+ , $\dots$), то середнє $\langle S_{i\alpha}^x \rangle$ описує справжній бозе-конденсат і можна говорити про надплинну фазу. У цьому зв'язку фази 4(a) чи 4(b) з $\langle S^x \rangle \neq 0$ можуть мати відношення до суперіонних фаз з аномально великою провідністю у іонних провідниках. Тому для більш ґрунтовного розгляду таких фаз варто було б провести дослідження поведінки провідності та інших статичних і динамічних характеристик.

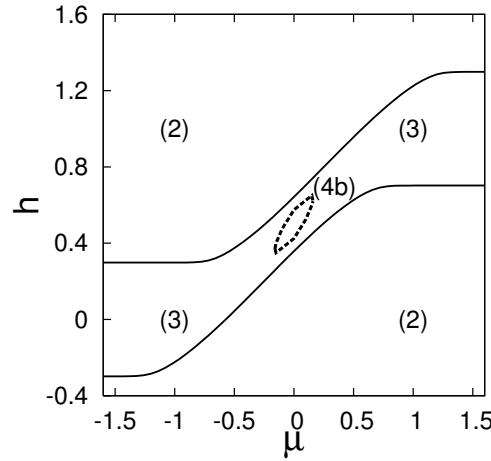


Рис. 3.4. Фазова діаграма на площині (h, μ) , $g = 0.5$, $W = 1$, $T = 0.05$, $\Omega = 0.3$. Позначення такі самі як і на рис. 3.3

3.5. Фазові переходи у випадку інтеркалянта донорного типу ($g < 0$)

Як і раніше, термодинамічно стійкі стани шукались при $g < 0$ з умови мінімуму функції Φ . На рис. 3.5 показано фазові діаграми на площині (h, Ω) для випадків $\mu = 0$ (центр підзони) та $\mu = -0.7W$ (біля нижнього краю зони).

У випадку $\mu = 0$ та при малих значеннях переносу іонів Ω , в системі, як і при $g > 0$, відбувається фазовий перехід першого роду з однорідної в модульовану фазу (в модульованій фазі $n_1 \neq n_2$, $\eta_1 \neq \eta_2$) при зміні хімічного потенціалу іонів (пунктирна лінія на рис. 3.5). У випадку $\mu = -0.7W$ та при малих значеннях

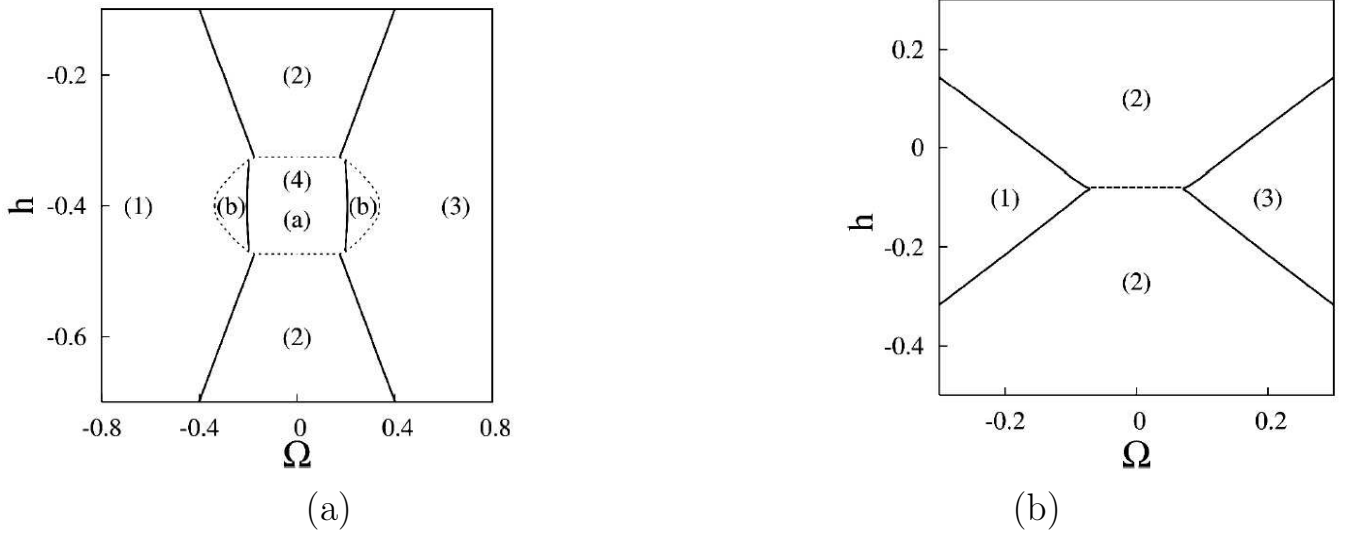


Рис. 3.5. Фазові діаграми на площині (h, Ω) ((a) – $\mu = 0$, (b) – $\mu = -0.7$). $g = -0.4, W = 1, T = 0.03$. (1), (3) – однорідна фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$ ((1): $\langle S_1^x \rangle = \langle S_2^x \rangle$, (3): $\langle S_1^x \rangle = -\langle S_2^x \rangle$); (2) – однорідна фаза з $\langle S^x \rangle = 0$; (4) – модульована фаза ((a): $\langle S_{1,2}^x \rangle = 0$, (b): $\langle S_{1,2}^x \rangle \neq 0$).

Ω , відбувається фазовий перехід першого роду між двома однорідними фазами зі стрибком середньої концентрації іонів та електронів.

Легко бачити, що подібно до випадку $g > 0$, при великих значеннях параметру переносу іонів Ω , реалізуються тільки однорідні фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ та $\langle S^x \rangle = 0$. У випадку $\Omega < 0$ для фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ реалізується $\langle S_1^x \rangle = \langle S_2^x \rangle$, в той час як для $\Omega > 0$ отримуємо $\langle S_1^x \rangle = -\langle S_2^x \rangle$. Фізичний зміст таких фаз був обговорений раніше у п. 3.4.

Перебудову фазової діаграми на площині (h, μ) під впливом перенесення іонів показано на рис. 3.6. Область фази з $\langle S^x \rangle \neq 0$ з'являється тут як проміжна між областями однорідної фази з різними густинами інтеркалянта (див. рис. 3.2).

На рис. 3.7 показано лінію фазових переходів першого роду між двома однорідними фазами зі стрибком концентрацій іонів та електронів (при розташуванні хімічного потенціалу електронів поблизу дна електронної зони). Ця крива закінчується в критичній точці при певному значенні температури T_{cr} . При значеннях Ω , що перевищують порогове, цей фазовий перехід зникає (див. рис. 3.5). Фазова діаграма (T, h) набуває при цьому вигляду, показаного на рис. 3.8, де замість лінії ФП 1-го роду, представлений на рис. 3.7, є проміжна область з однорідною фазою

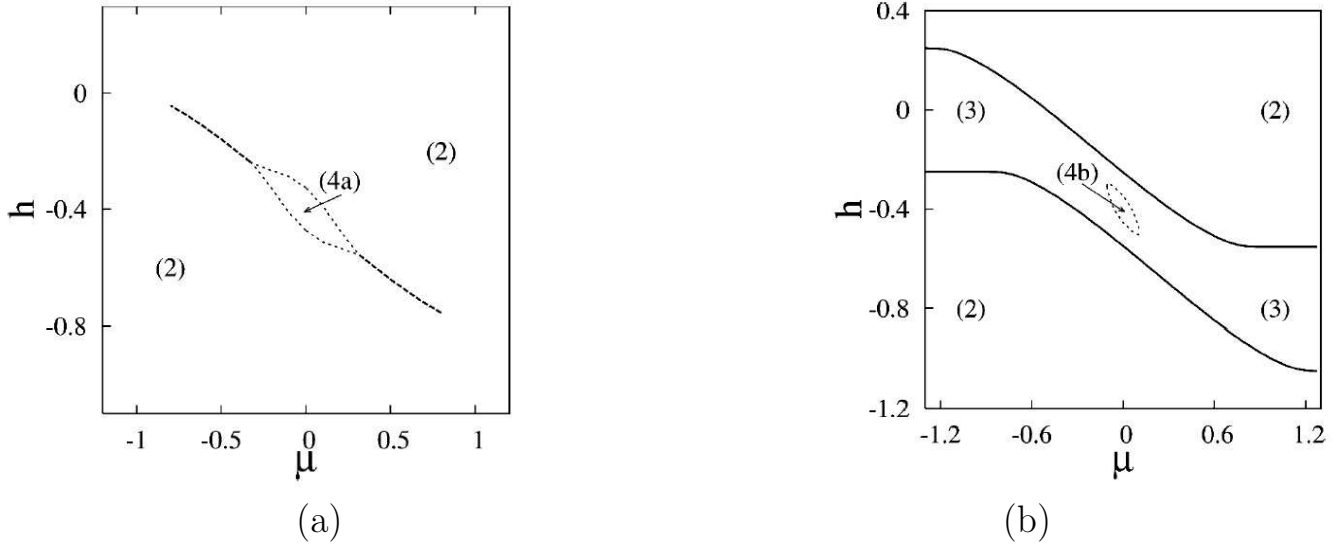


Рис. 3.6. Фазові діаграми на площині (h, μ) ((a) – $\Omega = 0$, (b) – $\Omega = 0.25$). $g = -0.4, W = 1, T = 0.03$.

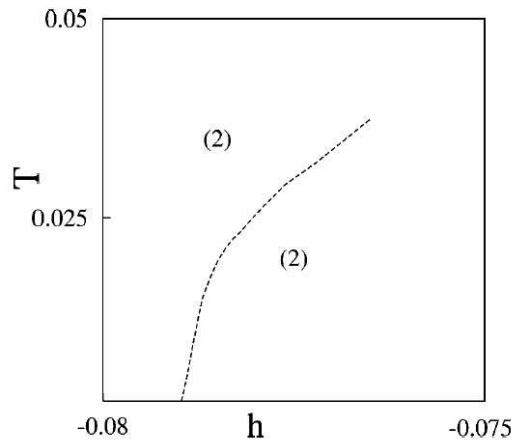


Рис. 3.7. Фазова діаграма на площині (T, h) при $\Omega = 0$. Значення параметрів моделі: $g = -0.4, W = 1, \mu = -0.7$. Позначення такі самі як і на рис. 3.5.

(3), у якій $\langle S_1^x \rangle = -\langle S_2^x \rangle \neq 0$.

Існування фазових переходів 1-го роду у підсистемі інтеркалянта (в режимі фіксованої концентрації вони відповідають розшаруванню на фази з різними концентраціями іонів) підтверджується експериментальними даними для інтеркальованих кристалів, де спостерігалось існування т. зв. бідних і багатих фаз з малою та великою іонними концентраціями (див., наприклад [69]). Наявність модульованої фази в інтеркальованих кристалах також підтверджено експериментально у різних системах (див. огляд [45]).

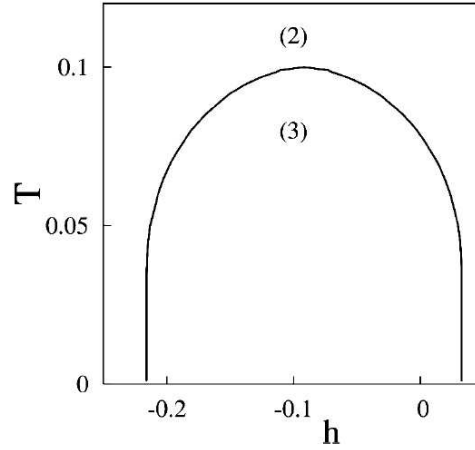


Рис. 3.8. Фазова діаграма на площині (T, h) при $\Omega = 0.2$. Значення параметрів моделі: $g = -0.4, W = 1, \mu = -0.7$.

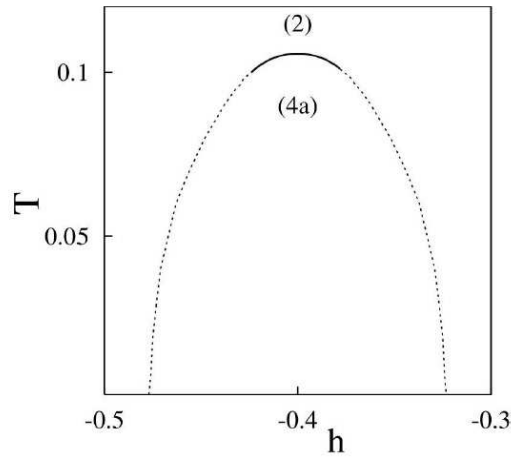


Рис. 3.9. Фазова діаграма на площині (T, h) при $\Omega = 0$. Значення параметрів моделі: $g = -0.4, W = 1, \mu = 0$.

Фазовий перехід з однорідної до модульованої фази може бути як першого так і другого роду, це проілюстровано на рис.3.9 та 3.10 для $\Omega = 0$ та $\Omega = 0.3$ у випадку половинного заповнення електронної зони ($\mu = 0$). Слід звернути увагу на те, що при зростанні температури фазові переходи першого роду змінюються фазовими переходом другого роду і згодом зникають взагалі.

Зауважимо, що зовнішня подібність між фазовими діаграмами для випадків $g > 0$ (відштовхування) та $g < 0$ (притягання) не випадкова. Існує певна симетрія між задачами про термодинаміку, з одного боку донорного та з другого - акцепторного інтеркалянта. Це можна побачити, виконавши електрон-діркове перетворення у гамільтоніані (3.1).

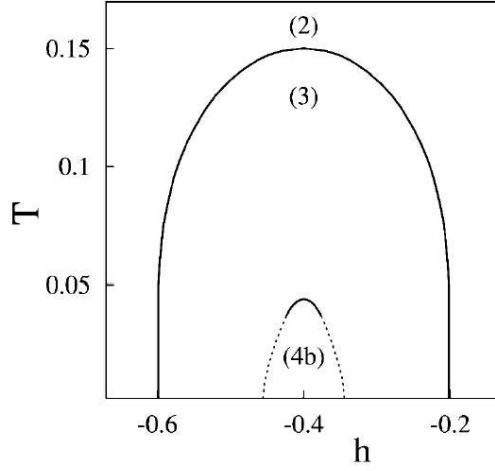


Рис. 3.10. Фазова діаграма на площині (T, h) при $\Omega = 0.3$. Значення параметрів моделі: $g = -0.4, W = 1, \mu = 0$.

Перейдемо від фермі-операторів електронів до фермі-операторів дірок за допомогою унітарного перетворення

$$c_{i\sigma} = d_{i\sigma}^+; \quad c_{i\sigma}^+ = d_{i\sigma}. \quad (3.9)$$

Тоді

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} &= - \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma}, \\ \sum_{i\sigma} g S_i^z n_{i\sigma} &= \sum_{i\sigma} g S_i^z - \sum_{i\sigma} g S_i^z \tilde{n}_{i\sigma}, \\ - \sum_{i\sigma} \mu n_{i\sigma} &= - \sum_{i\sigma} \mu + \sum_{i\sigma} \mu \tilde{n}_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

де $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$; $\tilde{n}_{i\sigma} = d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}$.

Легко бачити, що у дірковому представленні гамільтоніан може бути зведений до вигляду

$$\hat{H}_d = \sum_{ij} \Omega_{ij} S_i^+ S_j^- + \sum_{ij\sigma} \tilde{t}_{ij} d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \tilde{g} S_i^z \tilde{n}_{i\sigma} - \sum_{i\sigma} \tilde{\mu} \tilde{n}_{i\sigma} - \sum_i \tilde{h}_i S_i^z + const \quad (3.11)$$

при чому

$$\tilde{t}_{ij} = -t_{ij}, \quad \tilde{h} = h - 2g, \quad \tilde{g} = -g, \quad \tilde{\mu} = -\mu. \quad (3.12)$$

За своєю формою оператор (3.11) збігається з (3.1), з тим, однак, що параметри взаємодії та хімічні потенціали змінились, вони відповідають діркам і пов'язані

співвідношеннями (3.12) з вихідними. Важливою тут є зміна знаків константи взаємодії g та хімічного потенціалу μ . Якщо електронна задача відповідає притяганню ($g < 0$), то діркова - відштовхуванню ($\tilde{g} > 0$). Заміна параметрів згідно (3.12) ставить у відповідність між собою фазові діаграми, отримані у моделі для донорних та акцепторних домішок.

3.6. Висновки

У цьому розділі продемонстровано інший, у порівнянні з розділом 2, аспект псевдоспін-електронної моделі. Її, як узагальнення моделі ґраткового газу, сформульоване в термінах псевдоспінових змінних, можна використати для опису іонної інтеркаляції в кристалах. Зокрема, ПЕМ може бути застосована для опису інтеркаляції в матеріалах, де електронні зони мають заповнення як металічного так і напівметалічного типу (прикладом є сполуки перехідних металів такі як TiO_2 чи інших подібних систем з вузькою зоною провідності).

Як показано в нашому дослідженні, важлива роль у формуванні рівноважних фазових станів підсистеми інтеркалянта належить можливій делокалізації впроваджених іонів (пов'язаний із стрибкоподібним переміщенням (тунелюванням) між локальними позиціями у ґратці), за яку, у псевдоспіновому представленні відповідає парна взаємодія поперечних компонент псевдоспінів. З другого боку, взаємодія іонів з електронами провідності приводить до появи ефективного притягання або відштовхування між іонами, залежно від заповнення електричних станів (в першому випадку, хімічний потенціал електронів має бути близько до краю зони, другий випадок реалізується близько до половинного заповнення).

Як результат, в системі можуть виникати різні фазові стани; це визначається співвідношеннями між параметрами моделі і залежить також від температури. Можливою є поява, крім однорідної, модульованої фази (з періодичним просторовим розподілом інтеркальованих іонів); такі фази часто спостерігаються на експерименті [43, 69]. Фазові переходи між ними можуть бути як другого, так і першого роду. В останньому випадку це пов'язане із стрибкоподібною зміною

іонної та електронної концентрацій (в режимі фіксованої концентрації має місце фазове розшарування); цей ефект важливий з точки зору практичного застосування інтеркальованих матеріалів як робочих елементів у пристроях накопичення заряду – акумуляторах і батареях [45]. Області існування згаданих фаз та лінії фазових переходів наведено на отриманих фазових діаграмах. З них також видно, що збільшення параметру іонного перенесення приводить до зникнення модульованої фази чи фазового переходу зі стрибком іонної та електронної концентрацій. Додатково, виникає при цьому нова фаза з $\langle S^x \rangle \neq 0$, що є наслідком делокалізації іонів і їх переміщень між вузлами ґратки; ця фаза може існувати для проміжних значень хімічного потенціалу інтеркальованих іонів та перехід до неї є фазовим переходом другого роду. Така фаза є аналогічною до надплинної в системі з жорсткими бозонами чи суперіонної фази в кристалічних іонних провідниках (фази з високою рухливістю іонів).

Зазначимо, що в залежності від знаку константи псевдоспін-електронного зв'язку модель, що задається гамільтоніаном (3.1), може описувати інтеркалянти як донорного (при $g < 0$), так і акцепторного (при $g > 0$) типу. Це відповідає іонізованим домішковим (інтеркальованим) частинкам з додатнім або від'ємним зарядом і є наслідком опускання зони провідності у першому випадку, або піднімання валентної зони у другому (йде мова про енергетичні зони кристалічної матриці “господаря”). У наближенні середнього поля модель (3.1) відповідає т. зв. моделі детермінованих зон, відомій з літератури.

РОЗДІЛ 4

ФАЗОВІ ДІАГРАМИ МОДЕЛІ БОЗЕ-ФЕРМІ-ХАББАРДА: НЕСТІЙКІСТЬ НОРМАЛЬНОЇ (МІ) ФАЗИ

4.1. Вступ

Наступним кроком, у порівнянні з попередніми розділами даної дисертації, є розгляд рівноважних станів та фазових переходів у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда. Ця модель виникла як узагальнення моделі Бозе-Хаббарда у зв'язку з необхідністю опису фізичних властивостей сумішей бозе- і фермі-атомів у оптичних ґратках [2]. Разом з тим, модель БФХ можна трактувати як узагальнення псевдоспін-електронної моделі, доповненої врахуванням взаємодії між поперечними компонентами псевдоспінів (див. розділ 3). Щоб здійснити таке узагальнення, потрібно відмовитись від обмеження на числа заповнення $n_i^B \leq 1$ бозонів у локальних станах, перейшовши від псевдоспін-ових операторів до звичайних операторів народження і знищення частинок. Можна, однак, розглядати модель БФХ у границі жорстких бозонів і тоді у псевдоспін-овому представленні (з $S = 1/2$) вона безпосередньо співвідноситься з ПЕМ. Термодинаміка моделі у такому граничному випадку вивчається у розділах 5 і 6.

В цьому розділі розглядається повна модель БФХ (без обмеження на числа заповнення) та запропоновано спосіб розрахунку кореляційних функцій (функцій Гріна) та середніх бозонної та ферміонної концентрацій. Метод базується на застосуванні операторів Хаббарда, що діють на вузловому базисі станів і є схожим до підходу композитних ферміонів, який запропоновано в [117] (композитні ферміони утворюються ферміонами разом з бозонами або бозонними дірками), але є

більш загальним та універсальним. Вводячи вузлові оператори Хаббарда, можна використати відому техніку, розвинену для розрахунку функцій Гріна, побудованих на цих операторах (наприклад, метод рівнянь руху [8] або діаграмний підхід, що базується на відповідній теоремі Віка [88]). У даному розділі використано перший з них. Ми обмежуємося розрахунком бозонної функції Гріна у випадку нерухомих ферміонів (бозонна функція Гріна розрахована в наближенні хаотичних фаз) та розглядаємо умову нестабільності нормальної фази стосовно появи бозе-конденсату. Отримані таким способом границі між областями існування різних фаз відповідають спінодалям і є, таким чином, лініями переходів 2-го роду. Можливість реалізації в цьому випадку переходів 1-го роду є предметом розгляду в наступних розділах дисертації. Побудувавши фазові діаграми на площинах (T, μ) (температура-хімічний потенціал бозонів) та (W, μ) (параметр переносу бозонів - хімічний потенціал бозонів), ми аналізуємо вплив ферміонів на перехід до надплинної фази при різних співвідношеннях між параметрами моделі. Також наводяться діаграми основного стану моделі у випадках притягання або відштовхування між бозонами та ферміонами.

Області існування надплинної фази (SF) та фази моттівського діелетрика (MI) проаналізовано більш детально у режимі фіксованої концентрації ферміонів. Досліджено також роль термічної активації перескоку частинок, що проявляється у його температурній залежності; проаналізовано перебудову фазових діаграм у цьому випадку.

4.2. Наближення хаотичних фаз

Суміші надхолодних бозонів та ферміонів зі спіновою поляризацією в оптичних ґратках успішно описуються гамільтоніаном Бозе-Фермі-Хаббарда [2]

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{ij} t_{ij} b_i^+ b_j - \sum_{ij} t'_{ij} f_i^+ f_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + U' \sum_i n_i^b n_i^f - \\
 & \mu \sum_i b_i^+ b_i - \mu' \sum_i f_i^+ f_i.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Перший(другий) доданок описує перенесення між найближчими сусідами бозонів (ферміонів); параметри t (t') визначають амплітуду тунелювання бозонів (ферміонів). Третій та четвертий доданки - це, відповідно одновузлова бозон-бозонна та бозон-ферміонна взаємодії. Останні два доданки включають хімічні потенціали бозонів та ферміонів, що введені задля можливості змінювати середню концентрацію цих частинок.

Першим кроком означимо наступний одновузловий базис

$$(n_i^b = n; n_i^f = 0) \equiv |n, i\rangle; \quad (n_i^b = n; n_i^f = 1) \equiv |\tilde{n}, i\rangle, \quad (4.2)$$

де n_i^b чи n_i^f це число бозонів чи ферміонів на вузлі i .

Тепер можна ввести оператори Хаббарда $X_i^{nm} = |n, i\rangle\langle m, i|$, $X_i^{\tilde{n}\tilde{m}} = |\tilde{n}, i\rangle\langle\tilde{m}, i|$, і т. д. В результаті, оператори народження та знищення бозе- та фермі-частинок можуть бути записані як

$$\begin{aligned} b_i &= \sum_n \sqrt{n+1} X_i^{n,n+1} + \sum_n \sqrt{\tilde{n}+1} X_i^{\tilde{n},\tilde{n}+1}, \\ b_i^+ &= \sum_n \sqrt{n+1} X_i^{n+1,n} + \sum_n \sqrt{\tilde{n}+1} X_i^{\tilde{n}+1,\tilde{n}}, \\ n_i^b &= \sum_n n X_i^{nn} + \sum_{\tilde{n}} \tilde{n} X_i^{\tilde{n}\tilde{n}}, \quad n_i^f = \sum_n X_i^{\tilde{n}\tilde{n}}, \\ a_i &= \sum_n X_i^{n,\tilde{n}}, \quad a_i^+ = \sum_n X_i^{\tilde{n},n}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

В такому представленні вихідний гамільтоніан отримує вигляд

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1^b + H_1^f, \\ H_0 &= \sum_{in} \lambda_n X_i^{nn} + \sum_{i\tilde{n}} \lambda_{\tilde{n}} X_i^{\tilde{n}\tilde{n}}, \\ \lambda_n &= \frac{U}{2} n(n-1) - \mu n, \quad \lambda_{\tilde{n}} = \frac{U}{2} \tilde{n}(\tilde{n}-1) - \mu\tilde{n} - \mu' + U'\tilde{n}, \\ H_1^b &= \sum_{ij} t_{ij} b_i^+ b_j, \quad H_1^f = \sum_{ij} t'_{ij} a_i^+ a_j. \end{aligned} \quad (4.4)$$

У цьому представленні одновузлова частина H_0 стає діагональною і може відігравати роль незбуреної частини всього гамільтоніана для випадків, коли використовується розклад за степенями параметрів перенесення в такого типу моделях [17].

В нашій роботі ми використовуємо метод рівнянь руху. Для знаходження двочасової функції Гріна $G_{ij}(t - t') = \langle \langle b_i(t) | b_j^\dagger(t') \rangle \rangle$ записуємо рівняння для фур'є-образу її складової частини

$$\omega \langle \langle X_l^{m,m+1} | X_p^{r+1,r} \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi} \delta_{lp} \delta_{mr} \langle X_l^{mr} - X_l^{r+1,m+1} \rangle + \langle \langle [X_l^{m,m+1}, \hat{H}] | X_p^{r+1,r} \rangle \rangle. \quad (4.5)$$

Використовуємо наближення хаотичних фаз (яке є аналогічним до наближення Хаббард-I у випадку ферміонної моделі Хаббарда та базовим для звичайної моделі Бозе-Хаббарда, див. [82, 90]) та виконуємо таке розчеплення:

$$\begin{aligned} \langle \langle (X_l^{m,m} - X_l^{m+1,m+1}) b_j | X_p^{r+1,r} \rangle \rangle &\approx \langle X_l^{m,m} - X_l^{m+1,m+1} \rangle \langle \langle b_j | X_p^{r+1,r} \rangle \rangle, \\ \langle \langle b_i^\dagger X_l^{m,m+2} | X_r^{r+1,r} \rangle \rangle &\approx 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Таке наближення є застосовне у випадку $\langle b_i \rangle = 0$, що відповідає нормальній фазі (так званій фазі моттівського діелектрика (MI)). Комутатори $[X^{mn}, H]$ таким чином запишуться:

$$\begin{aligned} [X_l^{m,m+1}, \hat{H}] &= \Delta_m X_l^{m,m+1} + \sum_j t_{lj} \sqrt{m+1} Q_m b_j - \sum_j t'_{lj} X_l^{\tilde{m},m+1} a_j \\ &\quad + \sum_i t'_{il} a_i^\dagger X_l^{m,\tilde{m}+1}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} [X_l^{\tilde{m},\tilde{m}+1}, \hat{H}] &= \Delta_{\tilde{m}} X_l^{\tilde{m},\tilde{m}+1} + \sum_j t_{lj} \sqrt{\tilde{m}+1} Q_{\tilde{m}} b_j + \sum_j t'_{lj} X_l^{\tilde{m},m+1} a_j \\ &\quad - \sum_i t'_{il} a_i^\dagger X_l^{m,\tilde{m}+1}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

де $\Delta_m = \lambda_{m+1} - \lambda_m$ ($\Delta_{\tilde{m}} = \lambda_{\tilde{m}+1} - \lambda_{\tilde{m}}$) - відстань між одновузловими рівнями

енергій, та $Q_m = \langle X^{m,m} - X^{m+1,m+1} \rangle$ ($Q_{\tilde{m}} = \langle X^{\tilde{m},\tilde{m}} - X^{\tilde{m}+1,\tilde{m}+1} \rangle$) - різниця середніх заповненостей цих рівнів.

В подальшому розглядається випадок нерухомих ферміонів, для якого $t'_{ij} = 0$. Використовуючи співвідношення (4.3), можна записати рівняння для функції Гріна $\langle\langle b_l | X_p^{r,r+1} \rangle\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\langle b_l | X_p^{r,r+1} \rangle\rangle &= \sum_m \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{lp} \delta_{mr} \sqrt{m+1} \frac{Q_m}{\omega - \Delta_m} + \sum_m \frac{Q_m(m+1)}{\hbar\omega - \Delta_m} \sum_j t_{lj} \langle\langle b_j | X_p^{r+1,r} \rangle\rangle \\ &+ \sum_{\tilde{m}} \frac{Q_{\tilde{m}}(\tilde{m}+1)}{\omega - \Delta_{\tilde{m}}} \sum_j t_{lj} \langle\langle b_j | X_p^{r+1,r} \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Рівняння для функції $\langle\langle b_j | X_p^{\tilde{r},\tilde{r}+1} \rangle\rangle$ має подібний вигляд.

Переходимо до $\mathbf{k}$ -представлення та вводимо назбурену функцію Гріна

$$g^0(\omega) = \sum_m \left[\frac{Q_m(m+1)}{\omega - \Delta_m} + \frac{Q_{\tilde{m}}(\tilde{m}+1)}{\omega - \Delta_{\tilde{m}}} \right]. \quad (4.10)$$

В результаті, використовуючи співвідношення (4.3), отримаємо для функції Гріна $G_{\mathbf{k}}(\omega)$

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{g^0(\omega)}{1 - g^0(\omega)t_{\mathbf{k}}}. \quad (4.11)$$

Дана формула для бозонної функції Гріна дозволяє дослідити вплив ферміонів на стійкість нормальної фази та визначити умови появи бозе-конденсату в змішаній ґратковій бозон-ферміонній системі.

4.3. Нестійкість нормальної фази та фазові діаграми

Перш за все побудуємо діаграми основного стану системи на площині (μ', μ) , використавши незбурену частину гамільтоніана H_0 (в цьому випадку середні від операторів Хаббарда визначаються як $\langle X^{mm} \rangle = \frac{1}{Z} e^{-\beta\lambda_m}$, $\langle X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle = \frac{1}{Z} e^{-\beta\lambda_{\tilde{m}}}$, де $Z = \sum_m e^{-\beta\lambda_m} + \sum_{\tilde{m}} e^{-\beta\lambda_{\tilde{m}}}$).

На рис 4.1 та 4.2, показано діаграми що визначають основний стан ($T = 0$) бозон-ферміонної суміші при $t = t' = 0$ та різних значення параметрів U та U' . Як видно, у порівнянні з моделю Бозе-Хаббарда (де присутні тільки вертикальні лінії при значеннях μ кратних до U), у цьому випадку виникають нові області. Нахилені лінії розділяють стани $|m\rangle$ та $|\tilde{n}\rangle$ з різними числами заповнення бозонів та ферміонів. Загальний вигляд діаграм залежить від знаку константи бозон-ферміонної взаємодії. На такий ефект було також вказано в роботі [117] у зв'язку з дослідження композитних ферміонів. Отримані діаграми основного стану вказують на ті

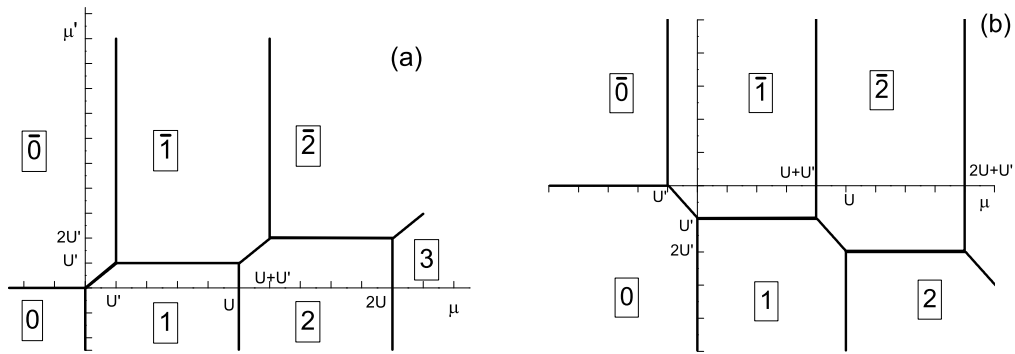


Рис. 4.1. Діаграми основного стану для $0 < U' < U$ (a) та $-U < U' < 0$ (b).

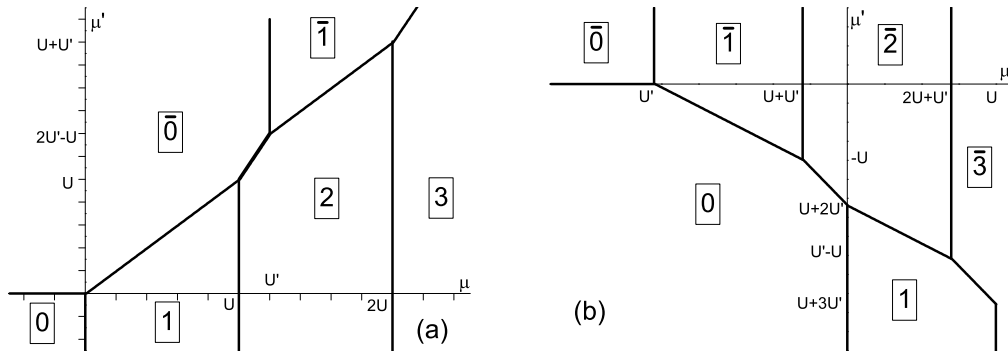


Рис. 4.2. Діаграми основного стану для $U < U' < 2U$ (a) та $-2U < U' < -U < 0$ (b).

області у просторі (μ, μ') , де при $t \neq 0$ може виникати бозе-конденсат. Це відбувається там, де змінюється число бозонів, тобто в околі вертикальних ліній (які розмежовують області з основними станами $|n\rangle$ і $|n+1\rangle$ та $|\tilde{n}\rangle$ і $|\tilde{n}+1\rangle$), а також

нахилених ліній (що є граничним між станами $|\tilde{n}\rangle$ і $|n+1\rangle$ при $U' > 0$, та $|n\rangle$ і $|\tilde{n}+1\rangle$ при $U' < 0$).

При подальшому аналізі обмежимося у цьому розділі розглядом нестійкості нормальної фази, пов'язаної із спонтанним порушенням симетрії і появою аномального середнього $\langle b_i \rangle = \langle b_i^+ \rangle \neq 0$, яке має зміст параметра порядку для бозе-конденсату. Фазовий перехід другого роду, що пов'язаний з такою нестійкістю, з фази моттівського діелектрика до надплинної фази, характеризується розбіжністю функції Гріна $G_{\mathbf{k}=0}(\omega=0) \rightarrow \infty$; це приводить до рівняння

$$1 = t_0 \sum_m \left(\frac{Q_m(m+1)}{\Delta_m} + \frac{Q_{\tilde{m}}(\tilde{m}+1)}{\Delta_{\tilde{m}}} \right). \quad (4.12)$$

Ця умова у випадку $t > 0$ (що тут розглядається) виконується в центрі $\mathbf{k} = 0$ зони Бріллюена (випадок однорідної надплинної фази). Варто зазначити, що при $T \rightarrow 0$ рівняння (4.12) відповідає отриманому в [117] в рамках теорії середнього поля.

На рис. 4.3, 4.4 та рис. 4.5, показано фазові діаграми (W, μ) (тут W це половина ширини вихідної бозонної енергетичної зони, $-W < t_{\mathbf{k}} < W$) у випадках фіксованої концентрації ферміонів та фіксованого хімічного потенціалу ферміонів. Подібно до чистої моделі Бозе-Хаббарда, області, де фаза МІ є стабільною, мають форму куполів, проте в загальному, форма кривих розділення фаз більш складна.

На рис. 4.4 та 4.5а, показано фазові діаграми (W, μ) для різних значень вузлової взаємодії між бозонами та ферміонами U' та середніх чисел заповнення для ферміонів n^f . В границі $T \rightarrow 0$ відповідні фазові діаграми були отримані в роботі [117]. Для порівняння наведено діаграми, що відповідають як випадку відштовхування ($U' > 0$) так і притягання ($U' < 0$) між бозонами та ферміонами. Видно, що у першому випадку бозе-конденсат виникає в присутності ферміонів при вищих значеннях бозонної константи тунелювання; у другому випадку спостерігаємо протилежну залежність.

Наявність більше ніж одного купола з фазою моттівського діелектрика в областях значень $n < \mu/U < n+1$ є характерною особливістю моделі Бозе-

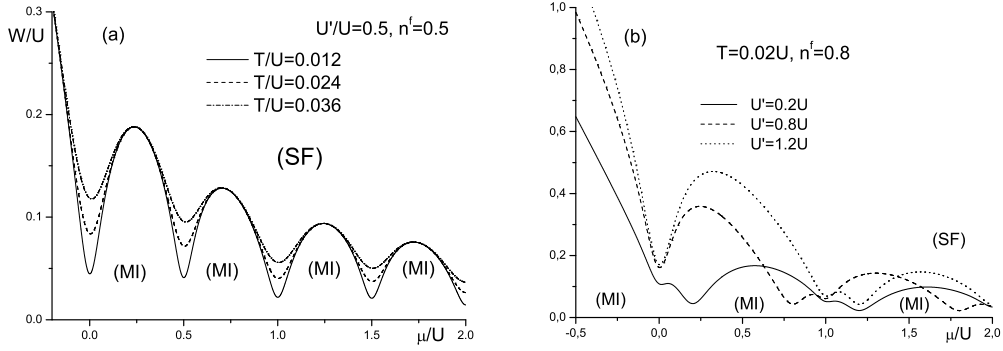


Рис. 4.3. (W, μ) фазові діаграми. а) Випадок різних температур при $U'/U = 0.5, n^f = 0.5$. б) Випадок різних величин параметру бозон-ферміонної взаємодії при $T/U = 0.02, n^f = 0.8$.

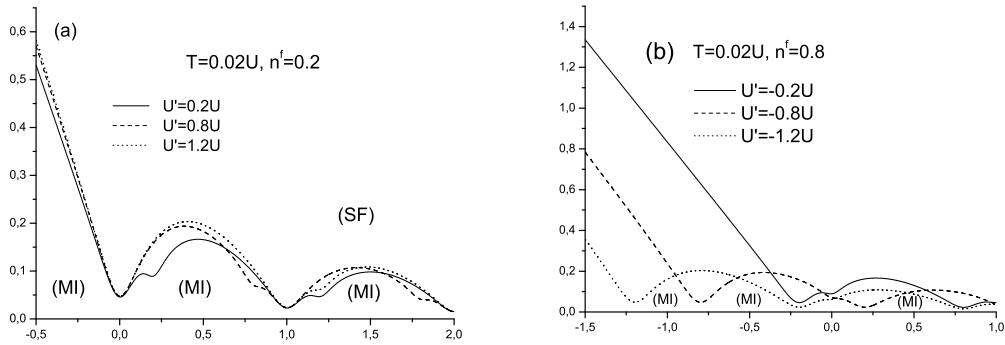


Рис. 4.4. (W, μ) фазові діаграми для різних значень U' та n^f . а) $n^f = 0.2$, б) $n^f = 0.8$.

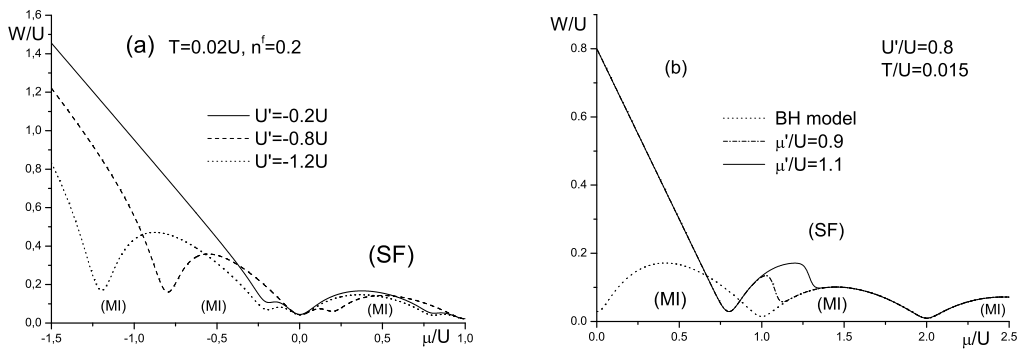


Рис. 4.5. (W, μ) фазові діаграми. а) Випадок фіксованого числа ферміонів при різних значеннях U' , б) Випадок фіксованого хімічного потенціалу ферміонів.

Фермі-Хаббарда в порівнянні з моделлю Бозе-Хаббарда (коли існує тільки один купол з фазою МІ у кожній із згаданих областей значень хімічного потенціалу бо-

зонів). Розміщення додаткових куполів залежить від величини бозон-ферміонної взаємодії; їх межі узгоджуються з розміщенням вертикальних ліній при $U' > 0$ на діаграмах основного стану (рис. 4.1 та 4.2), де має місце нестабільність пов'язана з появою бозе-конденсату у присутності ферміонів. Висота цих куполів залежить від концентрації ферміонів.

В режимі фіксованого хімічного потенціалу ферміонів (див. рис. 4.5b) відбувається перебудова куполів МІ в області значень хімічного потенціалу μ , що відповідають перетину лінії $\mu' = \text{const}$ з нахиленими лініями меж розділяючих області з різними одновузловими заповненнями ферміонів та бозонів на діаграмах основного стану (див. 4.1 та 4.2). Зліва від цього перетину бозе-конденсат з'являється в границі $T \rightarrow 0$ при $\mu \sim U', U + U', 2U + U', \dots$ в той час коли зправа він винає при $\mu = 0, U, 2U, \dots$

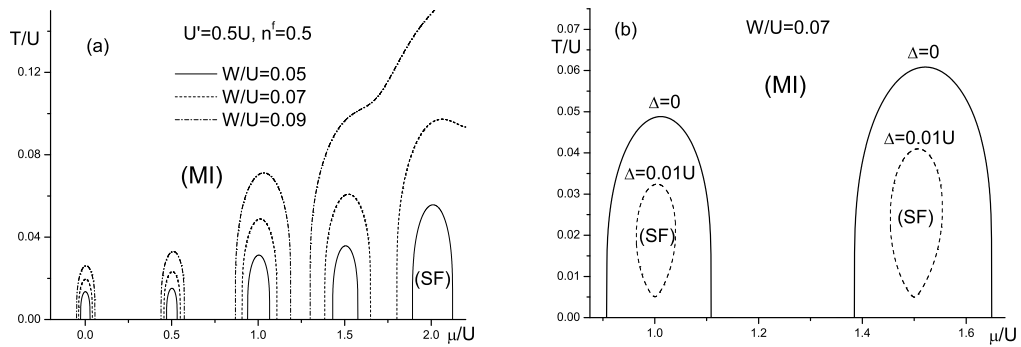


Рис. 4.6. (T, μ) фазові діаграми $U' = 0.5U, n^f = 0.5$. а) $\Delta = 0$, б) $\Delta = 0.01U$.

Фазові діаграми (T, μ) показано на рис. 4.6. В порівнянні з чистою моделлю Бозе-Хаббарда (див. наприклад [90]) критична температура переходу в SF фазу в присутності ферміонів нижча (крім того, що виникають нові області з SF фазою; при $U'/U=0,5$ вони зосереджені біля півцілих значень відношення μ/U). Також розглянуто діаграму (T, μ) для випадку температурної активації перенесення бозонів. Можливість цього розглянута в [90], в рамках застосування моделі БХ до іонних провідників. Параметр бозонного (іонного у випадку іонних провідників) перенесення визначається тут як: $t = t_0 \exp(-\beta\Delta)$; цей вираз може бути отриманий як результат перенормування під впливом взаємодії з фононами, чи внаслідок

надбар'єрних перестрибувань. Температурна активація призводить до збільшення області фази з моттівським діелектриком. При зростанні енергії активації область існування НП фази звужується і згодом зникає. У режимі фіксованого хімічного потенціалу бозонів (та фіксованого значення числа ферміонів) існують дві критичні температури, при яких відбувається фазовий перехід з фази MI в SF. Схожий ефект відбувається і у випадку моделі Бозе-Хаббарда; як було показано в [90]; нижча критична температура може бути пов'язана з переходом системи до суперіонного стану в кристалі з суперіонною провідністю.

4.4. Висновки

У даному розділі досліджено рівноважні стани та фазові переходи у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда, яку використовують для опису фізичних властивостей бозон-ферміонних сумішей у оптичних ґратках. В доповнення до попередніх теоретичних досліджень у цій області [2, 98], віднесених до абсолютного нуля температури, розглянуто термодинаміку моделі БФХ у випадку $T \neq 0$. Застосований нами підхід ґрунтується на встановленні умов стабільності нормальної (MI) фази відносно появи бозе-конденсату та визначення точок переходу до SF фази, виходячи з відомого критерію розбіжності бозонної функції Гріна $\langle\langle b|b^+ \rangle\rangle_{q,\omega}$ при $\omega = 0$, $\vec{q} = 0$ [90]. Таким способом побудовано лінії спінодалей, які одночасно є лініями фазових переходів 2-го роду.

Для розрахунку бозонної функції Гріна запропоновано підхід, що базується на використанні формалізму операторів Хаббарда, які діють на повному одновузовому базисі станів (останній задається набором чисел заповнення бозонів і ферміонів).

При обмеженні випадком локалізованих ("важких") ферміонів ($t_f = 0$) отримано вираз для бозонної функції Гріна в рамках наближення хаотичних фаз. Нестабільність нормальної фази щодо переходу у фазу з надплинністю розглянуто при різних значеннях концентрації ферміонів та константи бозон-ферміонної взаємодії. Отримані результати подано у вигляді фазових діаграм на площині (W, μ) ,

побудованих при різних температурах, значеннях константи бозон-ферміонної взаємодії (як додатніх, так і від’ємних, що відповідає випадкам відштовхування або притягання), а також різним концентраціям ферміонів. Характерною рисою таких діаграм є наявність (як і для звичайної моделі Бозе-Хаббарда [90]) послідовності куполів вздовж осі μ , що обмежують області МІ фази. Переходи між куполами згладжуються при зростанні T , в той час як їх розташування змінюється залежно від концентрації ферміонів. Якісно цей ефект можна пояснити, розглядаючи розташування вертикальних ліній, що розмежовують на діаграмах основного стану (одержаних при $t = t' = 0$) сусідні області з числом бозонів n і $n + 1$ (саме в околі цих ліній, тобто при $\mu \approx 0, U', U, U + U', 2U, 2U + U', \dots$, з’являється при $t \neq 0$ SF фаза, якщо переміщатись у випадку нецілих $\bar{n}_F = n'$ вздовж ламаної лінії, що відділяє заповнені ферміонами стани від незаповнених). Це добре видно з фазових діаграм (T, μ) , (див. рис. 4.6). На них проілюстровано також ефект “відриву” від осі абсцис областей SF фази, якщо задати активаційний механізм перенесення бозонів. При зміні T надплинна фаза існує у цьому випадку як проміжна.

Потрібно разом з тим зауважити, що побудова фазових діаграм, виходячи із спінодалей, дає розташування кривих фазових переходів 2-го роду при умові, що такі переходи справді можуть відбуватися. Більш повний аналіз повинен ґрунтуватись у цьому випадку на дослідженні поведінки термодинамічних функцій (великого термодинамічного потенціалу у випадку ансамблю із змінним числом частинок). Це зроблено для моделі БФХ у розділах 5 і 6 дисертації, де виявлено, що при заданих хімічних потенціалах бозонів і ферміонів фазові МІ-SF переходи можуть змінювати свій рід з 2-го на 1-ий, і встановлено відповідні умови.

РОЗДІЛ 5

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В МОДЕЛІ БОЗЕ-ФЕРМІ-ХАББАРДА В ГРАНИЦІ ВАЖКИХ ФЕРМІОНІВ ТА ЖОРСТКИХ БОЗОНІВ У ВИПАДКУ $T = 0$

5.1. Вступ

У даному розділі ми зосередимось на більш детальному вивченні термодинаміки моделі БФХ, обмежуючись випадком жорстких бозонів. Як було показано в розділі 4, перебудова фазових діаграм, що відбувається під впливом ферміонної підсистеми у порівнянні з діаграмами для чистої моделі БХ, є досить складною і потребує більш детального аналізу. Її легше дослідити, якщо включити в розгляд лише скінченне число одновузлових станів $|n_i^B, n_i^F\rangle$. Для жорстких бозонів і безспінових ферміонів таких станів чотири; в результаті приходимо до 4-станової моделі, термодинаміку якої в границі $T \rightarrow 0$ можна дослідити навіть аналітично.

Ще одне завдання, яке тут ставиться, пов'язане з переходом до термодинамічного режиму фіксованих хімічних потенціалів як бозонів μ , так і ферміонів (μ'). До цього часу більшість теоретичних досліджень моделі БФХ проводилась для заданої концентрації ферміонів n_F (тобто фіксованих μ і n_F). Разом з тим, як показано у даному розділі, при заданні певних значень μ' ми отримуємо можливість виявити тенденцію до зміни роду фазового переходу до надплинної фази (з другого на перший) та описати фазове розшарування, яке настає у цьому випадку при фіксації концентрації частинок. Слід також відзначити, що режим певних значень μ і μ' є таким, що відповідає реальній ситуації у пастках, де існує зовнішнє поле з потенціальним рельєфом, який забезпечує утримання частинок у

обмеженій області простору.

Нашою метою є більш детальний розгляд термодинаміки згаданої чотиристанової моделі при обмеженні випадком “важких” ферміонів (тобто при критично малому значенню параметра переносу ферміонів t_F). Такий випадок частково був розглянутий в [109, 116]. Було показано, зокрема, що заморожені ферміони як зафіксована система, коли $t_F = 0$, можуть перешкоджати виникненню далекосяжних кореляцій надплинного типу та появи бозе-конденсату. Проте існує критична концентрація ферміонів, нижче якої це явище відсутнє (для $d = 2$, $\bar{n}_p^{crit} \sim 0,59$; для $d = 3$, $\bar{n}_p^{crit} \sim 0,31$; див. [109]).

Розглядаємо рівноважний випадок, припускаючи, що t_F набуває малих значень, але не настільки малих щоб отримати стан типу скла [96, 142, 143]. Використовується наближення середнього поля, враховуючи разом з тим точно міжчастинкові взаємодії в дусі підходу сильних кореляцій. Виходячи з умов термодинамічної рівноваги, проводимо аналіз переходу MI-SF, не обмежуючись критерієм стабільності нормальної (MI) фази для знаходження точки переходу. Розрахунки проводяться в режимі фіксованого хімічного потенціалу бозонів μ_B та ферміонів μ_F при $T = 0$. Проаналізовано поведінку параметру порядку бозе-конденсату та термодинамічного потенціалу як функцій хімічного потенціалу бозонів при нульовій температурі. Будуються відповідні фазові діаграми, що беруть до уваги можливість зміни роду фазового переходу з другого на перший. Розгляд обмежено випадком одновузлової взаємодії між жорсткими бозонами та ферміонами типу відштовхування ($U_{BF} > 0$).

5.2. Чотиристанова модель

Гамільтоніан моделі Бозе-Фермі-Хаббарда записуємо як і у розділі 4:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{U}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + U' \sum_i n_i^b n_i^f - \mu \sum_i n_i^b - \mu' \sum_i n_i^f \\
 & + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Тут U та U' константи бозон-бозонної та бозон-ферміонної взаємодії; μ та μ' - хімічні потенціали бозонів та ферміонів відповідно (ми розглядаємо у даному розділі випадок відштовхувальних взаємодій $U > 0, U' > 0$) та t, t' амплітуди тунелювання бозонів (ферміонів), що описують перенос бозонів (ферміонів) між сусідніми вузлами ґратки. Ферміони вважаються безспіновими, що на практиці відповідає спін-поляризованій системі частинок.

Використаємо запроваджений раніше одновузловий базис:

$$(n_i^b = n; n_i^f = 0) \equiv |n, i\rangle; \quad (n_i^b = n; n_i^f = 1) \equiv |\tilde{n}, i\rangle, \quad (5.2)$$

де $n_i^b(n_i^f)$ - числа заповнення бозонів (ферміонів) на вузлі i .

У представленні через оператори Хаббарда на базисі (5.2) гамільтоніан (5.1) має вигляд

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1^b + H_1^f, \\ H_0 &= \sum_{i,n} \lambda_n X_i^{nn} + \sum_{i,\tilde{n}} \lambda_{\tilde{n}} X_i^{\tilde{n}\tilde{n}}, \\ \lambda_n &= \frac{U}{2}n(n-1) - n\mu, \quad \lambda_{\tilde{n}} = \frac{U}{2}\tilde{n}(\tilde{n}-1) - \mu\tilde{n} - \mu' + U'\tilde{n}, \\ H_1^b &= \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j, \quad H_1^f = \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j. \end{aligned} \quad (5.3)$$

В подальшому обмежимося наближенням жорстких бозонів ($U \rightarrow \infty$), у якому існує обмеження на число заповнення бозонів $n_i^b \leq 1$. Одновузловий $|n_i^b, n_i^f\rangle$ базис у цьому випадку складається з чотирьох станів:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |0, 0\rangle, & |\tilde{0}\rangle &= |0, 1\rangle, \\ |1\rangle &= |1, 0\rangle, & |\tilde{1}\rangle &= |1, 1\rangle. \end{aligned} \quad (5.4)$$

В цій границі, виходячи з (4.3), маємо

$$b_i = X_i^{01} + X_i^{\tilde{0}\tilde{1}}, \quad b_i^+ = X_i^{10} + X_i^{\tilde{1}\tilde{0}}$$

$$\begin{aligned} a_i &= X_i^{0\tilde{0}} + X^{1\tilde{1}}, & a_i^+ &= X_i^{\tilde{0}0} + X^{\tilde{1}1}, \\ n_i^b &= X_i^{11} + X_i^{\tilde{1}\tilde{1}}, & n_i^f &= X_i^{\tilde{0}\tilde{0}} + X_i^{\tilde{1}\tilde{1}}; \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_1 = -\mu, \quad \lambda_{\tilde{0}} = -\mu', \quad \lambda_{\tilde{1}} = -\mu - \mu' + U'; \quad (5.6)$$

та у виразі (5.3) для гамільтоніана системи діє обмеження на числа заповнення $n = 0, 1$ та $\tilde{n} = \tilde{0}, \tilde{1}$.

Як було вже згадано, ми розглядаємо так званий випадок важких ферміонів, коли виконуються нерівності $t' \ll t, t' \ll U'$. Метою є вивчення умов, при яких в таких системах має місце перехід MI-SF у випадку, коли перенесенням ферміонів між вузлами можна знехтувати. Припустивши це, отримаємо гамільтоніан:

$$\hat{H} = \sum_i \left(\lambda_0 X_i^{00} + \lambda_1 X_i^{11} + \lambda_{\tilde{0}} X_i^{\tilde{0}\tilde{0}} + \lambda_{\tilde{1}} X_i^{\tilde{1}\tilde{1}} \right) + \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j. \quad (5.7)$$

5.3. Наближення середнього поля

Введемо параметр порядку для бозе-конденсату $\varphi = \langle b_i \rangle = \langle b_i^+ \rangle$. У наближенні середнього поля (НСП), яке буде використане далі при аналізі термодинаміки моделі,

$$\begin{aligned} b_i^+ b_j &\rightarrow \varphi(b_i^+ + b_i) - \varphi^2, \\ \sum_{ij} t_{ij} b_i^+ b_j &= \varphi t_0 \sum_i (b_i^+ + b_i) - N t_0 \varphi^2, \end{aligned} \quad (5.8)$$

(тут $t_0 = \sum t_{ij} = -|t_0|, t_0 < 0$).

Тоді, для гамільтоніана (5.7) після виділення середньопольової частини отримаємо:

$$H = H_{MF} + \sum_{ij} t_{ij} (b_i^+ - \varphi)(b_i - \varphi), \quad (5.9)$$

тут

$$H_{MF} = \sum_i H_i - N t_0 \varphi^2; \quad H_i = \sum_{pr} H_{pr} X_i^{pr}; \quad (5.10)$$

та

$$||H_{pr}|| = \left(\begin{array}{cccc|c} |0\rangle & |1\rangle & |\tilde{0}\rangle & |\tilde{1}\rangle & \\ \hline 0 & t_0\varphi & 0 & 0 & |0\rangle \\ t_0\varphi & -\mu & 0 & 0 & |1\rangle \\ 0 & 0 & -\mu' & t_0\varphi & |\tilde{0}\rangle \\ 0 & 0 & t_0\varphi & -\mu - \mu' + U' & |\tilde{1}\rangle \end{array} \right). \quad (5.11)$$

Наступним кроком є діагоналізація даної матриці

$$\hat{U}^T * \hat{H} * \hat{U} = \hat{\tilde{H}}, \quad (5.12)$$

де : $\hat{U} = \begin{pmatrix} \hat{U}_1 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{U}_2 \end{pmatrix},$

та:

$$\hat{U}_1 = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi \\ \sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix}, \hat{U}_2 = \begin{pmatrix} \cos \tilde{\psi} & -\sin \tilde{\psi} \\ \sin \tilde{\psi} & \cos \tilde{\psi} \end{pmatrix}.$$

Тут

$$\begin{aligned} \sin 2\psi &= \frac{t_0\varphi}{\sqrt{\mu^2/4 + t_0^2\varphi^2}}, \\ \sin 2\tilde{\psi} &= \frac{t_0\varphi}{\sqrt{(U' - \mu)^2/4 + t_0^2\varphi^2}}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Таким чином, ми отримуємо діагональну одновузлову частину (що є такою ж як і середньопольова) гамільтоніана:

$$\hat{H}_i = \sum_{p'} \varepsilon_{p'} X_i^{p'p'} - N t_0 \varphi^2, \quad (5.14)$$

де $p' = 0', 1', \tilde{0}', \tilde{1}'$ індекси, що визначають стани на новому базисі,

$$\varepsilon_{0',1'} = -\frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2\varphi^2},$$

$$\varepsilon_{\tilde{0},\tilde{1}'} = -\mu' - \frac{\mu}{2} + \frac{U'}{2} \pm \sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}. \quad (5.15)$$

Для бозе-операторів отримуємо, відповідно

$$\begin{aligned} b_i = & \frac{1}{2} \sin(2\psi)(X_i^{0'0'} - X_i^{1'1'}) + \frac{1}{2} \sin(2\tilde{\psi})(X_i^{\tilde{0}'\tilde{0}'} - X_i^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \\ & + \cos^2 \psi X_i^{0'1'} - \sin^2 \psi X_i^{1'0'} + \cos^2 \tilde{\psi} X_i^{\tilde{0}'\tilde{1}'} - \sin^2 \tilde{\psi} X_i^{\tilde{1}'\tilde{0}'}). \end{aligned} \quad (5.16)$$

5.4. Термодинамічний потенціал та параметр порядку

Статистична сума в наближенні НСП визначається як:

$$\begin{aligned} Z_{MF} &= \text{Spe}^{-\beta H_{MF}} = e^{\beta N t_0 \varphi^2} \prod_i \text{Spe}^{-\beta \sum_{pr} H_{pr} X_i^{pr}} \\ &= e^{\beta N t_0 \varphi^2} \prod_i e^{-\beta \sum_{p'} \varepsilon_{p'} X_i^{p'p'}} = e^{\beta N t_0 \varphi^2} Z_0^N, \end{aligned} \quad (5.17)$$

де

$$Z_0 = e^{-\beta \varepsilon_{0'}} + e^{-\beta \varepsilon_{1'}} + e^{-\beta \varepsilon_{\tilde{0}'}} + e^{-\beta \varepsilon_{\tilde{1}'}}. \quad (5.18)$$

Термодинамічний потенціал:

$$\Omega_{MF} = -\theta \ln Z_{MF} = N|t_0|\varphi^2 - N\theta \ln Z_0, \quad (5.19)$$

або

$$\Omega_{MF}/N = |t_0|\varphi^2 - \theta \ln Z_0, \quad (5.20)$$

(тут враховано, що $t_0 = -|t_0|$).

Рівноважне значення параметра порядку φ можна знайти з умови на глобальний мінімум Ω .

Розглянемо рівняння:

$$\frac{\partial(\Omega_{MF}/N)}{\partial \varphi} = 2|t_0|\varphi - \frac{\theta}{Z_0} \frac{\partial Z_0}{\partial \varphi} = 0, \quad (5.21)$$

чи

$$2|t_0|\varphi + \sum_{p'} \langle X^{p'p'} \rangle \frac{\partial \varepsilon_{p'}}{\partial \varphi} = 0. \quad (5.22)$$

Тут:

$$\langle X^{p'p'} \rangle = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta \varepsilon_{p'}} \quad (5.23)$$

Використавши, що

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_{0',1'}}{\partial \varphi} &= \pm t_0 \sin 2\psi = \mp |t_0| \sin 2\psi, \\ \frac{\partial \varepsilon_{\tilde{0}',\tilde{1}'}}{\partial \varphi} &= \pm t_0 \sin 2\tilde{\psi} = \mp |t_0| \sin 2\tilde{\psi}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

з (5.5) отримаємо:

$$\varphi = \frac{1}{2} \sin 2\psi \left(\langle X^{0'0'} \rangle - \langle X^{1'1'} \rangle \right) + \frac{1}{2} \sin 2\tilde{\psi} \left(\langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle - \langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle \right). \quad (5.25)$$

або, в явній формі:

$$\varphi = \frac{|t_0|\varphi}{2} \left[\frac{\langle X^{1'1'} \rangle - \langle X^{0'0'} \rangle}{\sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}} + \frac{\langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle - \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{\sqrt{\frac{(U'-\mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}} \right]. \quad (5.26)$$

Дане рівняння має тривіальний $\varphi = 0$ та нетривіальний $\varphi \neq 0$ розв'язки; другий з них може бути отриманим з рівняння :

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{1'1'} \rangle - \langle X^{0'0'} \rangle}{2\sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}} + \frac{\langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle - \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{2\sqrt{\frac{(U'-\mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}}. \quad (5.27)$$

Якщо для цього рівняння існує декілька розв'язків, тоді до розгляду бере-
ться той, що відповідає абсолютному мінімуму Ω_{MF} .

Застосуємо унітарне перетворення $\hat{U}^T(...) \hat{U}$ до операторів X_i^{01} та $X_i^{\tilde{0}\tilde{1}}$; які в матричній формі записуються як

$$||X_i^{01}|| = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad ||X_i^{\widetilde{01}}|| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

Отримаємо:

$$||\hat{U}^T X_i^{01} \hat{U}|| = \begin{pmatrix} \sin \psi \cos \psi & \cos^2 \psi & 0 & 0 \\ -\sin^2 \psi & -\sin \psi \cos \psi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

та

$$||\hat{U}^T X_i^{\widetilde{01}} \hat{U}|| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin \tilde{\psi} \cos \tilde{\psi} & \cos^2 \tilde{\psi} \\ 0 & 0 & -\sin^2 \tilde{\psi} & -\sin \tilde{\psi} \cos \tilde{\psi} \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

На трансформованому базисі :

$$\begin{aligned} \hat{U}^T X_i^{01} \hat{U} &= \cos^2 \psi X_i^{0'1'} + \sin \psi \cos \psi (X_i^{0'0'} - X_i^{1'1'}) - \sin^2 \psi X_i^{1'0'}, \\ \hat{U}^T X_i^{\widetilde{01}} \hat{U} &= \cos^2 \tilde{\psi} X_i^{\widetilde{0}'\widetilde{1}'} + \sin \tilde{\psi} \cos \tilde{\psi} (X_i^{\widetilde{0}'\widetilde{0}'} - X_i^{\widetilde{1}'\widetilde{1}'} - \sin^2 \tilde{\psi} X_i^{\widetilde{1}'\widetilde{0}'}). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Після усереднення за допомогою гамільтоніана H_{MF} :

$$\langle X_i^{01} \rangle = \frac{1}{Z_0} Sp(X_i^{01} e^{-\beta H_{MF}}) = \frac{1}{Z_0} Sp(\hat{U}^T X_i^{01} \hat{U} e^{-\beta H_{MF}}). \quad (5.32)$$

На новому базисі гамільтоніан H_{MF} є діагональним; а отже - середні тільки діагональних операторів $X_i^{p'p'}$ ($p' = 0', 1', \widetilde{0}', \widetilde{1}'$) є ненульовими. Отже:

$$\begin{aligned} \langle X_i^{01} \rangle &= \frac{1}{2} \sin 2\psi \left(\langle X^{0'0'} \rangle - \langle X^{1'1'} \rangle \right), \\ \langle X_i^{\widetilde{01}} \rangle &= \frac{1}{2} \sin 2\tilde{\psi} \left(\langle X^{\widetilde{0}'\widetilde{0}'} \rangle - \langle X^{\widetilde{1}'\widetilde{1}'} \rangle \right). \end{aligned} \quad (5.33)$$

В результаті маємо

$$\varphi = \langle b_i \rangle = \langle X_i^{01} \rangle + \langle X_i^{\widetilde{01}} \rangle = \frac{1}{2} \sin 2\psi \left(\langle X^{0'0'} \rangle - \langle X^{1'1'} \rangle \right)$$

$$+ \frac{1}{2} \sin 2\tilde{\psi} \left(\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}'} \rangle - \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}'} \rangle \right). \quad (5.34)$$

Таким чином, ми прийшли до такого ж рівняння для φ , яке ми отримали з умови екстремуму для термодинамічного потенціалу.

5.5. Спінодалі при $T = 0$

Якщо в рівнянні (5.27) покласти $\varphi = 0$, отримаємо умову фазового переходу другого роду в НП фазу (у тому випадку, якщо такий перехід існує). В загальному, це умова нестійкості нормальної (МІ) фази до появи бозе-конденсату (на фазових діаграмах вона відповідає лініям спінодалей).

Рівняння (5.10) може бути переписане як

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{1'1'} \rangle - \langle X^{0'0'} \rangle}{\varepsilon_{0'} - \varepsilon_{1'}} + \frac{\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}'} \rangle - \langle X^{\tilde{0}\tilde{0}'} \rangle}{\varepsilon_{\tilde{0}'} - \varepsilon_{\tilde{1}'}}. \quad (5.35)$$

Якщо $\varphi \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0'} &= \begin{cases} \lambda_0, \mu > 0 \\ \lambda_1, \mu < 0 \end{cases} \quad ; \quad \varepsilon_{\tilde{0}'} = \begin{cases} \lambda_{\tilde{1}}, \mu < U' \\ \lambda_{\tilde{0}}, \mu > U' \end{cases} \\ \varepsilon_{1'} &= \begin{cases} \lambda_1, \mu > 0 \\ \lambda_0, \mu < 0 \end{cases} \quad ; \quad \varepsilon_{\tilde{1}'} = \begin{cases} \lambda_{\tilde{0}}, \mu < U' \\ \lambda_{\tilde{1}}, \mu > U' \end{cases}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Очевидно, що можна розділити вісь μ на три області (1) $\mu < 0$; (2) $0 < \mu < U'$; (3) $\mu > U'$ (коли $U' > 0$). Для усіх цих областей рівняння (5.35) набуває форми:

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{00} \rangle - \langle X^{11} \rangle}{\lambda_1 - \lambda_0} + \frac{\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}} \rangle - \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle}{\lambda_{\tilde{1}} - \lambda_{\tilde{0}}}. \quad (5.37)$$

Його можна переписати як

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{11} \rangle - \langle X^{00} \rangle}{\mu} + \frac{\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}} \rangle - \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle}{U' - \mu}. \quad (5.38)$$

Рівняння (5.37) є таким самим як і отримане в [132] з умови розбіжності бозонної функції Гріна (розрахованої в наближенні хаотичних фаз) при $\omega = 0$, $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. В такому випадку це є умовою нестабільності фази з $\varphi = 0$. Це підтверджує, що рівняння (5.37) є рівнянням для спінодалі.

Якщо $T = 0$, середні $\langle X^{p'p'} \rangle$, $\langle X^{\tilde{p}'\tilde{p}'} \rangle$ відрізняються від нуля тільки для найнижчого рівня енергії. Ось три випадки, які можна виділити:

$$1) \mu' < 0$$

Тут, при $\mu < 0$ основним станом є стан $|0\rangle$, та при $\mu > 0$ основний стан це $|1\rangle$. Відповідно, у першому з цих випадків $\langle X^{00} \rangle = 1$, в той час коли в другому $\langle X^{11} \rangle = 1$ (інші середні рівні нулю). Рівняння (5.38) можна записати як:

$$\frac{1}{|t_0|} = \begin{cases} -\frac{1}{\mu}, & \mu < 0 \\ \frac{1}{\mu}, & \mu > 0 \end{cases} . \quad (5.39)$$

Звідси видно, що

$$\mu = \begin{cases} t_0, & \mu > 0 \\ -t_0, & \mu < 0 \end{cases} . \quad (5.40)$$

І це є рівняння спінодалі для $\mu' < 0$.

$$2) \mu' > U'$$

Зміна основного стану відбувається при $\mu = U'$. Для $\mu < U'$ стан $|\tilde{0}\rangle$ є основним, і для $\mu > U'$ це стан $|\tilde{1}\rangle$. Відповідно, при $\mu < U'$, $\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}} \rangle = 1$ та при $\mu > U'$, $\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = 1$. Рівняння (5.38) тепер набуває форми:

$$\frac{1}{|t_0|} = \begin{cases} \frac{1}{U' - \mu}, & \mu < U' \\ \frac{1}{\mu - U'}, & \mu > U' \end{cases} . \quad (5.41)$$

В цьому випадку наступні криві будуть лініями спінодалі:

$$\begin{cases} \mu = U' + t_0, & \mu > U' \\ \mu = U' - t_0, & \mu < U' \end{cases} . \quad (5.42)$$

3) $0 < \mu' < U'$

Зміна основного стану відбувається тоді, коли $\mu = \mu'$. Для $\mu < \mu'$ такий стан $|\tilde{0}\rangle$, і для $\mu > \mu'$ це стан $|1\rangle$. Відповідно, при $\mu < \mu'$, $\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}} \rangle = 1$ і для $\mu > \mu'$, $\langle X^{11} \rangle = 1$. Для спінодалі отримаємо рівняння:

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{11} \rangle}{\mu} + \frac{\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}} \rangle}{U' - \mu}. \quad (5.43)$$

Звідси видно, що $\mu = U' - |t_0|$ коли $\mu < \mu'$, та $\mu = |t_0|$ коли $\mu > \mu'$. У випадку $|t_0| < U'$, виникає крім цього розв'язок $\mu = \mu'$. Коли $\mu' > U'/2$, він існує для $U' - \mu' < |t_0| < \mu'$, і при $\mu' < U'/2$ він існує для $\mu' < |t_0| < U' - \mu'$. Якщо $|t_0| \geq U'$, розв'язок $\mu = \mu'$ зникає.

5.6. Фазовий перехід першого роду до надплинної фази

Тепер проаналізуємо залежність параметра порядку φ та термодинамічного потенціалу Ω від хімічного потенціалу бозонів при різних значеннях μ' , використовуючи рівняння (5.27). В границі $T \rightarrow 0$ тільки середні, пов'язані з основним станом, будуть враховуватись в правій частині рівняння. Зі зміною φ основний стан може перебудовуватись і це може спричинити проблеми у самоузгодженому визначенні розв'язків для параметра порядку. Ця задача може мати простий аналітичний розв'язок, якщо стани з ферміонами та без ферміонів взаємно не конкурують. Це досягається коли μ' набуває значення поза інтервалом $[0, U']$.

Для від'ємних значень μ' стан $|1'\rangle$ є основним і рівняння (5.27) зводиться до вигляду:

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{1}{2\sqrt{\frac{\mu'^2}{4} + t_0^2\varphi^2}}. \quad (5.44)$$

Тоді:

$$\varphi = \frac{1}{2}\sqrt{1 - \mu'^2/t_0^2}. \quad (5.45)$$

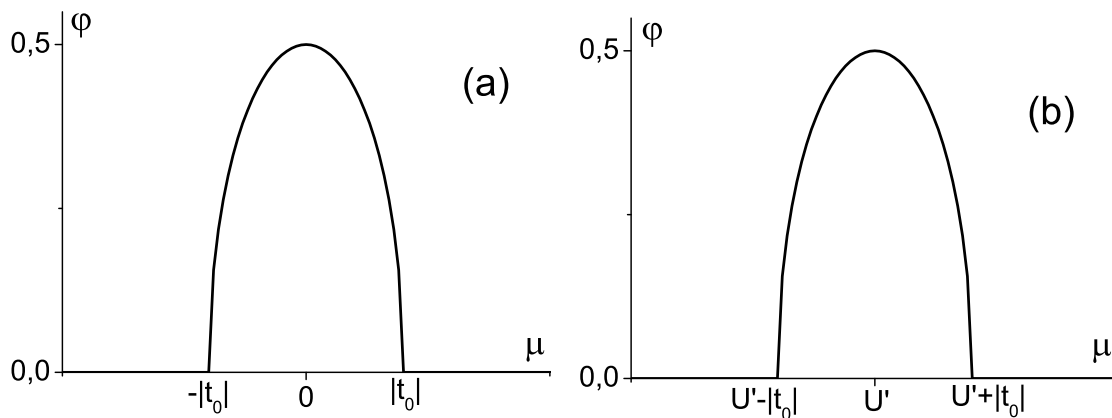


Рис. 5.1. Параметр порядку φ як функція μ для $\mu' < 0$ (a) та для $\mu' > U'$ (b).

В додатній області, коли $\mu' > U'$, стан $|\tilde{1}'\rangle$ є основним; відповідно ми маємо рівняння:

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{1}{2\sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}}. \quad (5.46)$$

В цьому випадку:

$$\varphi = \frac{1}{2}\sqrt{1 - (\mu - U')^2/t_0^2}. \quad (5.47)$$

Залежності функцій (5.45) та (5.47) від μ представлено на рис. 5.1.

В області проміжних значень μ' (при $0 \leq \mu' \leq U'$), змагання між “тілдованими” та “нетілдованими” станами призводить до деформації кривої $\varphi(\mu)$. На рис. 5.2(a)–5.6(a) можна бачити графіки параметра порядку φ як функції хімічного потенціалу бозонів μ для різних значень хімічного потенціалу ферміонів μ' . Ці криві отримані чисельно з рівняння (5.27) у випадку $T = 0$.

Видно, що в інтервалах $0 < \mu' < |t_0|$ та $U' - |t_0| < \mu' < U'$ (при $|t_0| < U'/2$), так само як і майже на всьому інтервалі $0 < \mu' < U'$ (при $|t_0| > U'/2$) для значень μ' , залежність $\varphi(\mu)$ має зворотні ходи та S-подібну поведінку. Це є ознакою можливості існування фазового переходу першого роду (замість фазового переходу другого роду). Такий висновок можна зробити з поведінки термодинамічного потенціалу $\Omega_{MF}(\mu)$ як функції μ .

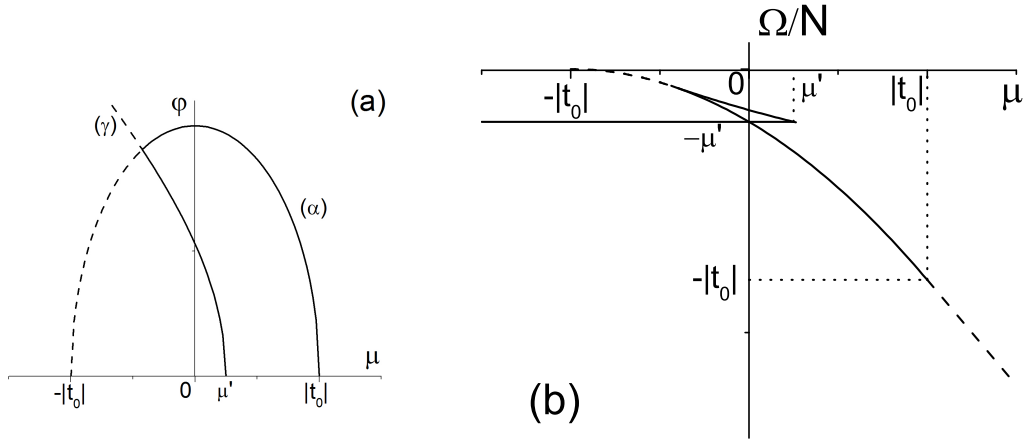


Рис. 5.2. Параметр порядку (а) та термодинамічний потенціал (b) як функція μ у випадку $|t_0| < U'/2$; $0 < \mu' < |t_0|$. Тут, і на рис. 5.3-5.6, лінії (α) , (β) та (γ) описують формули (5.45), (5.47) та (5.52), відповідно.

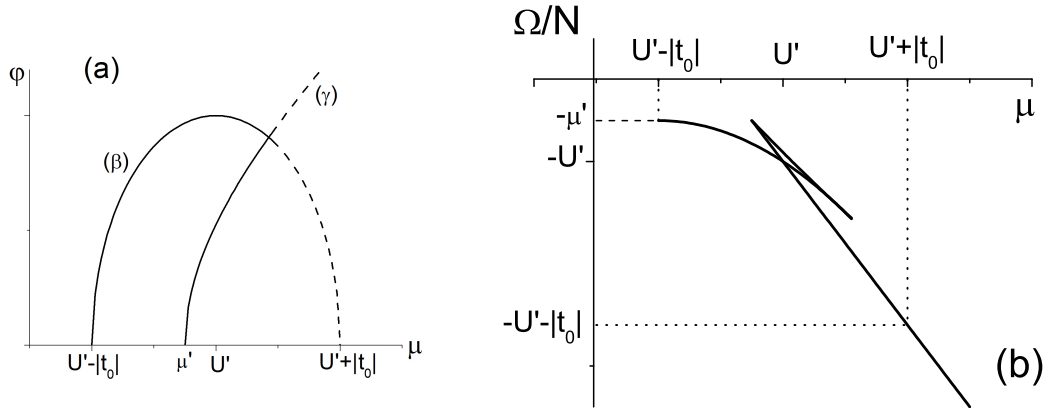


Рис. 5.3. Параметр порядку (а) та термодинамічний потенціал (b) як функція μ у випадку $|t_0| < U'/2$; $U' - |t_0| < \mu' < U'$.

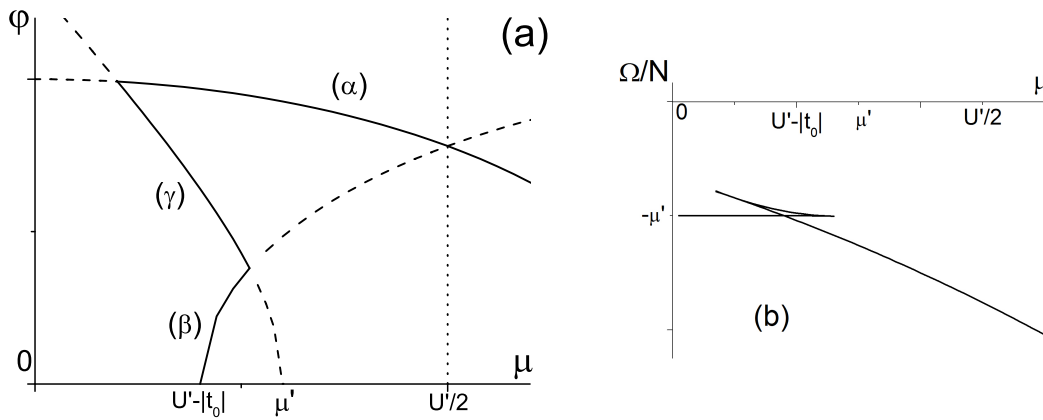


Рис. 5.4. Параметр порядку (а) та термодинамічний потенціал (b) як функція μ у випадку $|t_0| > U'/2$; $U' - |t_0| < \mu' < U'/2$.

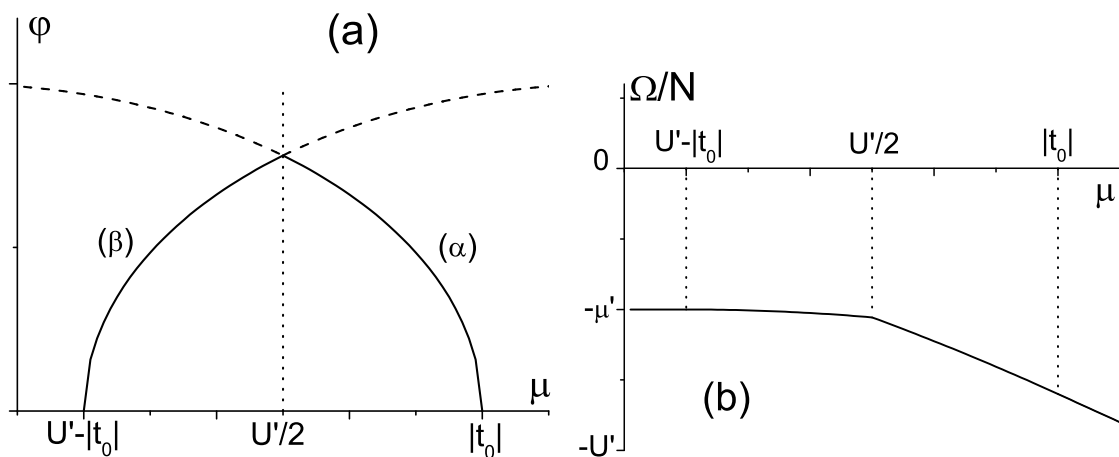


Рис. 5.5. Параметр порядку (а) та термодинамічний потенціал (b) як функція μ у випадку $|t_0| > U'/2$; $\mu' = U'/2$.

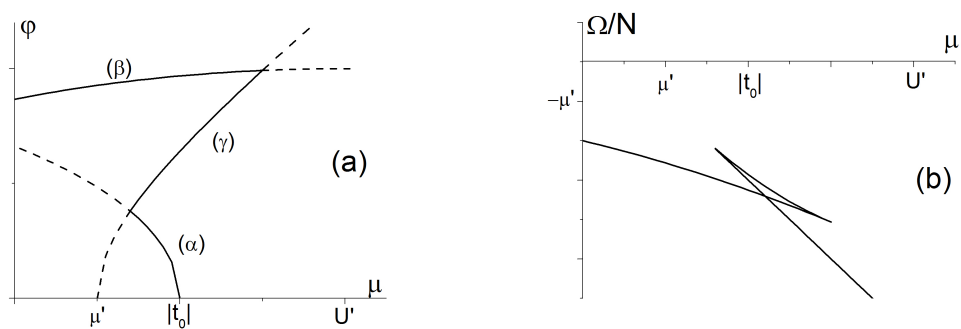


Рис. 5.6. Параметр порядку (а) та термодинамічний потенціал (b) як функція μ у випадку $|t_0| > U'/2$; $U'/2 < \mu' < |t_0|$.

У випадку від'ємних значень хімічного потенціалу μ' , коли при $T = 0$ залишається тільки стан $|1'\rangle$

$$\Omega_{MF}/N \rightarrow |t_0|\varphi^2 - \theta \ln e^{-\beta\varepsilon_{1'}} = |t_0|\varphi^2 - \frac{\mu}{2} - \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2\varphi^2}. \quad (5.48)$$

Використовуючи вираз (5.45), отримаємо:

$$\Omega_{MF}/N = -\frac{(\mu + |t_0|)^2}{4|t_0|}. \quad (5.49)$$

Разом з тим, при $\varphi = 0$ основним станом в області $\mu' < 0$ є стан $|0\rangle$ для $\mu < 0$ та стан $|1\rangle$ для $\mu > 0$. Отже:

$$\Omega_{MF}/N|_{\varphi=0} = \begin{cases} 0, & \mu < 0 \\ -\mu, & \mu > 0 \end{cases}. \quad (5.50)$$

Можна бачити, що $\Omega_{MF} < \Omega_{MF}|_{\varphi=0}$; НП фаза є більш стабільною в інтервалі $-|t_0| < \mu < |t_0|$. Похідні $\frac{\partial\Omega_{MF}}{\partial\mu}$ та $\frac{\partial\Omega_{MF}|_{\varphi=0}}{\partial\mu}$ збігаються в граничних точках $\mu = \pm|t_0|$. Це показує, що фазовий перехід в стан з бозе-конденсатом тут є другого роду.

Функція $\Omega_{MF}/N(\mu)$ має подібну поведінку у випадку $\mu' > U'$. Тут:

$$\begin{aligned} \Omega_{MF}/N &= -\frac{(\mu - U' + |t_0|)^2}{4|t_0|}, \\ \Omega_{MF}/N|_{\varphi=0} &= \begin{cases} -\mu', & \mu < U' \\ U' - \mu - \mu', & \mu > U' \end{cases}; \end{aligned} \quad (5.51)$$

фазовий перехід другого роду відбувається в точках $\mu = U' \pm |t_0|$.

Результати чисельних розрахунків для функції $\Omega_{MF}/N(\mu)$ у випадку проміжних значень μ' (виконані за допомогою порахованих раніше залежностей $\varphi(\mu)$) показані на рис. 5.2(б)–5.6(б). Тут і надалі числові значення параметрів дано в одиницях U' .

Зрозуміти особливу поведінку залежності параметру порядку φ від μ можна взявши до уваги зміну основного стану, що має місце в згаданому вище проміжному інтервалі значень μ' коли $\varepsilon_{1'} = \varepsilon_{\tilde{1}'}$. Рівняння, що виникає за таких умов, має розв'язок:

$$\varphi = \frac{\sqrt{\mu'(U' - \mu')(\mu - \mu')(\mu' - U' + \mu)}}{|t_0||2\mu' - U'|}, \quad (5.52)$$

що, на площині (μ, φ) описує лінію розділу областей з різними основними станами: станом $|\tilde{1}'\rangle$, $(|1'\rangle)$ зліва (справа) від кривої (при заданому значенні μ').

При $\mu' = U'/2$ лінія (5.52) є вертикальною і проходить через точку $\mu = U'/2$. При $\mu' < U'/2$ вона вигинається наліво і лягає на вісь абсцис коли $\mu' \rightarrow 0$; і відповідно, при $\mu' > U'/2$ вигинається в іншу сторону і крива лягає на вісь абсцис при $\mu' \rightarrow U'$.

В області з основним станом $|1'\rangle$ залежність $\varphi(\mu)$ визначається згідно (5.45) (див. рис. 5.1(a)); коли ж основним є стан $|\tilde{1}'\rangle$, вона описується згідно (5.47) (див. рис. 5.1(б)). В залежності від розміщення лінії (5.52), на обох її сторонах певні частини графіків (5.45) та (5.47) зберігаються. Це показано на рис. 5.4(a), 5.5(a) та 5.6(a).

У випадках, коли функція $\varphi(\mu)$ має зворотні ходи, можна спостерігати так звані, “риб’ячі хвости” в поведінці термодинамічного потенціалу, коли точка перетину нижчих кривих відповідає точці фазового переходу першого роду (фазові переходи на обох інших сторонах інтервалу ненульових значень φ є другого роду). Значення μ , при яких існує фазовий перехід першого роду, зміщені щодо ліній спінодалі (при $\mu' < U'/2$ наліво та при $\mu' > U'/2$ направо). Як результат - область існування НП фази при $T = 0$ є ширшою ніж та, що обмежена спінодалями.

5.7. Фазові діаграми при $T = 0$

Більш детальний аналіз показує, що при $|t_0| < U'/2$ та $0 < \mu' < |t_0|$ область фазових переходів першого роду в НП фази визначається перетином гілок термо-

диномічного потенціалу.

$$\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|\tau\rangle} = -\mu', \quad (5.53)$$

та

$$\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|1'\rangle} = -\frac{(\mu + |t_0|)^2}{4|t_0|}; \quad (5.54)$$

і пов'язана зі зміною ($|\tilde{0}\rangle \rightarrow |1'\rangle$) основного стану бозон-ферміонної системи. Отже, вираз

$$\mu' = \frac{(\mu + |t_0|)^2}{4|t_0|}, \quad (5.55)$$

є рівнянням лінії фазових переходів на площині (μ, μ') . На рис. 5.7, де області існування різних основних станів вказані на діаграмі (μ, μ') , ця крива позначена суцільною лінією. SF фаза існує в областях зазначених як $|1'\rangle$ та $|\tilde{1}'\rangle$; щоб розрізнити ці два випадки будемо використовувати позначення $SF|1'\rangle$ та $SF|\tilde{1}'\rangle$.

У випадку коли $U'/2 < |t_0| < U'$, крива (5.55) описує фазовий перехід першого роду доки $0 < \mu' < U'^2/4|t_0|$. Разом з тим, вона залишається зліва від лінії спінодалі (рис. 5.8). Якщо $U'^2/4|t_0| < \mu' < U' - U'^2/4|t_0|$, лінія фазового переходу першого роду розміщена між спінодалями, що описуються рівняннями $\mu = U' - |t_0|$ та $\mu = |t_0|$; при таких значеннях μ виникає фазовий перехід другого роду в фазу НП. Для $U' - |t_0| < \mu < \mu'$ це є фаза $SF|\tilde{1}'\rangle$ а для $\mu' < \mu < |t_0|$ – фаза $SF|1'\rangle$ (індекс вказує основний стан системи при $T = 0$). Перехід між цими двома фазами, є першого роду і визначається з рівності термодинамічних потенціалів $\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|1'\rangle}$ та $\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|\tilde{1}'\rangle}$; тут:

$$\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|\tilde{1}'\rangle} = -\frac{(\mu - U' + |t_0|)^2}{4|t_0|} - \mu'. \quad (5.56)$$

Крива, що описує цей перехід на площині (μ, μ') , дається рівнянням

$$\mu' = \frac{U'}{4|t_0|}(2\mu + 2|t_0| - U'). \quad (5.57)$$

В області $U' - U'^2/4|t_0| < \mu' < U'$, лінія фазового переходу першого роду продовжується; вона відділяє фазу $SF|\tilde{1}'\rangle$ від нормальної фази (для останньої основним

станом $\epsilon |1\rangle$). У цьому випадку рівняння для фазової рівноваги виникає з умови:

$$\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{\tilde{1}\rangle} = \frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|1\rangle}, \quad (5.58)$$

де $\frac{\Omega_{MF}}{N} \Big|_{|1\rangle} = -\mu$ має форму:

$$\mu' = \mu - \frac{(\mu - U' + |t_0|)^2}{4|t_0|}. \quad (5.59)$$

На площині (μ, μ') ця лінія розміщена справа від лінії спінодалі.

Рівняння (5.55), (5.57) та (5.59) також визначають криву фазових переходів першого роду і при $|t_0| > U'$. Набір фазових діаграм типу (μ, μ') доповнюються діаграмами показаними на рис.5.9 та 5.10. Варто зазначити, що лінія переходів першого роду у всій області $0 < \mu' < U'$ розділяє стани (фази) з одним ферміоном (“тильдовані”) та стани без ферміонів (“нетильдовані”). З цим і пов’язана різниця між надплинними фазами $SF^{|\tilde{1}\rangle}$ та $SF^{|1\rangle}$. В першому випадку бозе-конденсат існує при повному ферміонному заповненні ($\bar{n}_f = 1$), в другому – при відсутності ферміонів ($\bar{n}_f = 0$).

При ненульових температурах залежність $\bar{n}_f$ від μ' при перетині лінії фазового переходу першого роду є гладкою. Концентрація ферміонів $\bar{n}_f$ поступово зменшується в “тильдованих” областях і подібним чином відповідно зростає в “нетильдованих”. Принципова різниця між фазами $SF^{|\tilde{1}\rangle}$ та $SF^{|1\rangle}$ зникає (див. розділ 6).

Описаний ефект зміни роду фазового переходу має також місце, коли хімічний потенціал μ' розміщений посередині інтервалу $[0, U']$ (див. рис.5.9). Точка $\mu' = U'/2$ є особливою. Розпад області НП фази на дві окремі має місце саме в цій точці зі зменшенням μ' .

Маючи фазові діаграми (μ, μ') побудовані для різних значень $|t_0|$, можна перейти до діаграм на площині $(\mu, |t_0|)$. Використавши формули (5.55), (5.57) та (5.59), легко отримати співвідношення між μ та $|t_0|$ (для фіксованих значень μ') на лінії фазового переходу першого роду:

$$\mu = \sqrt{4|t_0|\mu'} - |t_0|, \quad (5.60)$$

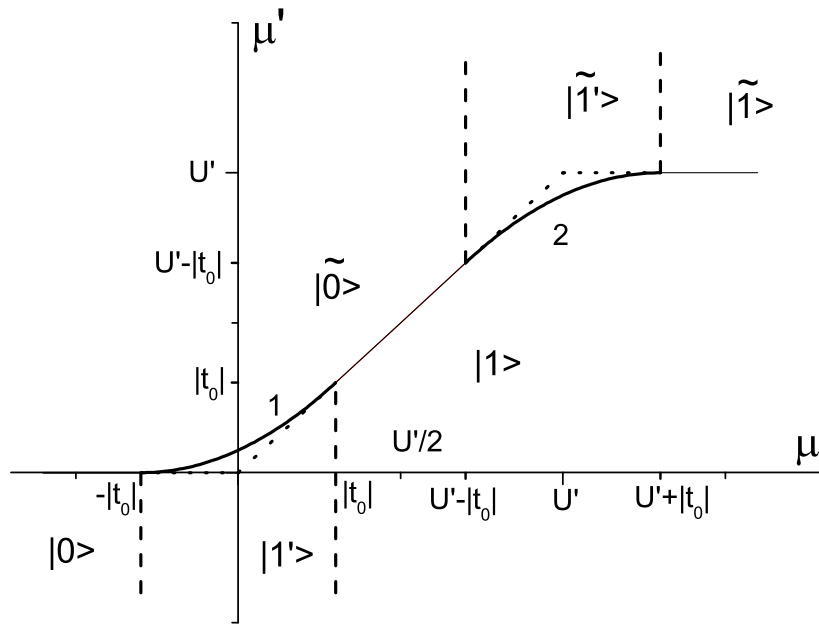


Рис. 5.7. Фазова діаграма (μ, μ') при $|t_0| < U'/2$. Тут і надалі використано наступні позначення: суцільна лінія - ФП 1-го роду, штрихована лінія - ФП 2-го роду, пунктирна лінія - спінодаль, тонка суцільна лінія - границя між областями з різними основними станами, що належать нормальній фазі.

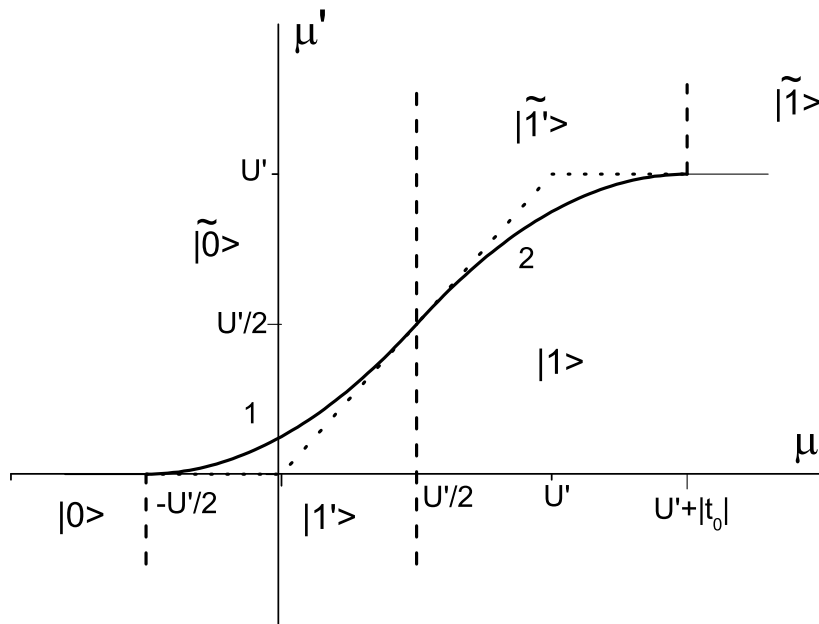


Рис. 5.8. Фазова діаграма (μ, μ') при $|t_0| = U'/2$.

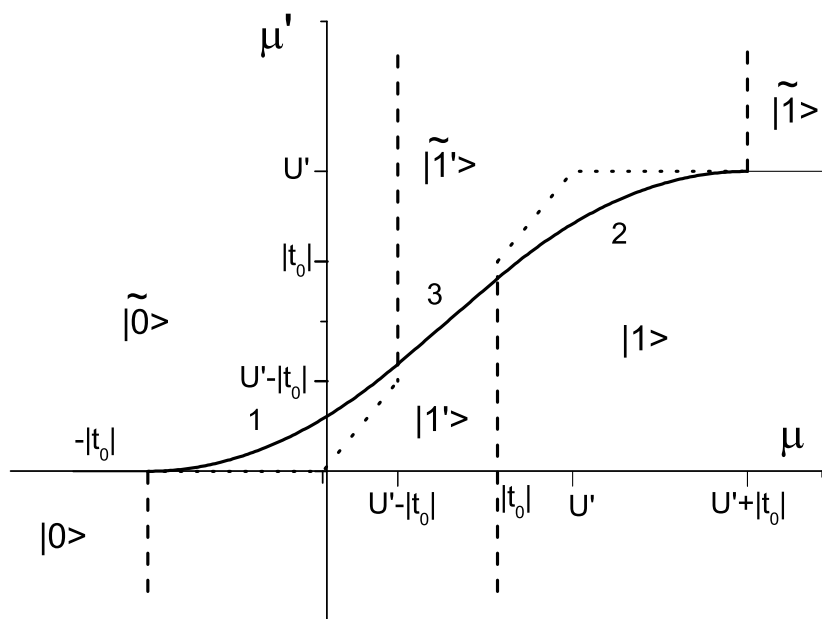


Рис. 5.9. Фазова діаграма (μ, μ') при $U'/2 < |t_0| < U'$.

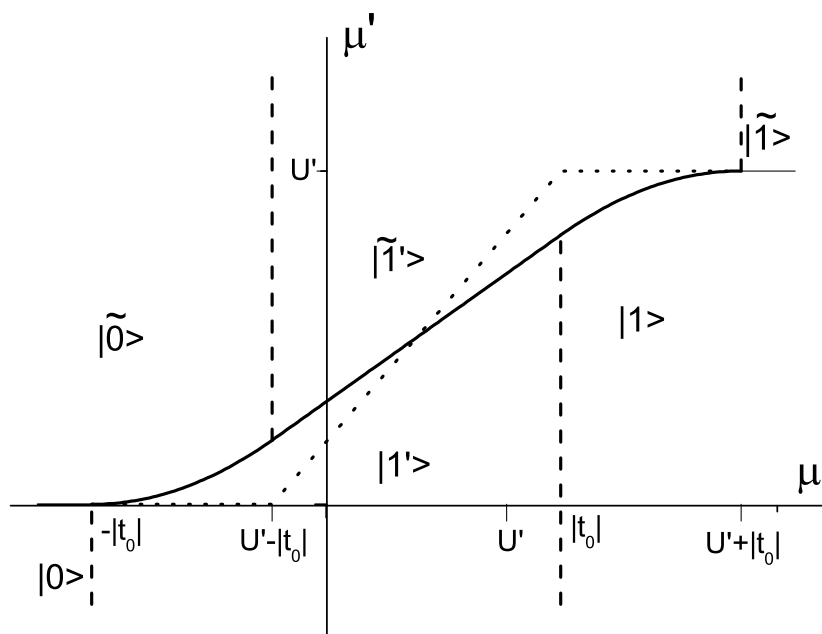


Рис. 5.10. Фазова діаграма (μ, μ') при $|t_0| > U'$.

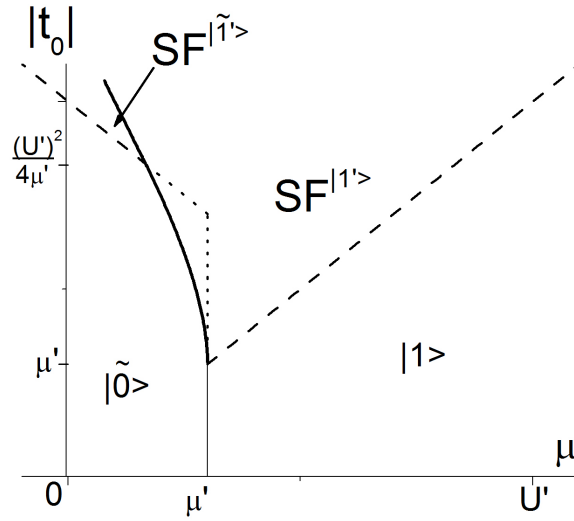


Рис. 5.11. Фазова діаграма $(\mu, |t_0|)$ при $0 < \mu' < U'/2$.

– для $\mu' < U'/2$;

$$\mu = U' + |t_0| - \sqrt{4|t_0|(U' - \mu')}, \quad (5.61)$$

– для $\mu' > U'/2$; та

$$\mu = \frac{U'}{2} - |t_0| + \frac{2|t_0|\mu'}{U'} \quad (5.62)$$

- в обох цих випадках коли виникає фазовий перехід в НП фазу.

Згідно рівнянь (5.60), (5.61) та (5.62), та використавши рівняння для спіно-далей при $T = 0$, отримаємо діаграми вказані на рис. 5.11, 5.12 та 5.13. На відміну від діаграм $(\mu, |t_0|)$ для чисто бозонного випадку (див. наприклад [127, 129]), рис. 5.12, вони асиметричні. Зі сторони менших (або більших) значень μ фазовий рід змінює (під впливом ферміонів) свій рід з другого на перший в залежності від значення хімічного потенціалу μ' .

Також можна визначити мінімальне значення для параметра переносу бозонів ($|t_0|_{min} = \mu'$ при $\mu' < U'/2$ або $|t_0|_{min} = U' - \mu'$ при $\mu' > U'/2$). НП фаза може існувати тільки якщо $|t_0| > |t_0|_{min}$.

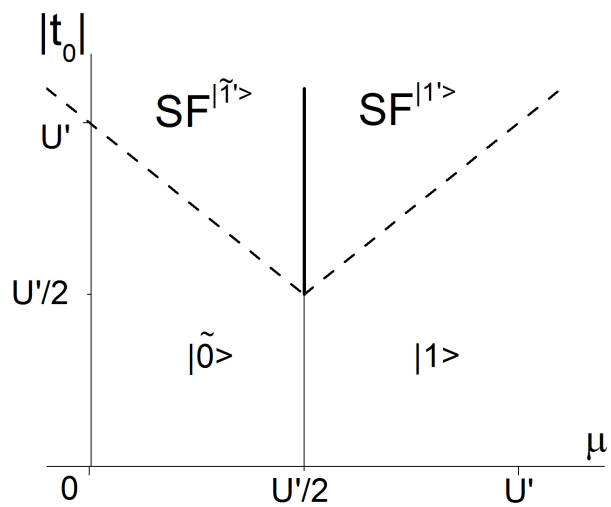


Рис. 5.12. Фазова діаграма $(\mu, |t_0|)$ при $\mu' = U'/2$.

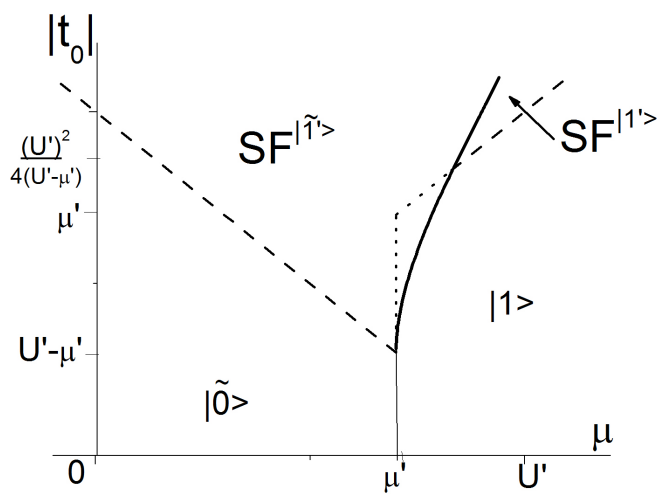


Рис. 5.13. Фазова діаграма $(\mu, |t_0|)$ при $U'/2 < \mu' < U'$.

5.8. Розділення фаз в режимі фіксованого хімічного потенціалу ферміонів

Крім стрибка числа ферміонів на лінії фазових переходів першого роду спостерігається і стрибкоподібна поведінка концентрації бозонів, $\bar{n}_B = -\partial(\Omega_{MF}/N)/\partial\mu$. При нульовій температурі:

$$\begin{aligned}\bar{n}_B|_{|\tilde{0}\rangle} &= 0; & \bar{n}_B|_{|1\rangle} &= 1; \\ \bar{n}_B|_{|\tilde{1}\rangle=1} &; & \bar{n}_B|_{|0\rangle} &= 0; \\ \bar{n}_B|_{|\tilde{1}'\rangle} &= \frac{\mu - U' + |t_0|}{2|t_0|}; & \bar{n}_B|_{|1'\rangle} &= \frac{\mu + |t_0|}{2|t_0|}.\end{aligned}\quad (5.63)$$

Маючи ці співвідношення, можна записати граничні значення $\bar{n}_B$ (з лівої чи правої сторони від ліній розділення), для заданого μ' , використовуючи (5.55), (5.57) та (5.59):

1) на лінії (5.55)

$$\bar{n}_B|_l = 0; \quad \bar{n}_B|_r = \sqrt{\mu'/|t_0|}. \quad (5.64)$$

1) на лінії (5.57)

$$\bar{n}_B|_l = \mu'/U' - \frac{U'}{4|t_0|}; \quad \bar{n}_B|_r = \frac{\mu'}{U'} + \frac{U'}{4|t_0|}. \quad (5.65)$$

1) на лінії (5.59)

$$\bar{n}_B|_l = 1 - \sqrt{\frac{U' - \mu'}{|t_0|}}; \quad \bar{n}_B|_r = 1. \quad (5.66)$$

Залежності $\bar{n}_B|_{l,r}$ від μ' представлені на рис. 5.14 та 5.15; випадки $|t_0| < U'/2$ та $U'/2 < |t_0| < U'$ показано окремо. В режимі фіксованих значень хімічних потенціалів μ та μ' ці графіки ілюструють стрибок бозонної концентрації в різних точках кривої фазової рівноваги. В режимі фіксованих $\bar{n}_B$ та μ' вони можуть бути інтерпретовані як діаграми, що описують розділення фаз з різною концентрацією $\bar{n}_B$.

Величини $\bar{n}_B|_l$ та $\bar{n}_B|_r$ відповідають в цьому випадку різним фазам (станам), на які система (в залежності від величини хімічного потенціалу μ') розділяється. Це показано на діаграмах 5.14 та 5.15.

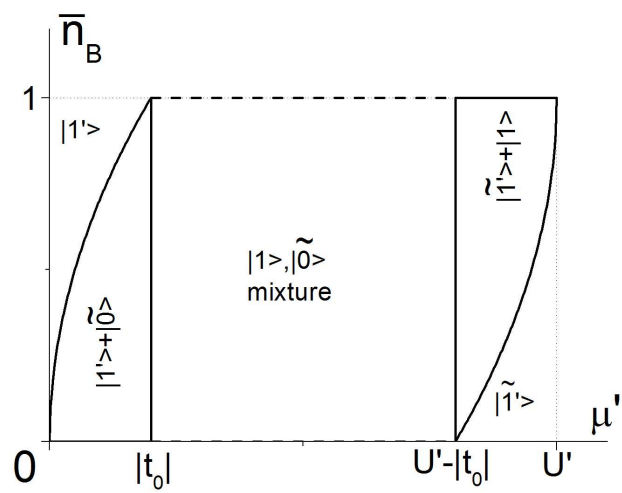


Рис. 5.14. $(\mu', \bar{n}_B)$ діаграма при $|t_0| < U'/2$.

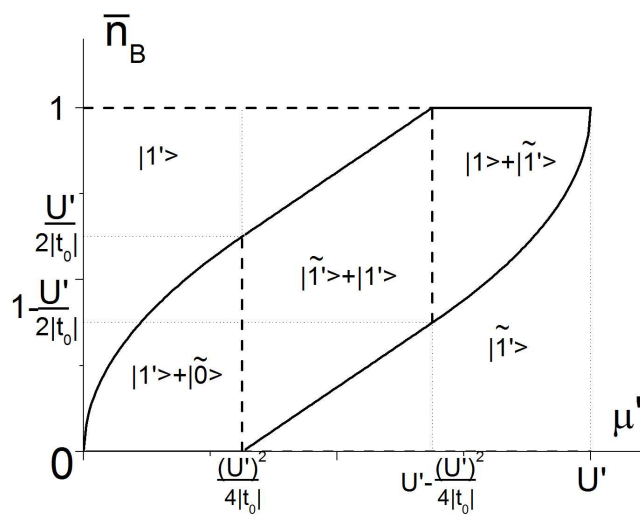


Рис. 5.15. $(\mu', \bar{n}_B)$ діаграма при $U'/2 < |t_0| < U'$.

У випадку $U'/2 < |t_0| < U'$ (як і у випадку $|t_0| > U'$) розділення виникає на всьому інтервалі $0 < \mu' < U'$. При $|t_0| < U'/2$, система розділяється на різні фази тільки при значеннях μ' в області $\mu' < |t_0|$ та $U' - |t_0| < \mu' < U'$. Розділення, проте, відсутнє в центральній області $|t_0| < \mu' < U' - |t_0|$; де, при заданій дробовій величині $\bar{n}_B$, система існує в змішаному стані : вузли ґратки заповнені (стан $|\tilde{1}\rangle$ - бозон та ферміон на вузлі) або порожні (стан $|0\rangle$) з імовірностями, що визначаються їхніми вагами ($\bar{n}_B$ or $1 - \bar{n}_B$, відповідно).

5.9. Висновки

У цьому розділі нами проведено дослідження стійких рівноважних станів та фазових переходів у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда для випадку жорстких бозонів та “важких” ферміонів. На відміну від традиційного підходу, що ґрунтується на режимі заданих значень хімічного потенціалу бозонів та концентрації ферміонів, ми аналізуємо випадок, коли фіксуються обидва хімічні потенціали-бозонів μ і ферміонів μ' (тобто, розгляд ведеться у рамках великого канонічного ансамблю для частинок обох сортів). Ми обмежилися при цьому випадком абсолютного нуля температури ($T = 0$), коли система перебуває у певному основному стані, або може переходити шляхом квантового фазового переходу з одного такого стану в інший при зміні термодинамічних параметрів. Підхід, який використано в даному розділі, не підлягає традиційній схемі, яка базується на розщепленні одновузлової взаємодії $U'n_i^b n_i^f$. Замість цього застосовано формалізм операторів Хаббарда, що діють на базисі станів $|n_i^b, n_i^f\rangle$; це дає можливість точно врахувати бозон-ферміонну взаємодію U' (в даній роботі розглянуто випадок відштовхування ($U' > 0$)). Одновузлова задача сформульована за допомогою тільки одного самоузгодженого параметра φ ($\varphi = \langle b_i \rangle = \langle b_i^+ \rangle$), а при описі бозе-конденсації для врахування перенесення бозонів використано наближення середнього поля.

Стійкі рівноважні стани, в тому числі стани, пов'язані з появою бозе-конденсату (що характеризуються параметром порядку $\varphi = b = b^+$), визначено виходячи з умови глобального мінімуму великого термодинамічного потенціалу.

Це дало змогу виявити наявність S-подібних залежностей $\varphi(\mu)$ і, відповідно, переходів 1-го роду (замість 2-го) до SF фази у певних областях значень хімічних потенціалів μ і (μ') . Важливою особливістю є також існування двох типів бозеконденсатів - $SF^{\tilde{1}'}$ (де всі ферміонні стани при $T = 0$ зайняті) і $SF^{(1')}$ (де ферміони при $T = 0$ відсутні); фазові переходи між ними є також 1-го роду. Це зображено на фазових діаграмах (μ, μ') і $(\mu, |t_0|)$, розрахованих при різних значеннях $|t_0|$ і μ' відповідно.

Появу переходів 1-го роду і стрибків параметра порядку φ можна обґрунтувати конкуренцією між станами, у яких поряд з бозонами присутні або відсутні ферміони, хоча в середньому інтервал $[0, U']$ значень μ' відповідає дробовій ($0 < \bar{n}_F < 1$) концентрації ферміонів. Точка $\mu' = U'/2$ є особливою; у ній із зменшенням μ' відбувається розбиття спільної області SF фази на дві окремі. Коли хімічний потенціал μ' набуває значень $\mu' < 0$ та $\mu' > U'$, описаний вище ефект зміни роду фазового переходу зникає. У першому випадку відсутні ферміони ($\bar{n}_F = 0$) а в другому ферміонні стани повністю заповнені ($\bar{n}_F = 1$). При $\bar{n}_F = 0$ модель зводиться до чистої моделі жорстких бозонів з фазовими переходами другого роду; при $\bar{n}_F = 1$ картина MI-SF переходу є такою самою, але має місце зсув хімічного потенціалу бозонів ($\mu \rightarrow \mu + U'$).

Характерною рисою нашої моделі є також асиметрія фазових діаграм $(\mu, |t_0|)$, що відрізняє їх від діаграм для чистої моделі жорстких бозонів. Існує, крім цього, значення параметра перенесення бозонів $|t_0|$, нижче якого SF фаза не існує. Факт появи такого мінімального значення t_0 , необхідного для появи бозеконденсату в присутності ферміонів, є наслідком прямого врахування бозон-ферміонної взаємодії U' в нашому підході. Проте, якщо така взаємодія береться до уваги базуючись на простій схемі лінеаризації (в дусі середньопольового розщеплення Хартрі-Фока) мінімальне значення $|t_0|_{min}$ при $T = 0$ рівне нулю [112, 116, 119, 120]. Це значення досягається при певній величині $\mu = \mu^*$ а вплив ферміонів полягає у цьому наближенні лише в зміщенні точки μ^* [119]. Подібний вплив ми отримуємо і в нашому випадку: положення ненульового $|t_0|_{min}$ як функція μ залежить від μ' (див. рис. 5.11, 5.13).

Пряме порівняння отриманих фазових діаграм з наявними в літературі даними щодо термодинаміки моделі БФХ не є дуже простим. В більшості випадків дослідження проводились в іншому термодинамічному режимі – режимі фіксованої концентрації ферміонів (окрім заданої концентрації бозонів). Виходячи з нашої схеми, перехід до режиму фіксованих значень $\bar{n}_F$ може бути проведений за допомогою перетворення Лежандра $\Omega/N \rightarrow \tilde{\Omega}/N = \Omega/N + \mu'\bar{n}_F$ та відповідного переходу до нових термодинамічних змінних. Проте, можна бачити, що стани з дробовими значеннями $\bar{n}_F$ розміщені на діаграмі (μ, μ') при $T = 0$ на кривій, що розділяє “тильдзовані” та “нетильдзовані” області (при перетині цієї лінії має місце стрибкоподібна зміна від $\bar{n}_F = 1$ до $\bar{n}_F = 0$). Рухаючись вздовж цієї лінії (при зміні μ), проходимо через інтервали значень μ , що відповідають областям існування НП фази. При $T \neq 0$ та $\bar{n}_F > 1/2$ ($\bar{n}_F < 1/2$) (див. розділ 6) згадана вище крива буде розміщена дещо вище(нижче), ніж при нульовій температурі. Симетрія діаграми буде порушена і це призведе до ситуації, коли при зменшенні $|t_0|$ НП фаза зникатиме раніше (пізніше) в області біля точки $\mu = 0$ ніж біля $\mu = U'$. Хоча такий висновок і є якісним, він може бути розглянутий як підтвердження та додаткове пояснення результатів отриманих в розділі 4 для повної моделі БФХ у випадку $t_F = 0$ при скінчених температурах в режимі $\bar{n}_F = const$. Варто зазначити, що в розділі 4, як і в низці робіт в цій області (див. наприклад [112, 119], фазові діаграми були побудовані, виходячи з умови нестабільності НП фази (яка визначалась спінодалями).

Слід зауважати, що наявність фазових переходів 1-го роду при заданих хімічних потенціалах μ і μ' є свідченням того, що при заданих концентраціях $\bar{n}_B$ та $\bar{n}_F$ відбувається фазове розшарування. Як нами показано, в залежності від значення μ' , система може розшаровуватись на області з різними концентраціями $\bar{n}_B$ і $\bar{n}_F$ та різними фазами (MI та SF або $SF^{|\tilde{I}'|}$ та $SF^{|I' |}$).

Виходячи з отриманих результатів, цікаво було б розглянути картину фазових переходів в режимі фіксованих хімічних потенціалів (μ and μ') при скінченному параметрі перенесення ферміонів. Для фіксованої концентрації $\bar{n}_F$ досить повний аналіз було зроблено в [111], використовуючи просту версію наближен-

ня середнього поля для взаємодії U_{bf} . Можливість спарювання ферміонів веде до появи фази з конденсатом ферміонних пар. Проте для цього треба перевищити деяке критичне значення параметру переносу t_F для їхньої термодинамічної привабливості [111, 125].

РОЗДІЛ 6

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В МОДЕЛІ БОЗЕ-ФЕРМІ-ХАББАРДА В ГРАНИЦІ ВАЖКИХ ФЕРМІОНІВ ТА ЖОРСТКИХ БОЗОНІВ ПРИ НЕНУЛЬОВИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

6.1. Вступ

У переважній більшості робіт вивчення термодинаміки моделі БФХ та фазового переходу, пов'язаного з появою бозе-конденсату у бозон-ферміонній суміші в оптичній ґратці, виконано у граничному випадку абсолютного нуля температури. Серед таких досліджень можна відзначити проведені в [109], де з використанням наближення середнього поля за перенесенням бозе-частинок при врахуванні одно-вузлової взаємодії між бозонами і ферміонами типу відштовхування або притягання було отримано при $T = 0$ фазові діаграми, що визначають області існування SF та MI фаз, включаючи фази з ферміонними композитами. Вихід у область ненульових температур в рамках подібного підходу (з точним врахуванням між-сортової та внутрісортової взаємодії) був зроблений в [120]; отримані результати, які ілюструють зміни у фазових діаграмах та поступове зникнення областей, де існує SF фаза, що при цьому відбувається, наведено у розділі 4 даної дисертації. В обох випадках основну увагу було присвячено режиму фіксованої концентрації ферміонів при заданому хімічному потенціалі бозонів, та випадку, коли міжвузлове перенесення ферміонів відсутнє ($t_F \rightarrow 0$), і тим самим не виникають ефективні взаємодії між бозонами через ферміони (і, відповідно, між ферміонами через бозони) [111, 118].

Результати, отримані для “важких” ферміонів у границі жорстких бозонів в рамках моделі БФХ, подано в розділі 5. Як доповнення до попередніх досліджень, ми розглянули термодинамічний режим заданих хімічних потенціалів як бозонів, так і ферміонів. Це дозволило виявити можливість зміни роду (з 2-го на 1-ий) фазових переходів до SF фази та продемонструвати, що при фіксованих концентраціях частинок (в. т.ч. ферміонів) може наступити фазове розшарування.

Нашою метою у даному розділі є продовження дослідження фазових переходів в суміші ультрахолодних бозе- та фермі- атомів у оптичній гратці, проведеного в розділі 5 на базі моделі Бозе-Фермі-Хаббарда, і поширення його на область відмінних від нуля температур. Для граничного випадку “важких” ферміонів та у підході жорстких бозонів розглянемо зміни, які відбуваються у фазових діаграмах, отриманих при $T = 0$ на площинах (μ', μ) та $(|t_0|, \mu)$ (де $\mu = \mu_B$, $\mu' = \mu_F$, $t_0 = t_B(\vec{q} = 0)$), аналізуючи поведінку параметра порядку бозе-конденсату та термодинамічного потенціалу як функцій хімічних потенціалів частинок при $T \neq 0$. Як і в попередньому розділі, розрахунки проведемо, розглядаючи перенесення бозонів у наближенні середнього поля, обмежуючись випадком безмежно малого переносу ферміонів та враховуючи точно одновузлову бозон-ферміонну взаємодію типу відштовхування. Побудуємо також фазові діаграми (T, μ) , (μ', μ) , та $(|t_0|, \mu)$, що визначають при $T \neq 0$ області існування SF фази при різних значеннях хімічного потенціалу ферміонів і проаналізуємо, у яких випадках фазові MI-SF переходи є переходами 1-го роду. Зупинимось також на питанні про розшарування фаз.

6.2. Гамільтоніан моделі та рівняння для параметру порядку

Як і в розділах 4 та 5, ми починаємо з гамільтоніана моделі Бозе-Фермі-Хаббарда у вигляді

$$\begin{aligned}
H = & \frac{U}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + U' \sum_i n_i^b n_i^f - \mu \sum_i n_i^b - \mu' \sum_i n_i^f \\
& + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j.
\end{aligned} \tag{6.1}$$

де, U та U' - константи бозон-бозонної та бозон-ферміонної взаємодії на вузлі; μ та μ' хімічні потенціали бозонів та ферміонів відповідно, t та t' - амплітуди тунелювання бозонів чи ферміонів. Як і раніше, ми розглядаємо випадок відштовхувальної взаємодії, для якої $U > 0, U' > 0$.

Для випадку наближення жорстких бозонів та для безспінових ферміонів (див. розділ 5) одновузловий базис $|n_i^b, n_i^f\rangle$ складається з чотирьох станів

$$|0\rangle = |0, 0\rangle, \quad |\tilde{0}\rangle = |0, 1\rangle, \quad |1\rangle = |1, 0\rangle, \quad |\tilde{1}\rangle = |1, 1\rangle. \tag{6.2}$$

Ми розглядаємо випадок “важких” ферміонів, для якого виконуються нерівності $t' \ll t$ та $t' \ll U'$; в такому наближенні ми покладемо $t'_{ij} \rightarrow 0$.

Як і в попередньому розділі, застосовуємо наближення середнього поля (5.8) та діагоналізуємо одновузловий гамільтоніан; як результат, отримуємо нові власні значення

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{0',1'} &= -\frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}, \\
\varepsilon_{\tilde{0},\tilde{1}'} &= -\mu' - \frac{\mu}{2} + \frac{U'}{2} \pm \sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2},
\end{aligned} \tag{6.3}$$

де $p' = 0', 1', \tilde{0}',$ та $\tilde{1}'$ індекси, що позначають новий базис.

Відповідно, термодинамічний потенціал в такому випадку має вигляд

$$\Omega_{MF}/N = |t_0| \varphi^2 - \theta \ln Z_0, \tag{6.4}$$

де

$$Z_0 = e^{-\beta \varepsilon_{0'}} + e^{-\beta \varepsilon_{1'}} + e^{-\beta \varepsilon_{\tilde{0}'}} + e^{-\beta \varepsilon_{\tilde{1}'}}. \tag{6.5}$$

Для нетривіального ($\varphi \neq 0$) розв'язку рівняння для параметра порядку, отримане з умови екстремуму термодинамічного потенціалу (6.4), записується як

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{1'1'} \rangle - \langle X^{0'0'} \rangle}{2\sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}} + \frac{\langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle - \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{2\sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}}, \quad (6.6)$$

де середні $\langle X^{p'p'} \rangle$ виражаються як больцманівські середні: $\langle X^{p'p'} \rangle = Z_0^{-1} \exp(-\beta \varepsilon_{p'})$.

Граничний перехід $\varphi = 0$ у цьому співвідношенні дає нам рівняння для лінії спінодалей

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{11} \rangle - \langle X^{00} \rangle}{\mu} + \frac{\langle X^{\tilde{0}\tilde{0}} \rangle - \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle}{U' - \mu}. \quad (6.7)$$

Отримане рівняння, яке визначає нестабільність нормальної фази стосовно появи бозе-конденсату при температурах $T \geq 0$, є одночасно умовою фазового переходу 2-го роду до SF фази, якщо такий перехід може реалізовуватись. Цьому питанню присвячений наш наступний розгляд.

6.3. Фазові діаграми

Розв'язки рівняння (6.7) на площині (T, μ) (криві спінодалей) для різних значень μ' показано на рис. 6.1, 6.2, та 6.3. Поза межами інтервалу $[0, U']$ для μ' , такі криві мають звичну куполоподібну форму, що поступово стає симетричною при зростанні $|\mu'|$. Досягнувши цього інтервалу криві підлягають помітній деформації та при заходженні всередину виникають області з двома критичними температурами для одного значення μ . Зі зміною T стає при цьому можливою “реентрант” поведінка для переходів MI-SF. Тому, для того щоб отримати реальну картину для фазових діаграм (T, μ) (рис. 6.1- 6.4), слід дослідити поведінку термодинамічного потенціалу в цих областях.

Аналіз, виконаний для випадку $T = 0$ в попередньому розділі, показує, що в цих областях значень (особливо коли $\mu' \gtrsim 0$ та $\mu' \lesssim U'$) рід переходу MI-SF

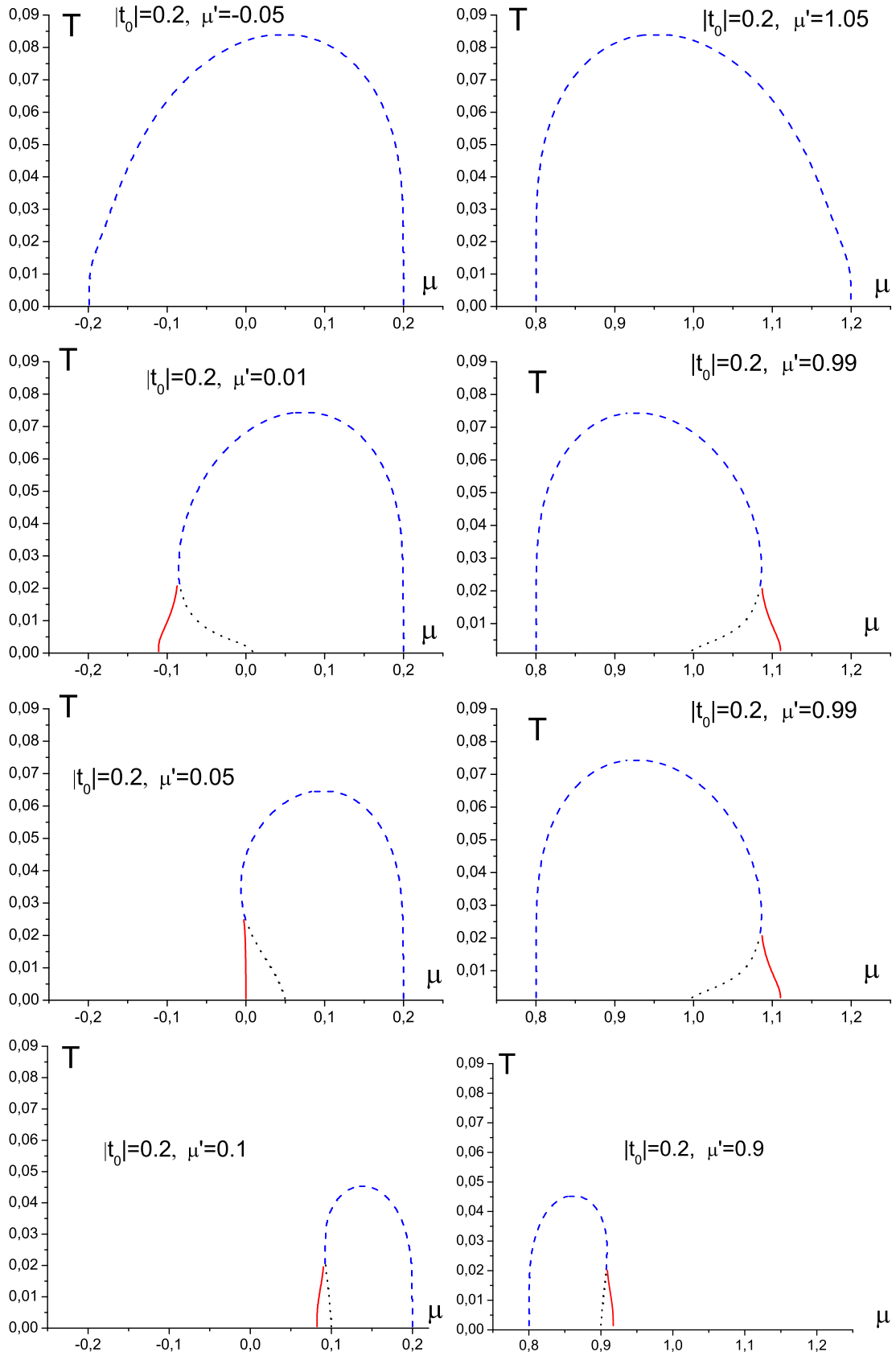


Рис. 6.1. (T, μ) фазова діаграма для різних значень μ' ; $|t_0| = 0.2, U' = 1.0$. Тут і надалі, суцільна (штрихова) лінія є лінією фазового переходу 1го (2го) роду; пунктирна лінія відповідає спінодалям. Всі величини мають розмірність енергії даної в одиницях U' . Для скорочення використано позначення T замість $\Theta = kT$.

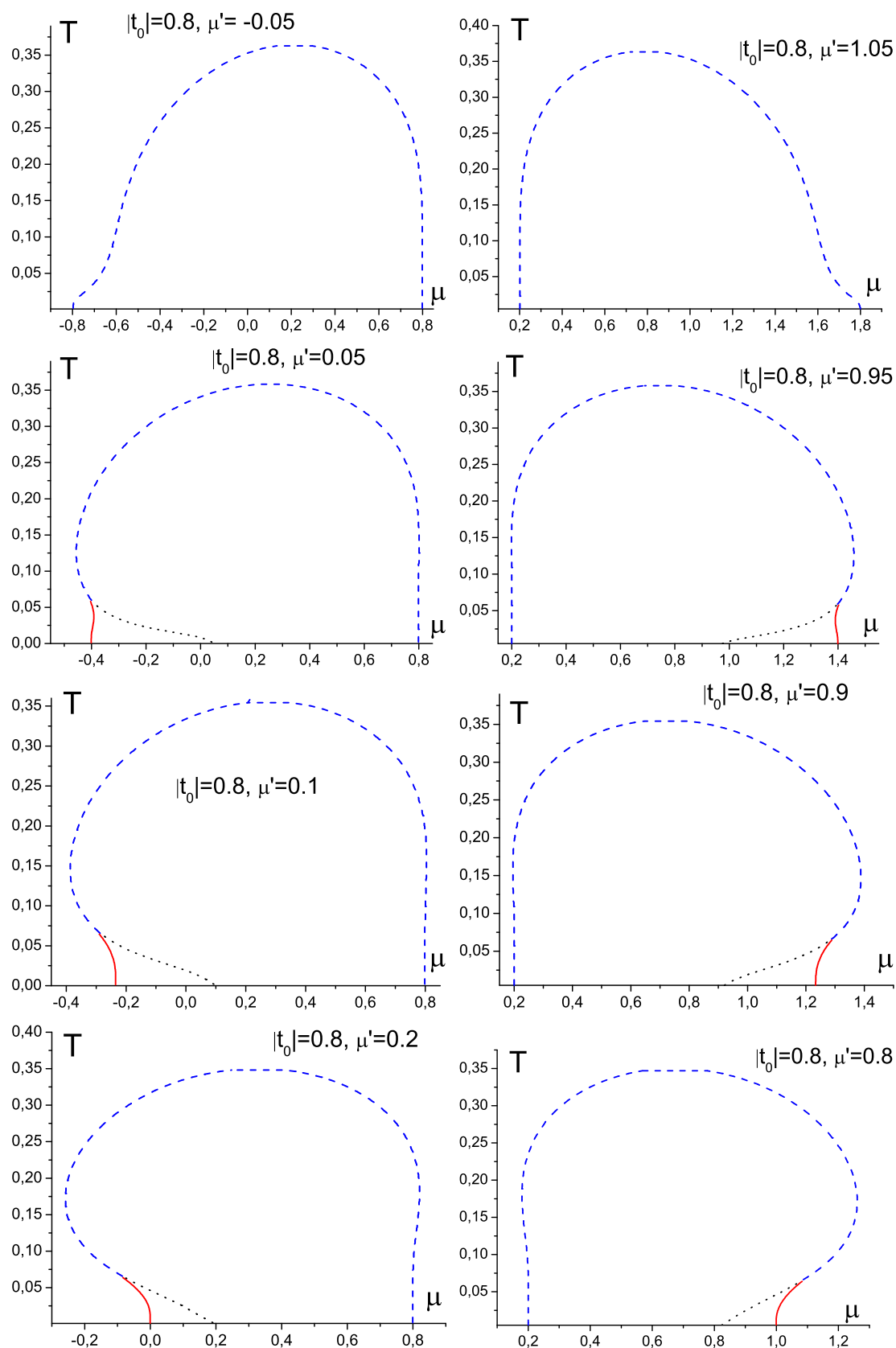


Рис. 6.2. (T, μ) фазові діаграми при різних значеннях μ' ; $|t_0| = 0.8, U' = 1.0$.
 Випадки $0 < \mu' < U'^2/4|t_0|$ та $U' - U'^2/4|t_0| < \mu' < U'$. Тут, $U'/2 < |t_0| < U'$.

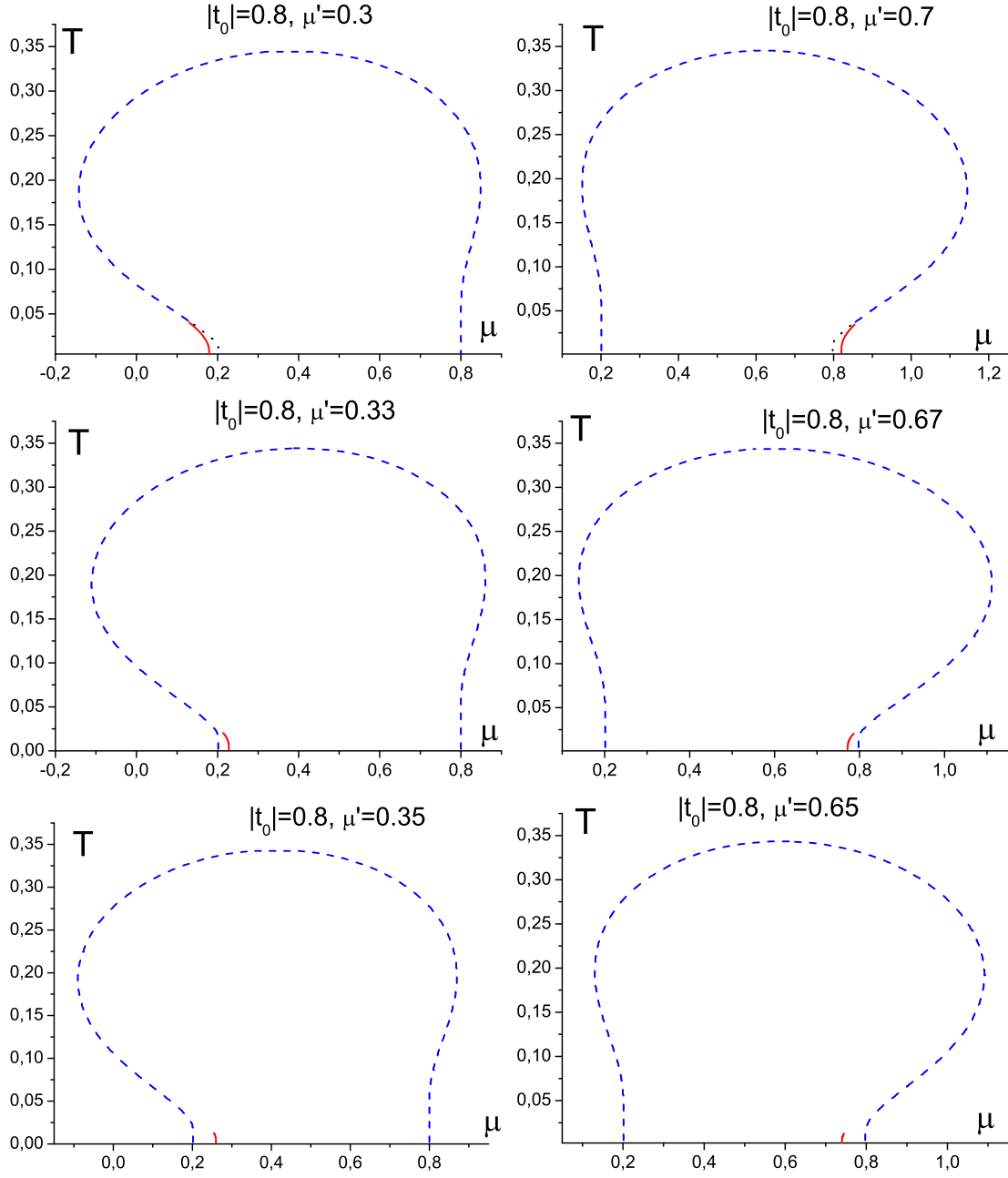


Рис. 6.3. (T, μ) фазова діаграма для різних значень μ' ; $|t_0| = 0.8, U' = 1.0$. Випа-
док $U'^2/4|t_0| < \mu' < U' - U'^2/4|t_0|$ при $U'/2 < |t_0| < U'$.

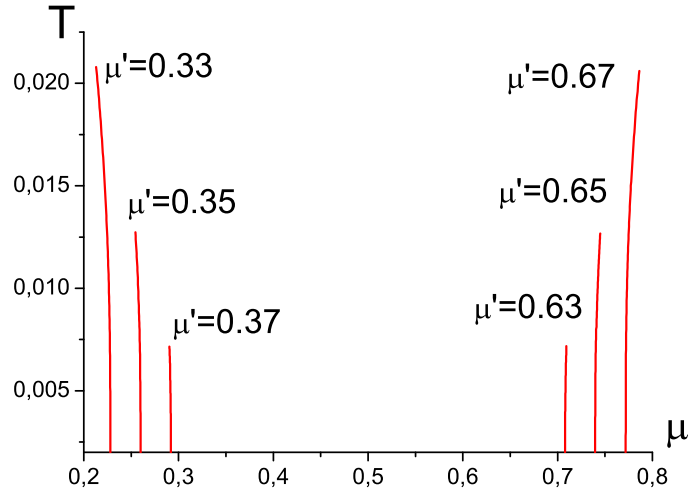


Рис. 6.4. Лінії фазових переходів першого роду на площині (T, μ) для різних значень μ' ; $|t_0| = 0.8, U' = 1.0$. Випадок $U'^2/4|t_0| < \mu' < U' - U'^2/4|t_0|$ при $U'/2 < |t_0| < U'$.

може змінюватись з 2-го на 1-ший. З рис. 6.5 та 6.6, можна бачити як форми кривих $\varphi(\mu)$ та $\Omega_{MF}/N(\mu)$ змінюються при зростанні температури в області значень параметрів для яких при $T = 0$ існує фазовий перехід першого роду. Тут є два варіанти (див. розділ 5).

Перший (i) реалізовується при значеннях $0 < \mu' < |t_0|$ або $U' - |t_0| < \mu' < U'$ у випадку $|t_0| < U'/2$ та при значеннях $0 < \mu' < U'^2/4|t_0|$ або $U' - U'^2/4|t_0| < \mu' < U'$ у випадку $U' > |t_0| > \frac{U'}{2}$. Другий (ii) має місце тільки у випадку $U' > |t_0| > U'/2$, коли $U'^2/4|t_0| < \mu' < U' - U'^2/4|t_0|$.

У першому випадку (варіант (i)), перехід другого роду при низьких температурах замінюється переходом першого роду, лінія якого проходить на площині (T, μ) (рис. 6.2) зліва (справа) від лінії спінодалі при $\mu' < U'/2$ ($\mu' > U'/2$). Це можна бачити з поведінки кривих $\varphi(\mu)$ та $\Omega_{MF}/N(\mu)$ у згаданих інтервалах значень хімічного потенціалу (рис. 6.5). При вищих температурах зворотній хід функції $\varphi(\mu)$ та “рибачий хвіст” Ω_{MF}/N поступово зменшуються та зникають. При певній температурі досягається трикритична точка і рід фазового переходу змінюється на другий. При подальшому зростанні температури лінія фазового переходу накладається на лінію спінодалі. Це показано на рис. 6.1 та 6.2, де суцільні лінії відповідають лініям переходу першого роду.

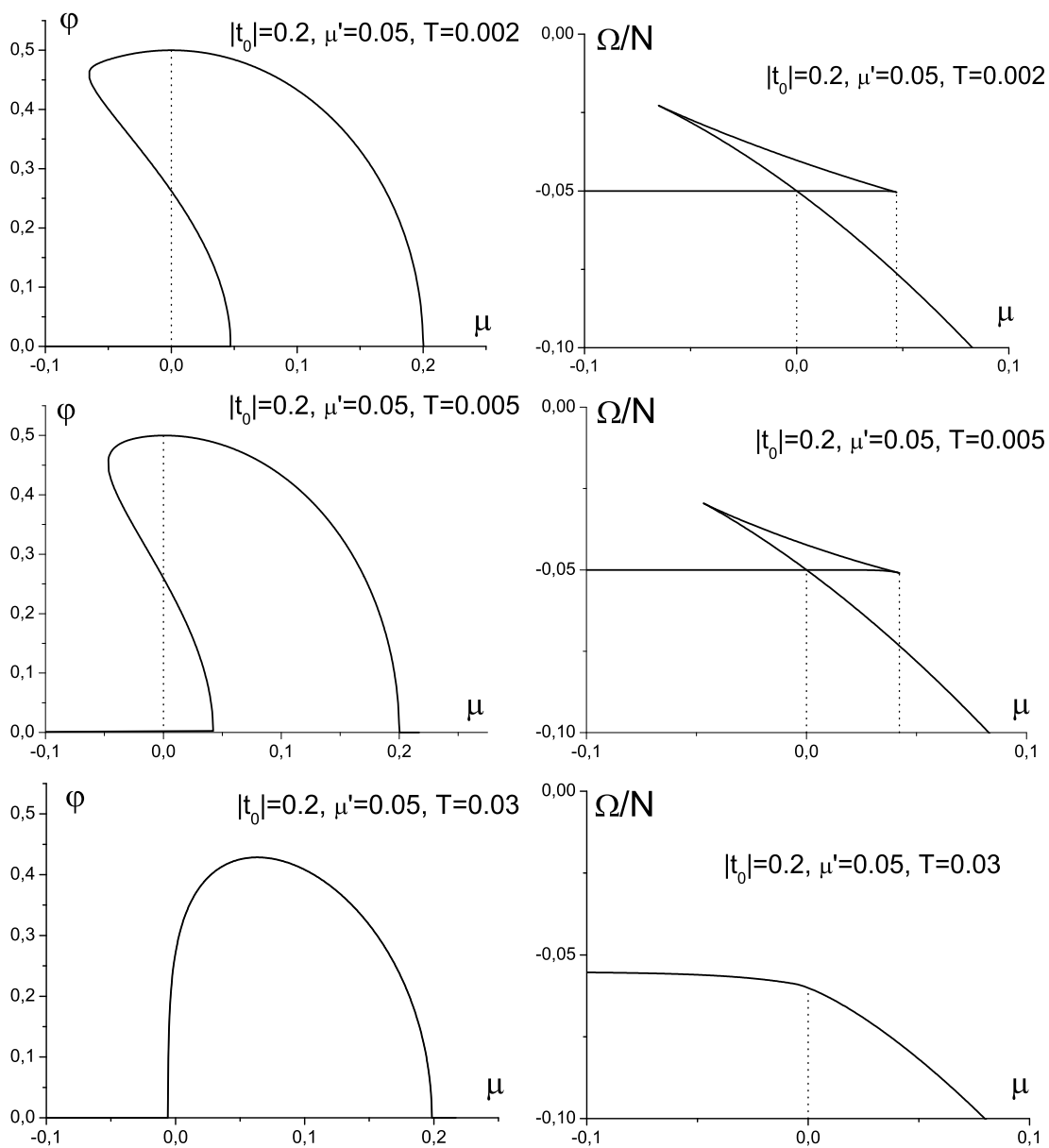


Рис. 6.5. Залежності $\varphi(\mu)$ та $\Omega_{MF}/N(\mu)$ для різних значень T при $|t_0| = 0.2$, $\mu' = 0.05$.

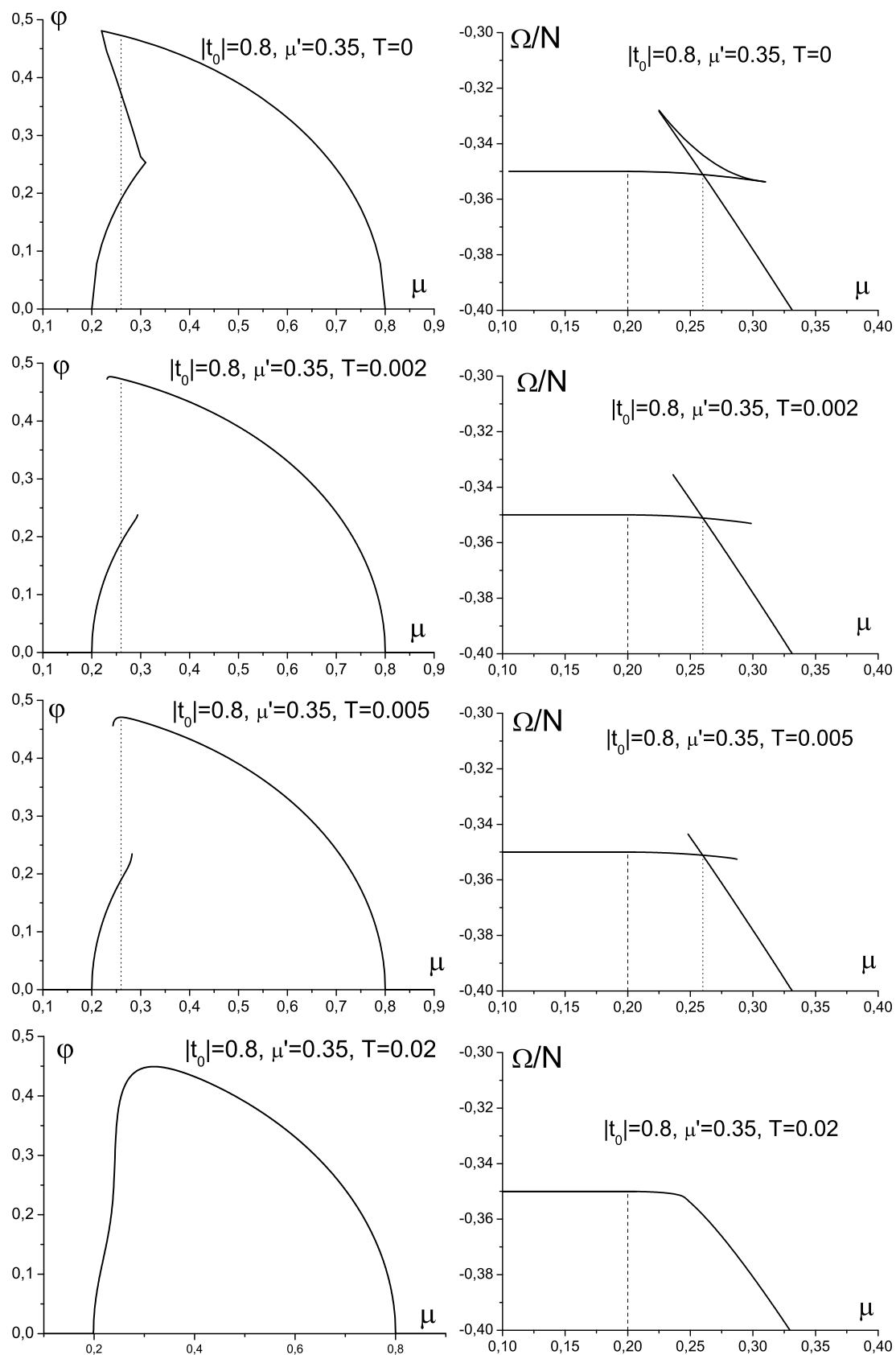


Рис. 6.6. Залежності $\varphi(\mu)$ та $\Omega_{MF}/N(\mu)$ для різних значень T при $|t_0| = 0.8$, $\mu' = 0.35$.

Варіант (ii) відрізняється від попереднього розміщенням лінії фазового переходу першого роду, що тепер знаходиться всередині області існування SF фази. При $T = 0$ вона розділяє цю область на дві частини, що характеризуються різними числами заповнення ферміонних станів. Набір рисунків 6.6 ілюструє поступове зникнення зворотнього ходу $\varphi(\mu)$ (як і відповідної особливості в $\Omega(\mu)$) при зростанні температури. Лінія переходів зникає а критичній точці яка розміщена всередині області SF фази (див. рис 6.3). Перехід з цієї фази в нормальну є другого роду. Температура критичної точки стає меншою зі зменшенням μ' до центру інтервалу $[0, U']$ (див. рис. 6.4); в цій границі фазовий перехід першого роду при $T \neq 0$ зникає.

З рис. 6.2 та 6.3 видно, що майже в усіх випадках для інтервалу $0 < \mu' < U'$ є області, де існують “реентрант” пореходи. Тут SF фаза існує при проміжних температурах між областями, де нормальна фаза є стійкою.

Тепер розглянемо фазові діаграми (μ', μ) при ненульвих температурах. Почнемо з випадку низької температури коли є присутні області значень μ' (та μ) з фазовими переходами першого роду. Діаграми (μ', μ) мають іншу форму ніж для випадків $|t_0| < U'/2$ та $U'/2 < |t_0| < U'$. Перебудова таких діаграм отриманих чисельно при зростанні T показана на рис. 6.7 та 6.8. Як видно, має місце поступове скорочення лінії фазового переходу 1-го роду в першому випадку а згодом зникнення цієї лінії при $T \neq 0$ в області $U' - |t_0| < \mu < |t_0|$ та відповідне зменшення області фазових переходів зі зростанням T в другому випадку.

В областях температури вище критичної та трикритичної точок лінії фазових переходів співіснують з спінодалями; переходи тут є другого роду. Межі між фазами визначаються рівнянням 6.7 де

$$\begin{aligned} \langle X^{nn} \rangle &= Z_0^{-1} |_{\varphi=0} e^{-\beta \varepsilon_n}; & \langle X^{\tilde{n}\tilde{n}} \rangle &= Z_0^{-1} |_{\varphi=0} e^{-\beta \varepsilon_{\tilde{n}}}; \\ Z_0 |_{\varphi=0} &= \sum_{n=0}^1 e^{-\beta \varepsilon_n} + \sum_{\tilde{n}=0}^{\tilde{1}} e^{-\beta \varepsilon_{\tilde{n}}}; \end{aligned} \quad (6.8)$$

та ε_n і $\varepsilon_{\tilde{n}}$ визначаються 6.3.

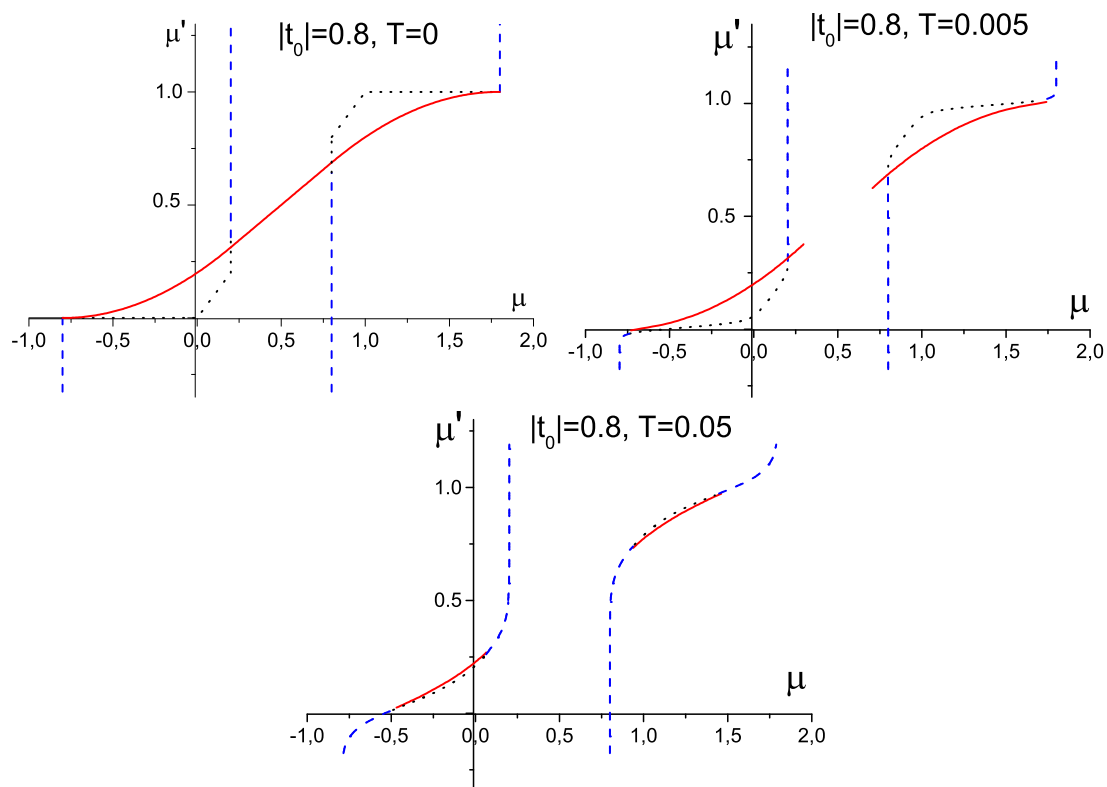


Рис. 6.7. Фазові діаграми (μ', μ) для $|t_0| = 0.8, U' = 1.0$. Випадок $U'/2 < |t_0| < U'$.

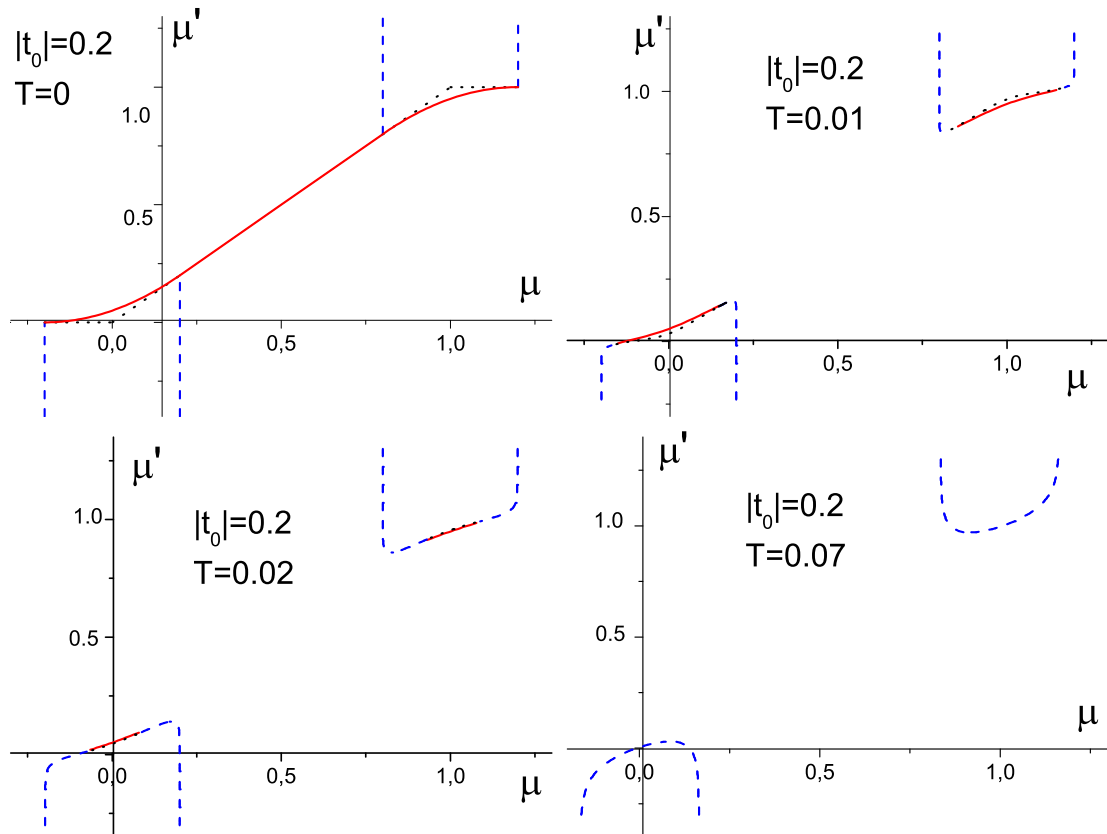


Рис. 6.8. Фазові діаграми (μ', μ) для $|t_0| = 0.2$. Випадок $0 < |t_0| < U'/2$.

У випадку $U'/2 < |t_0| < U'$, фазові діаграми, отримані з числових розрахунків, на площині (μ', μ) представлені на рисунку 6.7. Зміну форми області SF фази при поступовому зростанні температури, стартуючи з $\Theta = 0, 1U'$, показано на рисунку 6.9. При $T = 0$ ця область мала простий вигляд. Проте, як видно з графіків μ' від μ , при певній (критичній) температурі Θ_c відбувається зміна топології ліній фазових переходів. Фаза SF стає двозв'язною (вона виникає при $\Theta_c \cong 0,341U'$ якщо $|t_0| = 0,8U'$). Таке розщеплення на дві частини реалізовується в точці з координатами $\mu = \mu' = 0,5U'$. При цих значеннях хімічних потенціалів при Θ_c відбувається фазовий перехід другого роду з фази SF до фази MI.

При подальшому зростанні температури, розділені області SF фази віддаляються одна від одної і стають вузькими. Остаточно вони зникають при $\Theta_c^0 = |t_0|/2$. Ця температура отримується з рівняння

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{1}{\mu} \operatorname{th} \frac{\beta\mu}{2}, \quad (6.9)$$

чи

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{1}{\mu - U'} \operatorname{th} \frac{\beta(\mu - U')}{2}, \quad (6.10)$$

при великих від'ємних чи додатніх значеннях μ' . Температура Θ_c^0 має зміст максимальної температури, при якій фаза SF зникає в чистій моделі жорстких бозонів (в наближенні середнього поля). При $\mu' < 0$, $|\mu'| \gg U'$, ферміони практично відсутні ($\bar{n}_f \approx 0$), в той час як при $\mu' > 0$, $|\mu'| \gg U'$ майже всі вузли ґратки зайняті ферміонами ($\bar{n}_f \approx 1$). В обох границях ферміони не мають жодного впливу на фазові переходи в бозонній підсистемі, зміщуючи тільки критичне значення хімічного потенціалу бозонів. Криві фазових переходів на площині (T, μ) мають форму куполів, що симетричні стосовно точок $\mu = 0$ або $\mu = U'$ (в яких знаходяться вершини куполів).

Додаткова інформація стосовно картини фазових переходів моделі може бути отримана з діаграм $(|t_0|, \mu)$. Такі діаграми при заданому T , були побудовані

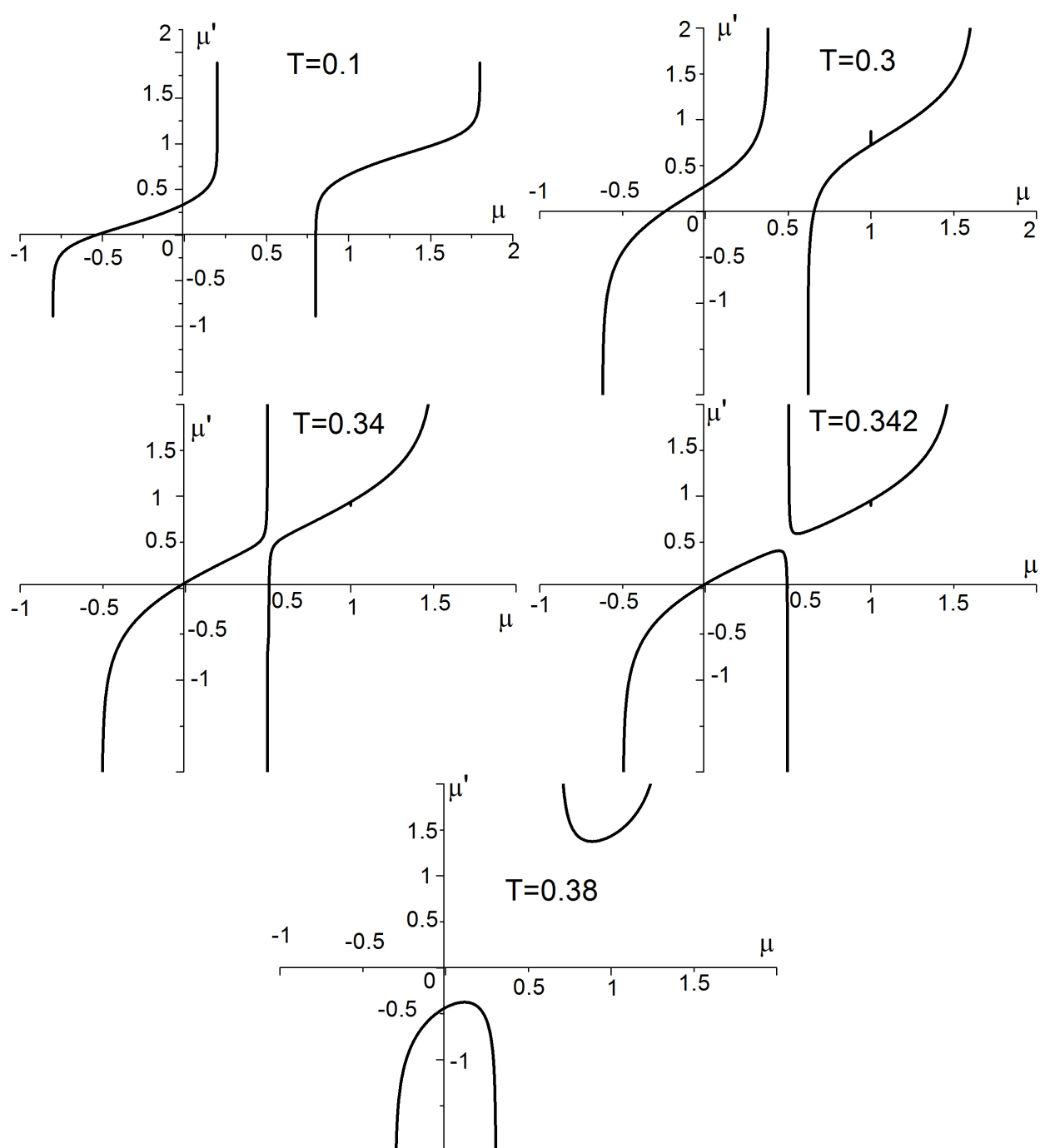


Рис. 6.9. Зміна форми області SF фази на площині (μ', μ) при поступовому зростанні температури; $|t_0| = 0.8$. Випадок $U'/2 < |t_0| < U'$.

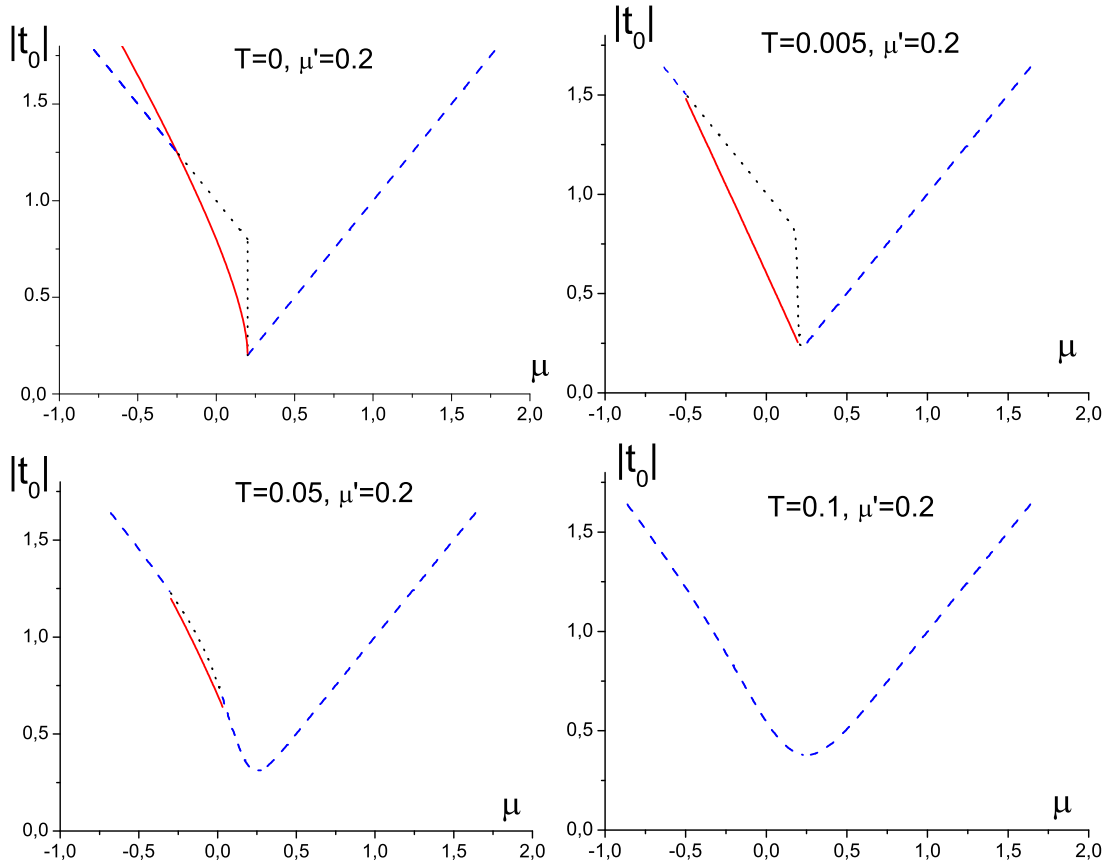


Рис. 6.10. $(|t_0|, \mu)$ фазові діаграми для $\mu' = 0.2, U' = 1.0$. Випадок $0 < \mu' < U'/2$.

використовуючи набір діаграм (T, μ) та (μ', μ) ; деякі приклади представлено на рис. 6.10 та 6.11.

Набір графіків на рис. 6.10 ілюструє зміну умов існування SF та MI фаз та поступове зникнення лінії фазового переходу першого роду при зростанні температури (що узгоджується з попередніми результатами). В порівнянні з діаграмами, що відносяться до випадку $|t_0| < U'/2$, на рис. 6.11 представлено діаграму для $U'/2 < |t_0| < U'$. Існує повна відповідність між цими випадками при заміні $\mu' \rightarrow U' - \mu'$ та при дзеркальному відображенні $\mu \rightarrow U - \mu$. Фазові переходи першого роду відбуваються в цьому випадку між SF фазою та : і) нормальною (MI) фазою з низькою концентрацією ферміонів (нижче половинного заповнення) при $\mu > U'/2$; ii) нормальною фазою (MI) з високою концентрацією ферміонів (більше половинного заповнення) при $\mu < U'/2$.

Випадок $\mu' = U'/2$ є особливим. Відповідні $(|t_0|, \mu)$ фазові діаграми при різних температурах показано на рис. 6.12. Для такого значення μ' , фазовий пе-

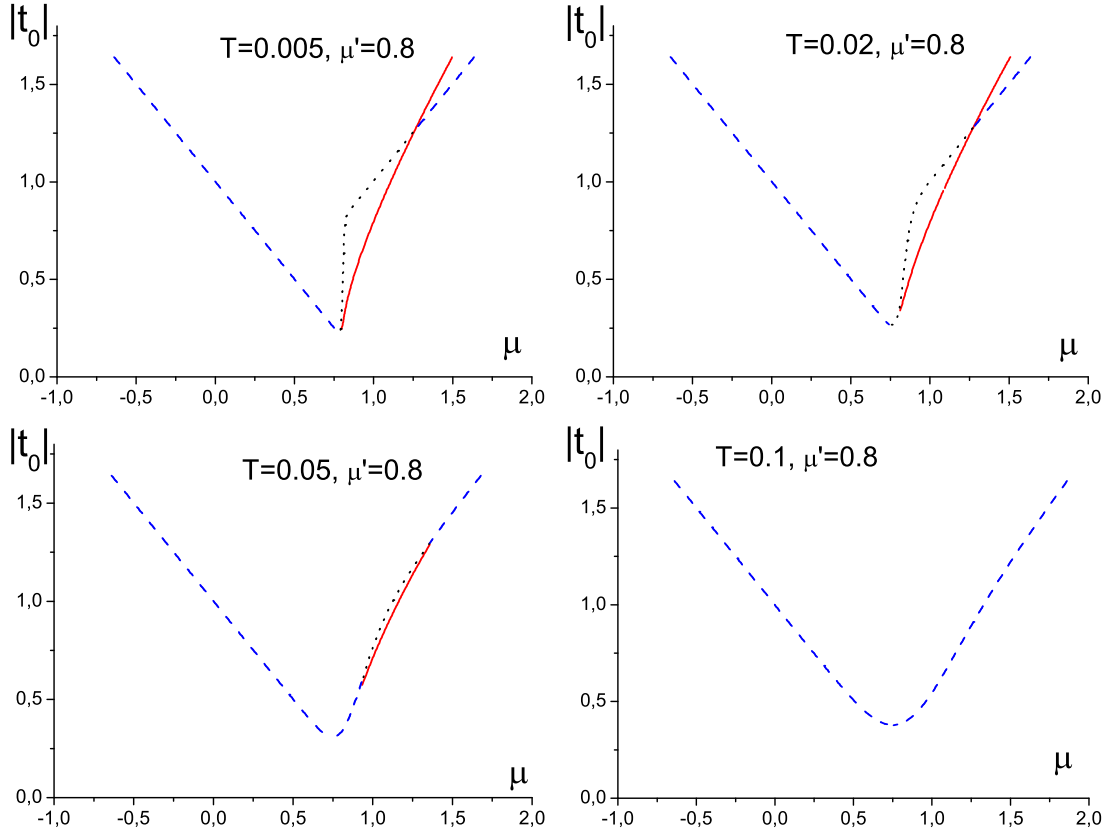


Рис. 6.11. $(|t_0|, \mu)$ фазові діаграми для $\mu' = 0.8, U' = 1.0$. Випадок $U'/2 < \mu' < U'$.

рехід при $T \neq 0$ є переходом другого роду. Область існування SF фази спочатку зміщується до вищих значень $|t_0|$ при зростанні T , стає ширшою (в напрямку осі μ), проте згодом, при достатньо високих температурах, стає вужчою і остаточно зникає. Така поведінка узгоджується з діаграмами (T, μ) при $\mu = U'/2$ (див. рис. 6.13).

Симетричний випадок $\mu = U'/2$ (що відповідає половинному заповненню бозонів ($\bar{n}_B = 1/2$)) заслуговує окремого обговорення. Розгляд термодинаміки в цьому випадку сильно спрощується.

Енергії локальних станів (6.3) в такому випадку:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0',1'} &= -\frac{U'}{4} \pm \sqrt{\left(\frac{U'}{4}\right)^2 + t_0^2 \varphi^2}, \\ \varepsilon_{\tilde{0}',\tilde{1}'} &= -\mu' + \frac{U'}{4} \pm \sqrt{\left(\frac{U'}{4}\right)^2 + t_0^2 \varphi^2}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

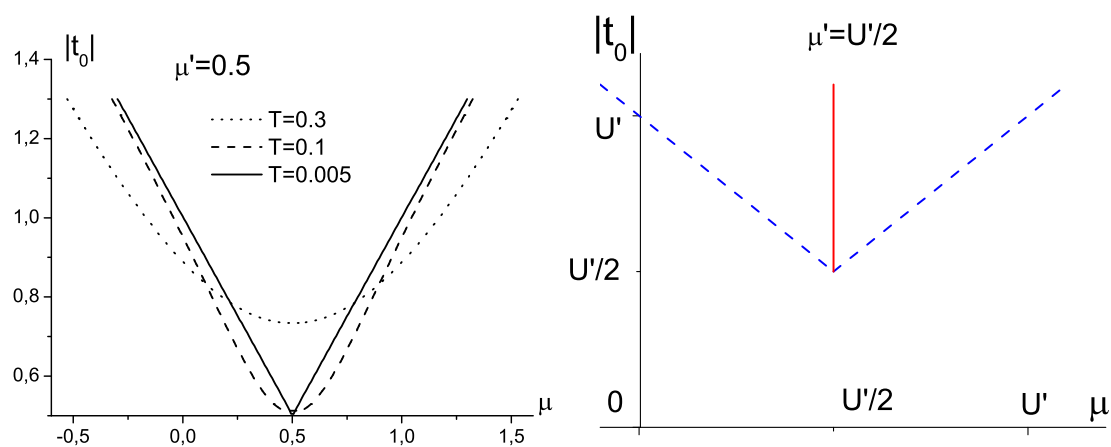


Рис. 6.12. $(|t_0|, \mu)$ фазові діаграми при ненульовій температурі (зліва) та для $T = 0$ (справа). Випадок $\mu' = U'/2$

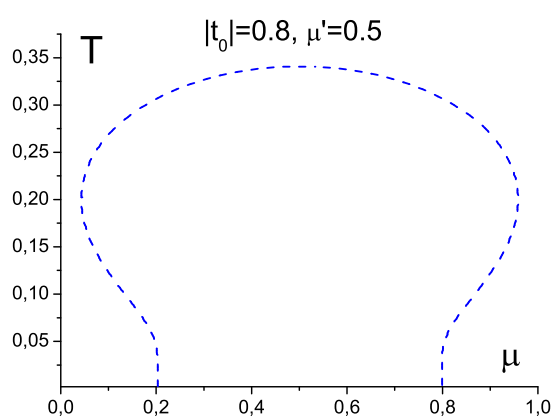


Рис. 6.13. (T, μ) Фазова діаграма у випадку $\mu' = U'/2$

Відповідно, для статистичної суми отримаємо:

$$Z_0 = 2 \left(e^{\frac{\beta U'}{4}} + e^{\beta \mu'} e^{\frac{-\beta U'}{4}} \right) \cosh \left(\beta \sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2} \right), \quad (6.12)$$

та для рівняння для параметру порядку:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|t_0|} &= \frac{\langle X^{1'1'} \rangle - \langle X^{0'0'} \rangle + \langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle - \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{2 \sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2}} \\ &= \frac{\sinh \left(\beta \sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2} \right) \left(e^{\frac{\beta U'}{4}} + e^{\beta \mu'} e^{\frac{-\beta U'}{4}} \right)}{\sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2} Z_0}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Замінивши вираз (6.12), отримаємо наступне рівняння:

$$\sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2} = \frac{|t_0|}{2} \operatorname{th} \left(\beta \sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2} \right), \quad (6.14)$$

і вже використовуючи це рівняння, отримаємо ненульові розв'язки для φ .

Як результат, розглянемо поведінку радикала $\sqrt{(U'/4)^2 + t_0^2 \varphi^2} \equiv Q$ як функції температури. Величина Q є спадаючою функцією температури $\Theta = 1/\beta$, проте не досягає нуля при зростанні температури і обривається на значенні $Q_{min} = U'/4$, що відповідає точці при якій параметр φ перетворюється на нуль. Виходячи з цього можна зробити два висновки:

1. Ненульові розв'язки для φ існують тільки для $Q_{min} < \frac{|t_0|}{2}$, тобто, для $|t_0| > U'/2$.
2. Величина $Q = Q_{min}$ відповідає температурі спінодалі, і визначається рівнянням

$$U'/4 = \frac{|t_0|}{2} \operatorname{th} \beta U'/4, \quad (6.15)$$

(це видно з (6.14) для $\varphi = 0$). Це призводить до виразу

$$\Theta_{spinod.} = \frac{U'/4}{\operatorname{Arth} \frac{U'}{2|t_0|}}. \quad (6.16)$$

З рівняння (6.14), можна бачити, що параметр порядку φ є поступово спадною функцією температури, що перетворюється на нуль при $\Theta \rightarrow \Theta_{spinod}$.

Важливо відмітити, що параметр порядку φ та температура Θ_c не залежать при $\mu = U'/2$ від хімічного потенціалу ферміонів μ' . Це є справедливим для всієї області значень μ' (не тільки для інтервалу $0 < \mu' < U'$ але і для $\mu' < 0$ та $\mu' > U'$). Для випадку, що розглянуто, ферміонна підсистема має вплив на температуру переходу в стан з бозе-конденсатом тільки через взаємодію з бозонами U' . Існує критичне значення $U'_{crit} = 2|t_0|$ при якому SF фаза зникає в симетричному випадку $\mu = U'/2$ (див. рис. 6.14).

Наведене вище показує, що температура Θ_{spinod} є такою ж як і ця, при якій область SF фази розпадається на дві окремі частини (цей ефект було описане вище). Фазовий перехід до SF фази в цьому випадку є другого роду.

Виходячи з виразу (6.4) для термодинамічного потенціалу і використовуючи диференціювання, можна отримати вирази для середніх концентрацій бозонів та ферміонів:

$$\bar{n}_B = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial \mu}; \quad \bar{n}_F = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial \mu'}. \quad (6.17)$$

В результаті, на основі (6.4) та (6.7), отримаємо:

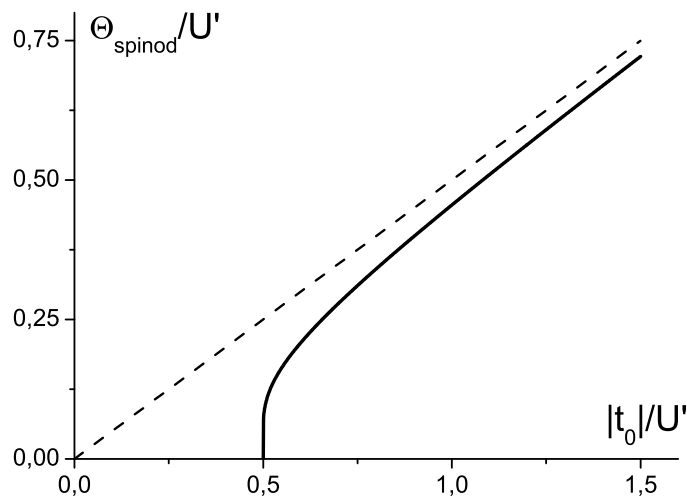


Рис. 6.14. Температура Θ_{spinod} як функція $|t_0|$. Пунктирна лінія відповідає температурі $\Theta_c^0 = kT_c^0$.

$$\begin{aligned}
\bar{n}_B &= \frac{1}{2} - \frac{\mu}{4\sqrt{\mu^2/4 + t_0^2\varphi^2}} \langle X^{0'0'} - X^{1'1'} \rangle \\
&\quad - \frac{\mu - U'}{4\sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2\varphi^2}} \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} - X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle, \\
\bar{n}_F &= \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle.
\end{aligned} \tag{6.18}$$

Параметр порядку φ має бути виключеним з цих співвідношень заміною на рівноважне значення ($\varphi = 0$, для нормальної фази та розв'язок рівняння (6.13), для фази SF). Остаточно, ми отримаємо середні $\bar{n}_B$ та $\bar{n}_F$ як функції хімічних потенціалів μ та μ' і температури.

Концентрації змінюються на лінії фазових переходів першого роду стрибкоподібно. Їхні значення на цій лінії представлено на рис. 6.15 та 6.16 у формі графіків $\bar{n}_B(\mu')$ та $\bar{n}_F(\mu')$. Для кожного даного значення μ' наведено граничні значення $\bar{n}_B^+$ та $\bar{n}_B^-$ ($\bar{n}_F^+$) і ($\bar{n}_F^-$), що їх отримано наближенням до лінії фазового переходу з одного та іншого боків (від нормальної та SF фаз).

Величини стрибків $\Delta\bar{n}_B = \bar{n}_B^+ - \bar{n}_B^-$ та $\Delta\bar{n}_F = \bar{n}_F^+ - \bar{n}_F^-$ змінюються зі спаданням температури. Існує два окремих інтервали μ' з стрибкоподібною поведінкою концентрацій; вони об'єднуються разом і формують один ($0 < \mu' < U'$) в границі $T \rightarrow 0$ у випадку $U'/2 < |t_0| < U'$ (рис. 6.15). При високих температурах, стрибок $\Delta\bar{n}_{B,F}$ зникає (разом зі зміною роду фазового переходу з першого на другий).

Існування стрибків для концентрацій бозе- та фермі-частинок (при перетині лінії фазового переходу MI-SF) може трактуватись як можливість фазового розшарування в системі для фіксованої концентрації. Разом з тим, розшарування буде полягати в сегрегації на області з MI та SF фазами. При низьких температурах, для $|t_0| < U'/2$ та $\mu' \gtrsim 0$, фаза MI заповнена в основному ферміонами, в той час як у фазі SF бозе-конденсат характеризується проміжними значеннями концентрації бозонів, а концентрація ферміонів є малою. У випадку $U'/2 < |t_0| < U'$ та $\mu' \lesssim U'$, характер фаз є іншим: у фазі MI концентрація бозонів переважає, в той час коли в фазі SF бозе-конденсат з проміжними значеннями концентрації

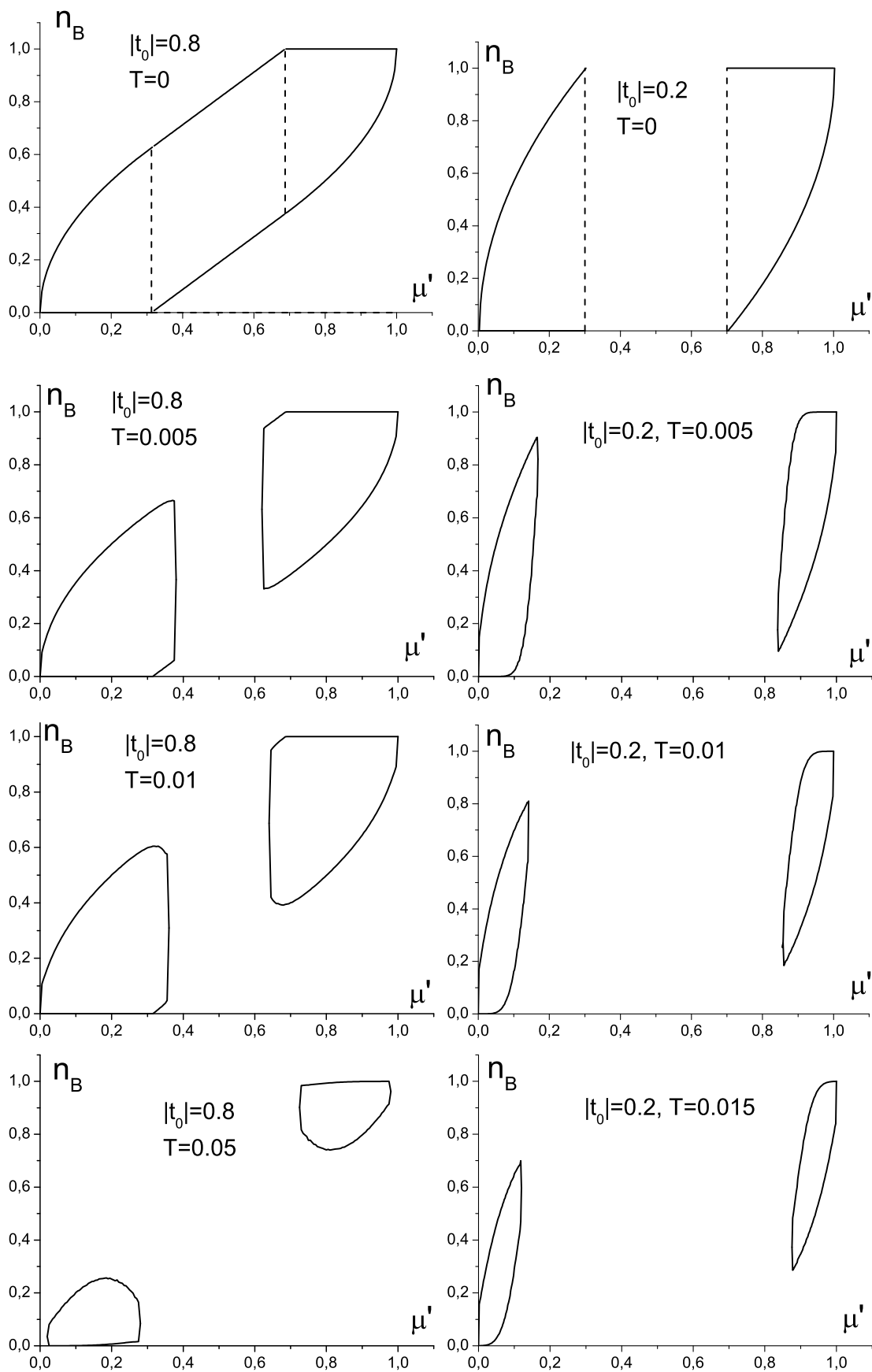


Рис. 6.15. $(\bar{n}_B, \mu')$ діаграми, що показують значення концентрації бозонів $\bar{n}_B$ на лінії фазових переходів першого роду.

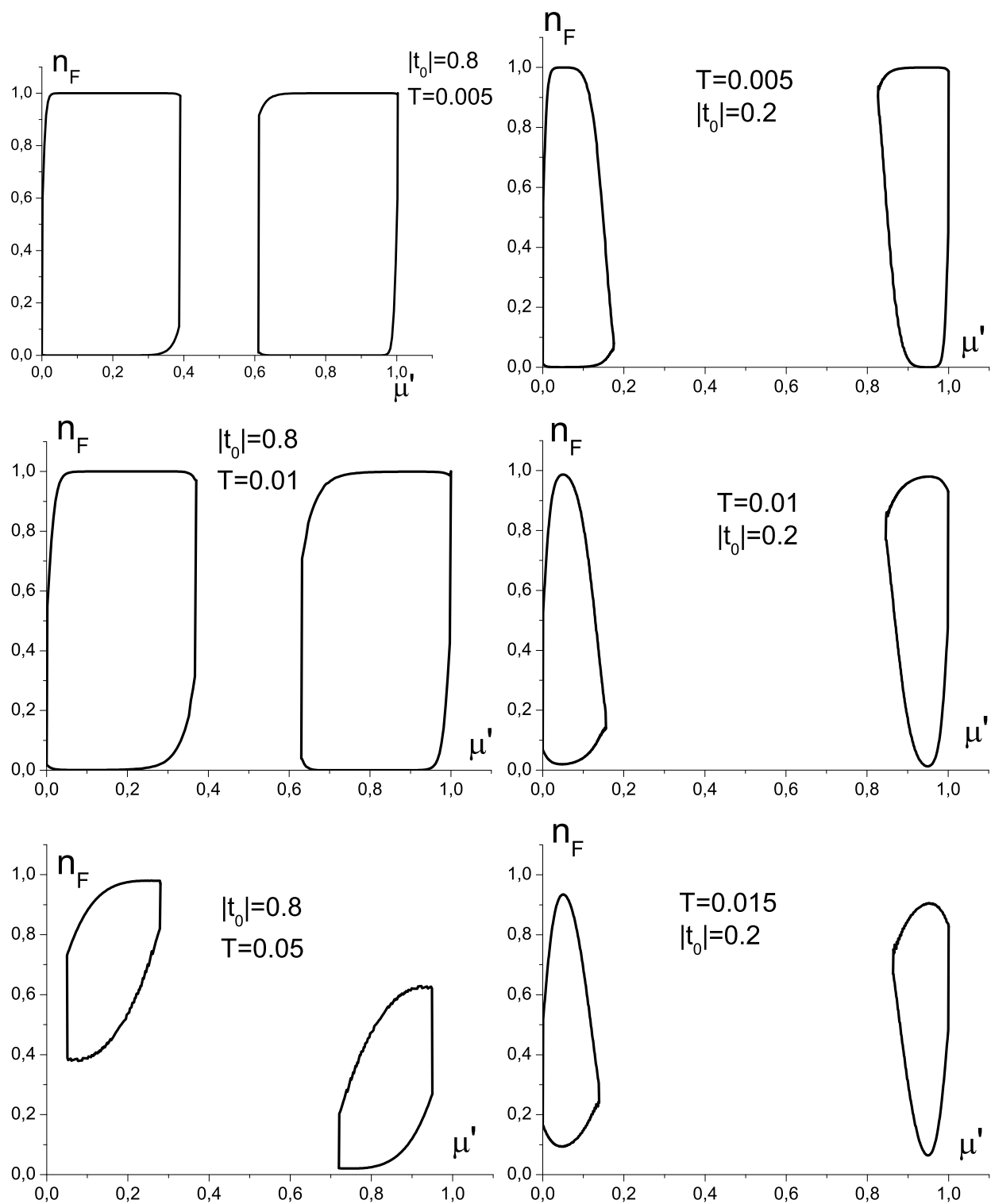


Рис. 6.16. $(\bar{n}_F, \mu')$ діаграми, що ілюструють величини концентрацій ферміонів $\bar{n}_F$ на лінії фазового переходу першого роду.

бозонів існує на фоні високої концентрації ферміонів. У цьому випадку на фазове розшарування впливає одновузлове відштовхування ($U' > 0$) між ферміонами та бозонами.

6.4. Висновки

Розгляд термодинаміки моделі БФХ у границі жорстких бозонів та у випадку “важких” ферміонів, проведений у 5 розділі дисертації для $T = 0$ у рамках великого канонічного ансамблю (коли вважаються заданими хімічні потенціали частинок обох сортів), поширено у даному розділі на ненульові температури. Застосовано аналогічний підхід; бозон-ферміонна одновузлова взаємодія U' врахована точно, а перенесення бозонів між вузлами ґратки взято до уваги у наближенні середнього поля.

Шляхом аналізу умов нестабільності (при $T \neq 0$) нормальної (МІ) фази стосовно конденсації бозонів та дослідження форми отриманих таким способом спінодалей виявлено, що зовні інтервалу $[0, U']$ для μ' криві спінодалей мають звичну куполо-подібну форму, однак при наближенні до цього інтервалу криві підлягають помітній деформації і при потраплянні всередину з'являються два значення температури нестабільності, що відповідають одному значенню μ . Зі зміною T стають можливі ”ре-ентрант” переходи. Щоб отримати справжні фазові діаграми (T, μ) , було досліджено поведінку термодинамічного потенціалу в таких областях і встановлено умови, за яких лінія фазових переходів не накладається на лінію спінодалей і переходи стають першого роду (замість другого як раніше). Побудовано відповідні фазові діаграми (T, μ) . Тут зреалізуються два випадки. У першому з них лінія фазових переходів 1-го роду розділяє області з МІ та SF фазами; область існування фази SF є ширшою ніж та, що обмежена спінодалями. Така лінія переходить при певній температурі в трикритичній точці у лінію фазових переходів 2-го роду. В другому випадку лінія фазових переходів першого роду знаходиться всередині області SF фази та закінчується при зростанні температури в стандартній критичній точці (з координатами μ_c, T_c). При $T = 0$ вона ділить цю

область на згадані вище (у розділі 5) частини з бозе-конденсатом різних типів: $SF^{(\tilde{1})}$, де всі ферміонні стани заповнені, та $SF^{(1')}$, де ферміони відсутні. Різниця між цими двома типами бозе-конденсату поступово зникає у випадку ненульових температур. Якщо $T > T_c$, існує бозе-конденсат тільки одного типу з проміжним значенням ферміонної концентрації, яке змінюється як функція μ .

Описані вище особливості фазових діаграм (T, μ) вказують на скорочення і подальше зникнення (при зростанні T) ліній переходу 1-го роду на фазових діаграмах на площині (μ', μ) . При температурах вище трикритичної залишаються тільки переходи 2-го роду (спінодалі). Області SF фази при $|t_0| < U'/2$ завжди роз'єднані. У випадку $U'/2 < |t_0| < U'$ існує лише одна область SF фази при низьких температурах, проте при зростанні T настає зміна топології фазової діаграми (μ', μ) і область SF фази стає двозв'язною. Таке розщеплення на дві частини відбувається в точці з координатами $\mu = \mu' = 0,5U'$. Для цих значень хімічних потенціалів, які відповідають половинному заповненню для бозонів $\bar{n}_B = 1/2$, має місце фазовий перехід 2-го роду з SF до MI фази.

Критична температура такого переходу не залежить від хімічного потенціалу ферміонів μ' і ферміонна підсистема впливає на температуру переходу в стан з бозе-конденсатом тільки через взаємодію з бозонами U' . Для останньої існує критичне значення $U'_{crit} = 2|t_0|$, і коли U' перевершує це значення, фаза SF в симетричному випадку $\mu = U'/2$ зникає.

У обох згаданих вище випадках ($|t_0| < U'/2$ і $U'/2 < |t_0| < U'$) розділені області SF фази при подальшому рості T звужуються і зникають при температурі T_0 .

Підсумовуючи, зазначимо, що зміни у картині фазових переходів, які відбуваються при $T \neq 0$ залишаються для повної моделі БФХ (при відході від границі жорстких бозонів) ще мало дослідженими. Можна відзначити у цьому зв'язку роботу [119], де для границі важких ферміонів було показано, що при скінченних температурах мінімальне значення параметра перенесення бозонів $|t_0|_{min}$ (нижче якого неможлива конденсація бозонів при наявності ферміонів) є ненульовим навіть у простому наближенні середнього поля. З даних, наведених в [120] випливає,

що область SF фази стає ширшою біля точки $|t_0|_{min}$ і значення $|t_0|_{min}$ зростає при підвищенні температури. Якісно це узгоджується з нашими результатами.

РОЗДІЛ 7

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ФЕРМІОНІВ У МОДЕЛІ БОЗЕ-ФЕРМІ-ХАББАРДА

7.1. Вступ

Дослідження ферміонного енергетичного спектру моделі Бозе-Фермі-Хаббарда і його перебудови, яка відбувається при появі бозе-конденсату (у SF фазі) є цікавою задачею, важливість якої пов'язана з одним із способів виявлення самого факту існування конденсату у бозон ферміонній-суміші. Спектр ферміонів у моделі БФХ досі не вивчався, у той час як бозонний спектр проаналізований достатнім чином для звичайної моделі Бозе-Хаббарда і отримане легко перенести на випадок, коли присутні ферміони. Основною рисою бозонного спектру є існування гілки, яка у нормальній (MI) фазі відділена щілиною від рівня хімічного потенціалу бозонів. Однак, при прямованні до точки переходу 2-го роду до SF фази щілина занулюється, і у SF фазі $\hbar\omega \rightarrow 0$, при $q \rightarrow 0$. Спектр ферміонів, які ми вважаємо безспіновими (або частинками з зафіксованою спіновою компонентою, що у оптичних ґратках легко досягти за допомогою прикладеного магнітного поля), при відсутності бозонів є звичайним однозонним, як для вільних частинок. Нашим завданням у цьому розділі є дослідження трансформації, якої він зазнає внаслідок взаємодії з бозонами. Задача є подібною до тієї, що розв'язувалась у випадку псевдоспін-електронної моделі (розділ 2) і де йшла мова про спектр електронів, що взаємодіють із псевдоспіновою підсистемою.

Як і раніше, у попередніх розділах, обмежимося випадком жорстких бозонів і в основу розгляду покладемо описану чотиристанову модель. В її рамках одновузлові взаємодії частинок різних сортів враховуються точно.

Використовуємо метод, що базується на застосуванні формалізму операторів Хаббарда які діють на одновузловому базисі. Спектр знайдено за допомогою ферміонних функцій Гріна, які розраховані в дусі наближення Хаббард-I (випадок сильної одновузлової взаємодії). Знайдені відповідні спектральні густини. Звернемо увагу на умови появи додаткових зон в ферміонному спектрі що виникають у стані з бозе-конденсатом. Такі додаткові зони можуть вказувати на наявність композитних збуджень (коли поява ферміона на вузлі супроводжується одночасною появою (або зникненням) бозона).

7.2. Гамільтоніан моделі та його перетворення при наявності бозе-конденсату

Система надхолодних бозонів та спін-поляризованих (“безспінових”) ферміонів в оптичних ґратках добре описується в рамках гамільтоніана моделі Бозе-Фермі-Хаббарда на мові операторів народження та знищення бозонів b^+ , b та ферміонів a^+ , a [131, 144].

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + U' \sum_i n_i^b n_i^f - \mu \sum_i n_i^b - \mu \sum_i n_i^f \quad (7.1)$$

Такий гамільтоніан використовувався нами у попередніх розділах при розгляді термодинаміки БФХ.

Підхід безспінових ферміонів може бути застосований для сумішей надхолодних ферміонів на оптичних ґратках в присутності сильного магнітного поля. В такому випадку спіни ферміонів будуть орієнтовані в одному напрямку і їх можна явно не вказувати. Ми не зупиняємося спеціально на типі ґратки, але для числових розрахунків використовуємо напів-елліптичну густину станів (див. нижче), яка відповідає (при певному наближенні) простій кубічній ґратці.

Після переходу до одновузлового базису $|n_B, n_F\rangle$, який означається як і в розділі 4 наступним чином: $|n\rangle = |n, 0\rangle$, $|\tilde{n}\rangle = |n, 1\rangle$, де $n_B(n_F)$ - число заповнення

бозонів (ферміонів), та переходу до представлення операторів Хаббарда $X_i^{mn} = |n, i\rangle\langle m, i|$, отримаємо (див. розділ 4):

$$\hat{H} = \sum_{i,n} \lambda_n X_i^{nn} + \sum_{i,\tilde{n}} \lambda_{\tilde{n}} X_i^{\tilde{n}\tilde{n}} + \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j, \quad (7.2)$$

де

$$\lambda_n = \frac{U}{2}n(n-1) - n\mu, \quad \lambda_{\tilde{n}} = \frac{U}{2}\tilde{n}(\tilde{n}-1) - \mu\tilde{n} - \mu' + U'\tilde{n}, \quad (7.3)$$

та

$$b_i = \sum_n \sqrt{n+1} X_i^{n,(n+1)} + \sum_{\tilde{n}} \sqrt{\tilde{n}+1} X_i^{\tilde{n},(\tilde{n}+1)}, \quad a_i = \sum_n X_i^{n,\tilde{n}}. \quad (7.4)$$

Тут $\lambda_{n(\tilde{n})}$ - це енергії одновузлових станів.

Для дослідження ферміонного спектру бозон-ферміонної суміші, що описується гамільтоніаном (7.2), використовуємо підхід двочасових температурних функцій Гріна $\langle\langle a|a^+ \rangle\rangle_{\omega,q}$, побудованих на операторах народження та знищення ферміонів. Полюси цих функцій описують одновузловий спектр, тоді як їх уявні частини (після аналітичного продовження $\omega \rightarrow \omega - i\varepsilon$) визначають густину ферміонних станів. В нашому випадку це означає, що ми повинні розрахувати функції Гріна побудовані на операторах Хаббарда $\langle\langle X^{n\tilde{n}}|X^{\tilde{r}r} \rangle\rangle$. Подібне представлення було використано раніше в розділі 2, де електронний енергетичний спектр псевдоспін-електронної моделі був розрахований в рамках методу динамічного середнього поля (ДСП), та наближення сплаву. Тоді ж було досліджено вплив псевдоспін-електронної взаємодії, локального поля асиметрії та тунельного розщеплення рівнів на існування та число електронних підзон.

Використаємо рівняння руху для фур'є-образу функції Гріна

$$\hbar\omega\langle\langle A|B \rangle\rangle = \frac{\hbar}{2\pi}[A, B] + \langle\langle [A, H]|B \rangle\rangle. \quad (7.5)$$

Отже, ми повинні розрахувати наступні комутатори:

$$[X_p^{m,\tilde{m}}, \sum_{i,n} \lambda_n X_i^{nn} + \sum_{i,\tilde{n}} \lambda_{\tilde{n}} X_i^{\tilde{n}\tilde{n}}] = (\lambda_{\tilde{m}} - \lambda_m) X_p^{m,\tilde{m}} = (U' \tilde{m} - \mu') X_p^{m,\tilde{m}}, \quad (7.6)$$

$$\begin{aligned} & [X_p^{m,\tilde{m}}, \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j] \\ &= \sum_j t_{pj} (-\sqrt{m+1} X_p^{m+1,\tilde{m}} + \sqrt{\tilde{m}} X_p^{m,\tilde{m}-1}) b_j \\ &+ \sum_i t_{ip} b_i^+ (-\sqrt{m} X_p^{m-1,\tilde{m}} + \sqrt{\tilde{m}+1} X_p^{m,\tilde{m}+1}) \\ &+ \sum_j t'_{pj} (X_p^{mm} + X_p^{\tilde{m}\tilde{m}}) a_j. \end{aligned} \quad (7.7)$$

В подальшому ми будемо використовувати розчеплення, що відповідають наближенню хаотичних фаз для бозонів та наближенню Хаббард-I для ферміонів. Такий підхід, як відомо з теорії сильноскорельованих електронних систем [8], виходить за рамки наближення середнього поля, враховуючи явно внески від різних конфігурацій локальних станів (згідно застосуванню базису Хаббардівських станів, одновузлова взаємодія U' враховується в нульовому наближенні). Замінюючи в (7.7)

$$\begin{aligned} b_j &\rightarrow \langle b_j \rangle \equiv \varphi, \quad b_i^+ \rightarrow \langle b_j^+ \rangle \equiv \varphi^* = \varphi, \\ (X_p^{mm} + X_p^{\tilde{m}\tilde{m}}) &\rightarrow \langle X^{mm} + X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle, \end{aligned} \quad (7.8)$$

та беручи до уваги, що наша система може перебувати в стані з однорідним бозе-конденсатом (БК), що описується параметром порядку φ .

Тоді:

$$\begin{aligned} & [X_p^{m,\tilde{m}}, \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_{\langle i,j \rangle} t'_{ij} a_i^+ a_j] \rightarrow \\ &= t_0 \varphi (-\sqrt{m+1} X_p^{m+1,\tilde{m}} + \sqrt{\tilde{m}} X_p^{m,\tilde{m}-1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + t_0 \varphi_i^* (-\sqrt{m} X_p^{m-1, \tilde{m}} + \sqrt{\tilde{m} + 1} X_p^{m, \tilde{m}+1}) \\
& + \sum_j t'_{pj} \langle X^{mm} + X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle a_j,
\end{aligned} \tag{7.9}$$

де: $t_0 = \sum_{i,j} t_{ij} \equiv t_{\vec{q}=0}$. Згідно трансляційної інваріантності $t_{ij} = t(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$; при переході до квазіімпульсного представлення, для фур'є-образу отримуємо:

$$t_{\vec{q}} = \sum_j e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{ij}. \tag{7.10}$$

Остаточно, рівняння для функцій Гріна $\langle\langle X^{m\tilde{m}} | X^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$ може бути спрощено, і у випадку близьких рівнів енергії $\lambda_m, \lambda_{\tilde{m}}$ та $\lambda_{\tilde{m}-1}$ записано у формі:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega \langle\langle X_p^{m\tilde{m}} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle &= \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{pr} \delta_{mn} \delta_{\tilde{m}\tilde{n}} \langle X^{mm} + X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle \\
&+ (U'\tilde{m} - \mu') \langle\langle X_p^{m\tilde{m}} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle + t_0 \varphi \sqrt{\tilde{m}} \langle\langle X_p^{m\tilde{m}-1} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle \\
&+ \sum_j t'_{pj} \langle X^{mm} + X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle \langle\langle a_j | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{7.11}$$

Щоб отримати повну систему рівнянь, нам необхідно знайти функцію Гріна $\langle\langle X_p^{m\tilde{m}-1} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$. Для її розрахунку ми використовуємо ті самі кроки та наближення, що і до розрахованої раніше функції $\langle\langle X_p^{m\tilde{m}} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$. Остаточно отримаємо:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega \langle\langle X_p^{m\tilde{m}-1} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle &= \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{pr} \left(\delta_{mn} \langle X^{\tilde{n}\tilde{m}-1} \rangle + \delta_{\tilde{m}-1, \tilde{n}} \langle X^{mn} \rangle \right) \\
&+ (\lambda_{\tilde{m}-1} - \lambda_m) \langle\langle X_p^{m\tilde{m}-1} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle + t_0 \varphi^* \sqrt{\tilde{m}} \langle\langle X_p^{m\tilde{m}} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle + \sum_j t'_{pj} \frac{\varphi^*}{\sqrt{\tilde{m}}} \langle\langle a_j | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{7.12}$$

Застосувавши перетворення Фур'є для параметра переносу та функції Гріна, ми отримаємо остаточну систему рівнянь:

$$(\hbar\omega - U'm + \mu') G^{m\tilde{m}, \tilde{n}n}(\omega, q) = \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{mn} \delta_{\tilde{m}\tilde{n}} \langle X^{mm} + X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle +$$

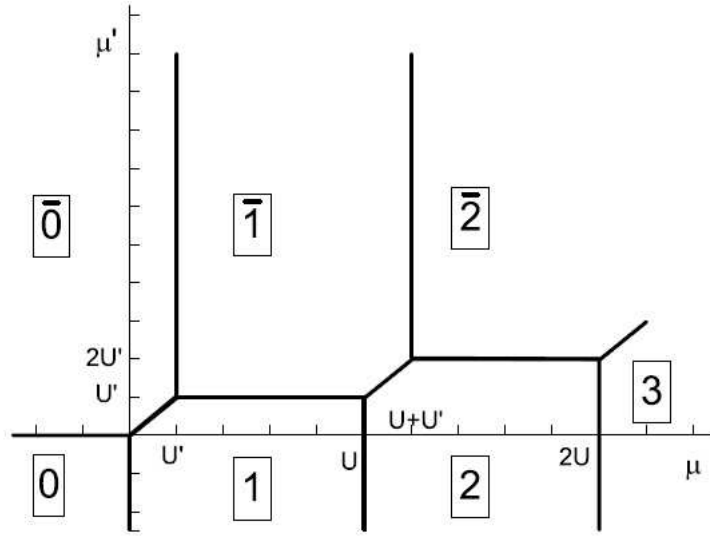


Рис. 7.1. Діаграма основного стану моделі Бозе-Фермі-Хаббарда у випадку $0 < U' < U$ (див. рис. 4.1 (а))

$$+ t_0 \varphi \sqrt{\tilde{m}} G^{m\tilde{m}-1, \tilde{n}n}(\omega, q) + t'_q \langle X^{mm} + X^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle \langle \langle a | X^{\tilde{n}n} \rangle \rangle_{\omega, q}; \quad (7.13)$$

$$\begin{aligned} (\hbar\omega - \lambda_{\tilde{m}-1} + \lambda_m) G^{m\tilde{m}-1, \tilde{n}n}(\omega, q) &= \frac{\hbar}{2\pi} \left(\delta_{mn} \langle X^{\tilde{m}\tilde{m}-1} \rangle + \delta_{\tilde{m}-1, \tilde{n}} \langle X^{mn} \rangle \right) \\ &+ t_0 \varphi \sqrt{\tilde{m}} G^{m\tilde{m}, \tilde{n}n}(\omega, q) + \frac{t'_q \varphi^*}{\sqrt{\tilde{m}}} \langle \langle a | X^{\tilde{n}n} \rangle \rangle_{\omega, q}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

7.3. Чотиристанове наближення

Спростимо систему рівнянь (7.13, 7.14), використовуючи підхід, коли приймається до уваги скінченне число одновузлових станів $|n_B, n_F\rangle$. Раніше (розділ 4) ми дослідили фазові діаграми основного стану моделі Бозе-Фермі-Хаббарда у випадку відсутнього переносу.

Наведемо одну з таких діаграм для випадку $0 < U' < U$ (див. рис. 7.1)

У границі $U \rightarrow \infty$ (це відповідає наближенню жорстких бозонів) ми отримуємо випадок коли можна розглядати тільки чотири стани: $|0\rangle$, $|\tilde{0}\rangle$, $|1\rangle$ та $|\tilde{1}\rangle$. Це наближення також має зміст, коли U (енергія відштовхування між бозонами на вузлі) набагато більша за U' (енергія одновузлової взаємодії між ферміонами та бозонами). Ситуація, коли необхідно враховувати енергію відштовхування між

бозонами на вузлі U може бути зреалізована в оптичних ґратках у випадку глибоких ям потенціальної енергії (що досягається зростанням інтенсивності лазерних променів). З іншого боку, параметр U' може змінюватись в досить великому діапазоні регулюванням умов експерименту (за допомогою, зокрема, резонансу Фешбаха [145]).

Термодинаміка отриманої таким чином 4-станової моделі була детально розглянута у розділах 5 і 6 виходячи з середньопольового гамільтоніана, записаного після унітарного перетворення, що враховує внесок бозе-конденсату, у діагональній формі (див. (5.12), (5.13)):

$$\hat{H}_0 = \sum_{p'} \varepsilon_{p'} X^{p'p'}, \quad (7.15)$$

де $p' = 0', 1', \tilde{0}', \tilde{1}'$ це індекси, що відповідають новому базису,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0',1'} &= -\frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}, \\ \varepsilon_{\tilde{0}',\tilde{1}'} &= -\mu' - \frac{\mu}{2} + \frac{U'}{2} \pm \sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Для операторів фермі та бозе ми отримуємо у даному представленні (див.(5.16)):

$$\begin{aligned} a_i &= \cos(\tilde{\psi} - \psi) \left(X_i^{0'\tilde{0}'} + X_i^{1'\tilde{1}'} \right) + \sin(\tilde{\psi} - \psi) \left(X_i^{1'\tilde{0}'} - X_i^{0'\tilde{1}'} \right), \\ b_i &= \frac{1}{2} \sin(2\psi) (X_i^{0'0'} - X_i^{1'1'}) + \frac{1}{2} \sin(2\tilde{\psi}) (X_i^{\tilde{0}'\tilde{0}'} - X_i^{\tilde{1}'\tilde{1}'}) \\ &\quad + \cos^2 \psi X_i^{0'1'} - \sin^2 \psi X_i^{1'0'} + \cos^2 \tilde{\psi} X_i^{\tilde{0}'\tilde{1}'} - \sin^2 \tilde{\psi} X_i^{\tilde{1}'\tilde{0}'} . \end{aligned} \quad (7.17)$$

Переписавши рівняння типу (7.13) та (7.14) для цього нового 4-станового базису, отримаємо наступний вираз для функції Гріна, побудованої на фермі-операторах

$$\langle\langle a|a^+\rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{g_0^{-1}(\omega) - t'_q}, \quad (7.18)$$

де одновузлова функція Гріна:

$$\begin{aligned} g_0(\omega) = & \cos^2(\tilde{\psi} - \psi) \left[\frac{\langle X^{0'0'} + X^{\tilde{0}\tilde{0}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{0}'} + \varepsilon_{0'}} + \frac{\langle X^{1'1'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{1'}} \right] \\ & + \sin^2(\tilde{\psi} - \psi) \left[\frac{\langle X^{1'1'} + X^{\tilde{0}\tilde{0}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{0}'} + \varepsilon_{1'}} + \frac{\langle X^{0'0'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{0'}} \right]. \end{aligned} \quad (7.19)$$

7.4. Спектр ферміонів при $T = 0$

В подальшому ми обмежимося аналізом ферміонного енергетичного спектру в границі абсолютного нуля температури, враховуючи можливість присутності бозе-конденсату. Це означає, що ми повинні розглянути поведінку одновузлових енергетичних рівнів, що визначаються виразом (7.16). За умови $T = 0$ тільки стани з найнижчими значеннями енергії даватимуть внески у вираз (7.19) для функції $g_0(\omega)$.

У зв'язку з цим нам необхідно проаналізувати рівняння для параметра порядку, враховуючи існування різних основних станів. Так, якщо основним є стан $|\tilde{1}'\rangle$ (тоді $\langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle = 1$ а інші середні рівні нулю), для параметра порядку $\varphi \equiv \langle b \rangle$ з виразу (7.17) отримуємо рівняння:

$$\varphi = -\frac{1}{2} \sin(2\tilde{\psi}) = \frac{|t_0|\varphi}{\sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}}. \quad (7.20)$$

Розв'язок $\varphi = 0$ відповідає нормальній (NO) фазі; $\varphi \neq 0$ описує фазу з бозе-конденсатом. Для цієї фази, з рівняння (7.20) ми отримаємо:

$$\varphi = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{(U' - \mu)^2}{t_0^2}}. \quad (7.21)$$

Таким самим чином, у випадку коли основним станом є стан $|1'\rangle$, з рівняння для параметру порядку маємо

$$\varphi = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{t_0^2}}. \quad (7.22)$$

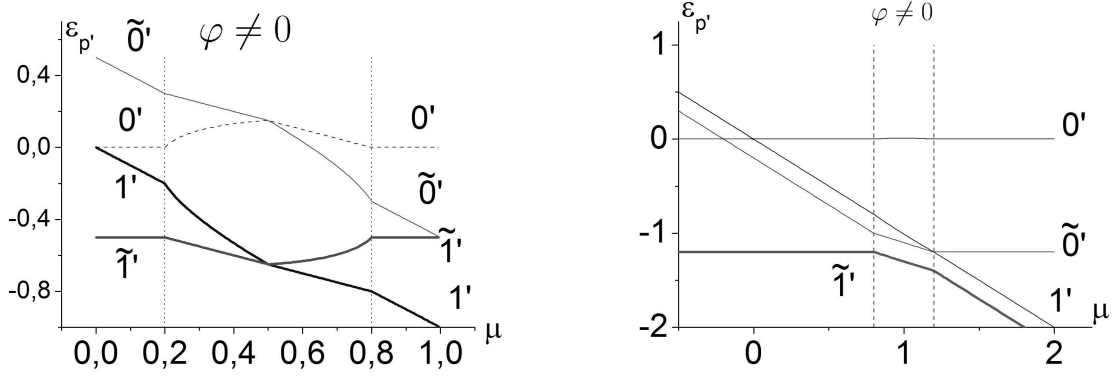


Рис. 7.2. Одновузлові рівні енергії $\varepsilon_{p'}$ для $\mu' = 0.5, t_0 = -0.8$ (лівий рисунок) та $\mu' = 1.2, t_0 = -0.2$ (правий рисунок)

Тут (див рис. 7.2), при зміні величини хімічного потенціалу бозонів μ , можливими є два випадки : із- або без зміни основного стану. На першому з наведених графіків вказано випадок, коли ми маємо спочатку основний стан $|\tilde{1}'\rangle$ при $\mu < \mu'$, але потім $|1'\rangle$ якщо $\mu > \mu'$. На другому рисунку наведено випадок, коли тільки один основний стан $|\tilde{1}'\rangle$ є можливим (тут маються на увазі стани $|\tilde{1}'\rangle$ та $|1'\rangle$, що належать трансформованому базису)

У випадку $T = 0$, наприклад, якщо основним є стан $|\tilde{1}'\rangle$, тільки $\langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle = 1$ а для решти станів ми маємо $\langle X^{p'p'} \rangle = 0$. Це означає, що в цьому випадку ми будемо мати з (7.19):

$$\begin{aligned} g_0(\omega) &= \cos^2(\tilde{\psi} - \psi) \frac{\langle X^{1'1'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{1'}} + \sin^2(\tilde{\psi} - \psi) \frac{\langle X^{0'0'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{0'}} \equiv \\ &\equiv \frac{\cos^2(\tilde{\psi} - \psi)}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{1'}} + \frac{\sin^2(\tilde{\psi} - \psi)}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{0'}} \end{aligned} \quad (7.23)$$

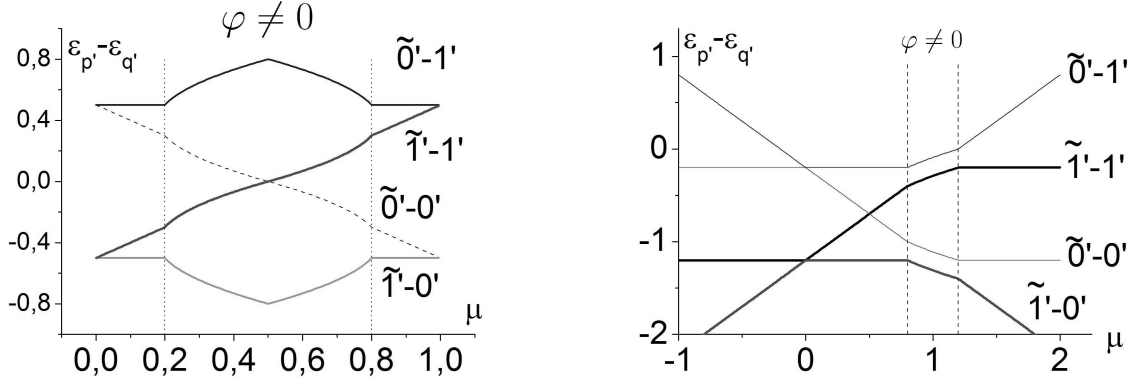


Рис. 7.3. Енергетичні переходи $\varepsilon_{p'} - \varepsilon_{q'}$ для $\mu' = 0.5, t_0 = -0.8$ (лівий) та $\mu' = 1.2, t_0 = -0.2$ (правий рисунок)

Тут враховано тільки енергетичні переходи, що включають основний стан $|\tilde{1}'\rangle$ (див. Рис. 7.3).

Тоді для ферміонної функції Гріна ми отримаємо:

$$\langle\langle a|a^+\rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{g_0^{-1}(\omega) - t_k} = \frac{1}{2\pi} \frac{(\hbar\omega - \Delta_{\tilde{1}'0'}) \cos^2(\tilde{\psi} - \psi) + (\hbar\omega - \Delta_{\tilde{1}'1'}) \sin^2(\tilde{\psi} - \psi)}{\det}, \quad (7.24)$$

де

$$\begin{aligned} \det &= (\hbar\omega - \Delta_{\tilde{1}'0'}) (\hbar\omega - \Delta_{\tilde{1}'1'}) + \\ &+ t_q (\hbar\omega - \Delta_{\tilde{1}'0'}) \cos^2(\tilde{\psi} - \psi) + t_q (\hbar\omega - \Delta_{\tilde{1}'1'}) \sin^2(\tilde{\psi} - \psi), \end{aligned} \quad (7.25)$$

та $\Delta_{m'n'} = \varepsilon_{m'} - \varepsilon_{n'}$.

Цей вираз можна розкласти на прості дробі:

$$\langle\langle a|a^+\rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{A_1}{\hbar\omega - X_1} + \frac{A_2}{\hbar\omega - X_2} \right], \quad (7.26)$$

де X_1, X_2 - розв'язки квадратного (стосовно $\hbar\omega$) рівняння, що визначають полюси функції (7.25) (енергії $\varepsilon_{1,2}(q) = X_{1,2}$ дають закон дисперсії для ферміонного спектру). A_1, A_2 - константи у розкладі на прості дробі.

Остаточно, для густини ферміонних станів в цьому випадку отримаємо:

$$\begin{aligned}\rho(\hbar\omega) &= \frac{1}{\hbar N} \sum_q -2\text{Im}(G_q(\omega + i\epsilon))_{\epsilon \rightarrow 0} = \\ &= \int_{-W}^W dx \rho_0(x) \left(A_1(x) \delta(x - X_1) + A_2(x) \delta(x - X_2) \right),\end{aligned}\quad (7.27)$$

де, незбурена густина станів - $\rho_0(x) = \frac{1}{N} \sum_q \delta(x - t_q)$.

Користуючись схожими міркуваннями можна отримати вирази типу (7.24), (7.26) та (7.27) і для випадку коли основним є стан $|1'\rangle$.

7.5. Густина ферміонних енергетичних станів у нормальній фазі (NO) та у фазі з бозе-конденсатом (SF)

Для подальших числових розрахунків використовувались наступні значення параметрів моделі. Константа бозон-ферміонної взаємодії на вузлі U' вважалась одиничною ($U' = 1$). Інші параметри нормувались стосовно цієї сталої, тобто - для константи переносу бозонів бралось $t_0 = -0.2$ та $t_0 = -0.8$; напівширина зони незбурених станів (описуваної напівелліптичною функцією густини $\rho_0(\omega) = \frac{1}{2W} \sqrt{W^2 - \omega^2}$) $W \equiv t'_0 = 0.2$ (випадок близьких підзон). Також, слід відзначити, що зміна параметрів моделі не впливає суттєво на структуру ферміонного спектру. В реальних системах, як вже згадувалось, ці параметри залежать тільки від умов експерименту та їх можна досить вільно змінювати [97]

Згідно діаграми основного стану (див. рис. 7.1) було розглянуто три випадки для величини хімічного потенціалу ферміонів, що відповідали різним переходам (в позначенні незбурених одновузлових станів) зі зміною μ :

$$\mu' = -0.1 \text{ (перехід } |0\rangle \rightarrow |1\rangle);$$

$$\mu' = 0.5 \text{ (перехід зі зміною основного стану з } |\tilde{0}\rangle \text{ на } |1\rangle);$$

$$\mu' = 1.2 \text{ (перехід } |\tilde{0}\rangle \rightarrow |\tilde{1}\rangle).$$

Результати розрахунків (згідно (7.27)) густин станів $\rho(\hbar\omega)$ для різних значень хімічного потенціалу бозонів μ , та при певних значеннях μ' наведено на

рисунках 7.4, 7.6 та 7.8.

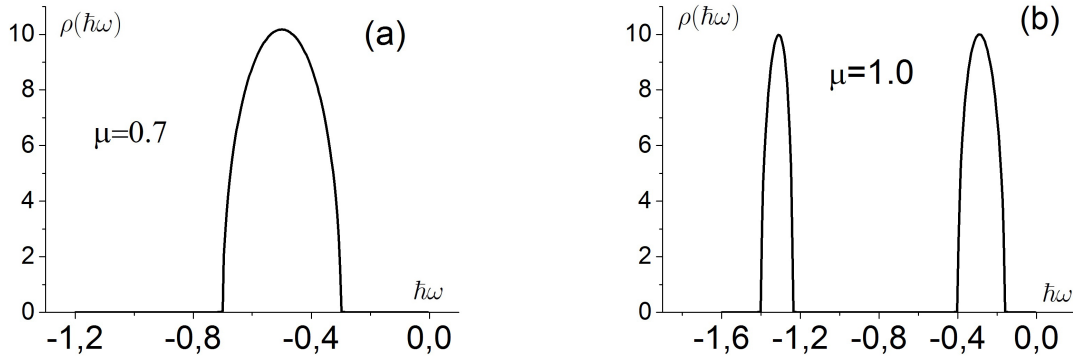


Рис. 7.4. Густина ферміонних станів для різних значень μ при $\mu' = 1.2, t_0 = -0.2$

Енергетичні зони ферміонів (області де $\rho(\hbar\omega) \neq 0$) та значення параметру порядку φ в залежності від μ наведено на Рис. 7.5, 7.7 та 7.9.

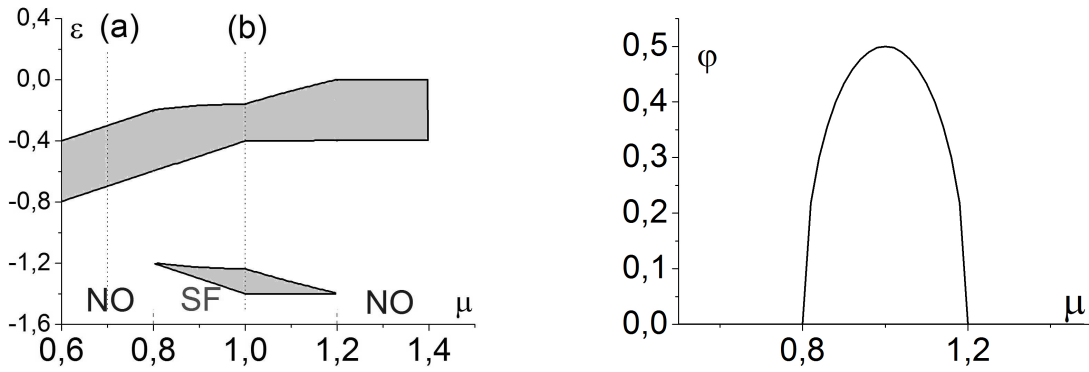


Рис. 7.5. Енергетичні рівні ферміонів (лівий рисунок) та параметр порядку (правий рисунок) при $\mu' = 1.2, t_0 = -0.2$

З отриманих результатів видно, що незважаючи на зсув ферміонних рівнів енергії, що залежить від хімічного потенціалу бозонів (а отже і від концентрації бозонів), у фазі з бозе-конденсатом (де $\varphi \neq 0$) має місце поява нових, додаткових до традиційних хаббардівських, підзон. Пояснити це можна змішуванням станів з різним числом бозонів та появою нових ферміонних переходів, що супроводжуються народженням або знищенням бозона. Такі збудження подібні до “композитних” ферміонів, які були описані в [6, 112].

Розщеплення ферміонного спектру, яке є наслідком присутності бозе-конденсату, подібне до писаного нами у розділі 2 ускладнення електронної енерге-

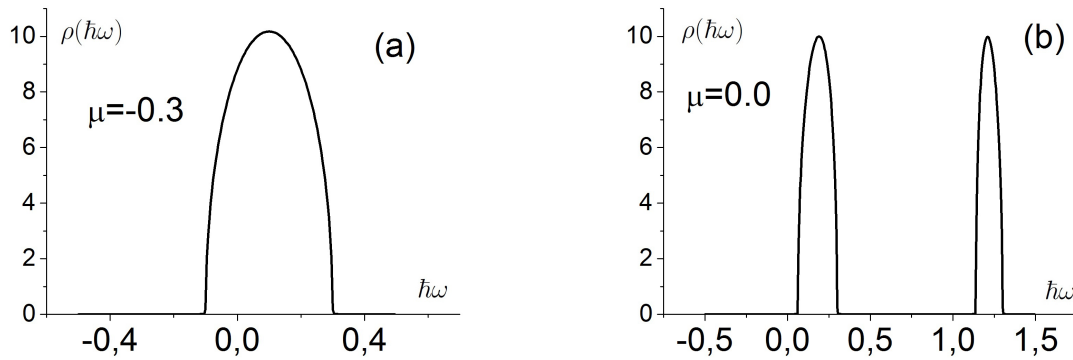


Рис. 7.6. Густина ферміонних станів для різних значень μ при $\mu' = -0.1, t_0 = -0.2$

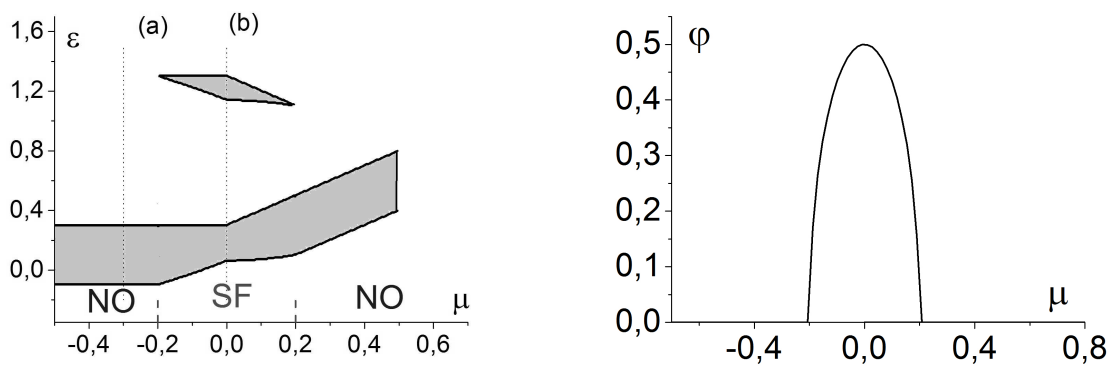


Рис. 7.7. Енергетичні рівні ферміонів (лівий рисунок) та параметр порядку (правий рисунок) при $\mu' = -0.1, t_0 = -0.2$

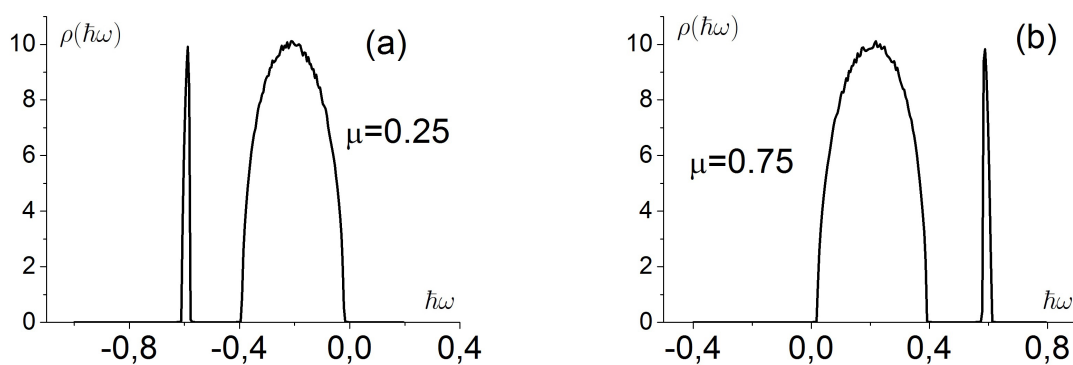


Рис. 7.8. Густина ферміонних станів для різних значень μ при $\mu' = 0.5, t_0 = -0.8$

тичної структури (з появою додаткових підзон) псевдоспін-електронної моделі під впливом поперечного поля Ω , що діє на псевдоспіни. Таке поле у випадку ПЕМ притаманне самій моделі і має конкретну фізичну природу, пов'язану, наприклад,

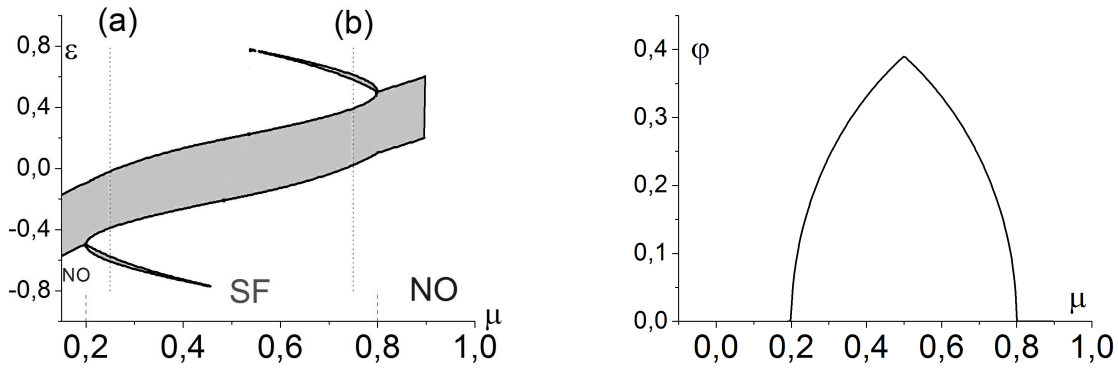


Рис. 7.9. Енергетичні рівні ферміонів (лівий рисунок) та параметр порядку (правий рисунок) при $\mu' = 0.5, t_0 = -0.8$

з тунельним перестрибуванням частинок у кристалічній ґратці з локальним ангармонізмом фононних коливань [4].

У бозон-ферміонній суміші, яка описується гамільтоніаном (7.1), аналогом поперечного поля Ω є параметр порядку бозе-конденсату φ . Однак, поле φ існує тільки у SF-фазі, виникає самоузгоджено, і змінюється за величиною при зміні хімічних потенціалів бозонів та ферміонів. У цьому полягає аналогія, але одночасно і відмінність, між моделями ПЕМ і БФХ, а разом з тим і між фізичними об'єктами, що ними описуються.

7.6. Висновки

У проведеному дослідженні одночастинкового ферміонного спектру моделі Бозе-Фермі-Хаббарда ми обмежилися, як і раніше, випадком жорстких бозонів і відштовхувальної бозон-ферміонної взаємодії ($U' > 0$), однак на відміну від задач, розглянутих у розділах 4-6, тут враховано перенесення ферміонів (тепер $t_F \neq 0$). Задача є подібною до розв'язаної у розділі 2, де була проаналізована електронна складова спектру ПЕМ і де була звернена окрема увага на вплив поперечного поля, що діє на псевдоспіни. Таке поле формально подібне до внутрішнього поля, що з'являється при появі бозе-конденсату у моделі БФХ. Тому, як і слід було очікувати, у спектрі ферміонів виникають аналогічні зміни; це проявляється перш за все у його розщепленні і появі нових підзон.

При розрахунку ферміонного спектру нами використано, в рамках методики двочасових температурних функцій Гріна, наближення Хаббард-I, яке дозволяє описати вплив одновузлових бозон-ферміонних кореляцій. З'ясовано умови, при яких у спектрі має місце розщеплення; отримані результати сформульовано на мові густин ферміонних станів. При їх інтерпретації слід мати на увазі, що в чистій бозонній системі, яка описується моделлю Бозе-Хаббарда, надплинна фаза (SF) існує при $T = 0$ в інтервалах значень μ , що мають ширину пропорційну до t_0 , та центровані в точках $\mu = nU$. У випадку наближення жорстких бозонів ($U \rightarrow \infty$) залишається тільки одна така область з центром в точці $\mu = 0$. Ця точка розділяє дану область на дві частини, що відповідають нормальній (MI) фазі з $\langle n_B \rangle = 0$ та $\langle n_B \rangle = 1$, відповідно. У присутності ферміонів область існування надплинної (SF) фази лишається незмінною для випадку $\mu' < 0$. Проте, якщо $\mu' > U'$ така область має центр в точці $\mu = U'$. Тут бозе-конденсат існує в ґратці з $\langle n_F \rangle = 1$, в той час коли у попередньому випадку $\langle n_F \rangle = 0$. Більш складний випадок реалізується в проміжній області значень μ' . Границі SF фази тут зміщуються зі зміною співвідношення між параметрами t_0 та U' (див. розділ 2).

Незбурений ферміонний спектр складається з одної суцільної зони, її ширина пропорційна до параметру переносу t' . Взаємодія між бозе- та фермі-частинками, що описується моделлю БФХ, призводить до змін в ферміонному спектрі. На форму спектру при $T = 0$ мають вплив два фактори : (i) зміна основного стану, що є можливою при $0 < \mu' < U'$ та має місце при певних значеннях хімічного потенціалу μ бозонів; (ii) присутність бозе-конденсату (в SF фазі)

В нормальній фазі, зміна основного стану призводить до зміщення ферміонних зон. Причина цього зміщення наступна. Переходи, що формують зону, відбуваються між станами $|n, 0\rangle$ та $|n, 1\rangle$ з однаковим числом заповнення бозонів; а воно може бути різним. Зсув зон (при $n = 1$ відповідно до $n = 0$) має порядок константи взаємодії U' (поява ферміона на вузлі, де вже є бозон, пов'язана зі зростанням енергії на U').

У випадку надплинної фази з бозе-конденсатом, окрім згаданого вище зсуву ферміонних зон, що залежить від хімічного потенціалу бозонів (концентрації

бозонів), відбувається також розщеплення в спектрі та поява нових ферміонних підзон в НП фазі. Явище має місце в області значень хімічного потенціалу бозонів μ , для яких параметр порядку φ бозе-конденсату є ненульовим. Його фізичний зміст полягає у змішуванні станів з різним числом бозонів та у можливості нових ферміонних переходів, що супроводжуються виникненням чи знищенням бозона. Такі корельовані збудження мають назву “композитних ферміонів” [6, 112], і тут в електронному спектрі ми бачимо їх присутність. Нові підзони з’являються над (або під) основною ферміонною зоною залежно від значення хімічного потенціалу ферміонів: при $\mu' > U'$ у першому випадку, та при $\mu' < 0$ у другому. Для проміжних значень μ' (при $0 < \mu' < U'$) на розташування додаткової підзони впливає і хімічний потенціал бозонів; перший випадок реалізується для $\mu > U'/2$ (що відповідає $\bar{n}_B > 1/2$), а другий – для $\mu < U'/2$ (і, відповідно, $\bar{n}_B < 1/2$).

Наведені результати обмежені границею $T = 0$. При скінченних температурах будуть виникати ще додаткові підзони (зокрема з’являться чотири нових підзони у випадку чотиристанової моделі). Подібний ефект розщеплення в спектрі описаний нами для псевдоспін-електронної моделі у розділі 2, де розрахунки проводились в підході динамічного середнього поля. Існує, однак, відмінність, пов’язана з тим, що у протилежність до ПЕМ внутрішнє поперечне псевдоспінове поле у моделі БХФ (яке утворюється за наявності бозе-конденсату) є самоузгодженим; його величина залежить від параметрів моделі і визначається значеннями хімічних потенціалів μ і μ' .

ВИСНОВКИ

1. Виходячи з псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ) показано, що у кристалах з сильними електронними кореляціями хаббардівського типу та з локальним ангармонізмом коливань ґратки умови переходу метал-діелектрик (з відкриттям щілини у енергетичному спектрі) визначаються не тільки величиною одновузлової взаємодії електронів, але й параметрами, що характеризують локальні потенціальні ями (їх асиметрію та частоту коливань тунельного типу).
2. Виявлено складний характер перебудови електронного спектру псевдоспін-електронної моделі з безмежним хаббардівським відштовхуванням електронів, зумовленої зміною поперечного поля Ω , поля асиметрії h та константи псевдоспін-електронного зв'язку g ; ефект полягає у появі чи зникненні додаткових підзон у спектрі і пов'язаний з процесами, при яких міжвузлове перенесення електронів супроводжується переорієнтацією псевдоспінів.
3. В рамках ПЕМ показано, що при іонній інтеркаляції у кристалах з різним заповненням електронних зон є можливою реалізація (під впливом електронної підсистеми та внаслідок перескокової динаміки домішкових частинок) однорідного або просторово модульованого розподілу інтеркалянта, виникнення фазового розшарування, а також поява фаз з високою рухливістю іонів. Це залежить від типу інтеркалянта (акцептор чи донор), рівня хімічних потенціалів інтеркалянта та електронів, частоти міжвузлового перестрибування, а також температури; переходи між фазами є другого або першого роду.
4. Показано, що у ґратковій бозон-ферміонній суміші (що описується моделлю

БФХ) існування двох типів бозе-конденсату, пов'язаних з характером заповнення ферміонних станів, проявляється при проміжних концентраціях $\tilde{n}_F$ у появі додаткових областей SF-фази на (T, μ) фазових діаграмах; їх форма змінюється з $\tilde{n}_F$, а також зазнає перебудови при активаційному механізмі перестрибування бозонів.

5. Встановлено, що у моделі БФХ у випадку жорстких бозонів і “важких” ферміонів, взаємодія між якими має характер відштовхування, фазові переходи до *SF* фази у термодинамічному режимі заданих хімічних потенціалів частинок стають переходами першого роду у тих областях значень μ і μ' , де бозе-конденсація зазнає впливу з боку як зайнятих так і вільних ферміонних станів; як наслідок, це приводить до фазового розшарування при фіксованих концентраціях частинок. Область існування SF-фази на фазових діаграмах (μ', μ) може бути одно- або двозв'язною, залежно від величини взаємодії між бозонами і ферміонами, та температури.
6. Для моделі БФХ з жорсткими бозонами та “важкими” ферміонами встановлено, що при ненульових температурах можуть існувати т. зв. “реентрант” переходи (коли фаза з бозе-конденсатом є проміжною); на фазових (T, μ) діаграмах лінії переходів 1-го роду, залежно від значень хімічного потенціалу ферміонів μ' , переходять у трикритичних точках у лінії переходів 2-го роду, або закінчуються у звичайних критичних точках (перебуваючи всередині областей SF-фази).
7. Шляхом розрахунку одночастинкових густин ферміонних станів для моделі БФХ для випадку сильної одновузлової взаємодії U та у підході жорстких бозонів встановлено, що у стані з бозе-конденсатом (SF-фаза) у ферміонному спектрі відбувається розщеплення і з'являються додаткові підзони, що є наслідком появи нових ферміонних переходів при змішуванні станів з різним числом бозонів (проявом т. зв. композитних збуджень).

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms / M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger et al. // Nature. — 2002. — Vol. 415. — P. 39.
2. Albus A., Illuminati F., Eisert J. Mixtures of Bosonic and Fermionic atoms in optical lattices // Phys. Rev. A. — 2003. — Vol. 68. — P. 023606.
3. Müller K. A. On the oxygen isotope effect and apex anharmonicity in high- T_c cuprates // Z. Phys. B: Cond. Matter. — 1990. — Vol. 80. — P. 193.
4. Stasyuk I. V. Pseudospin-electron model for strongly correlated electron systems (thermodynamics and dynamics) // In: Highlights in condensed matter physics, AIP Conference Proceedings. — 2003. — Vol. 695. — P. 281–290.
5. Mahan G. D. Lattice gas theory of ionic conductivity // Phys. Rev. B. — 1976. — Vol. 14. — P. 780.
6. Lutchyn R. M., Tewari S., Das Sarma S. Boson Hubbard model with weakly coupled fermions // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 220504.
7. Боголюбов М. М. Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем. — К. : Радянська школа., 1949. — 228 с.
8. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands - IV. The atomic representation // P. R. Soc. Lond. A Mat. — 1965. — Vol. 285. — P. 542.
9. Hardy J. R., Flocken J. W. Possible origins of High- T_c superconductivity // Phys. Rev. Lett. — 1988. — Vol. 60. — P. 2191.
10. Bussmann-Holder A., Simon A., Büttner H. Erratum: Possibility of a common origin to ferroelectricity and superconductivity in oxides // Phys. Rev. B. — 1989. — Vol. 39. — P. 207.
11. Plakida N. M. Lattice instability and strong electron-phonon coupling for high-

- T_c superconductivity // *Physica Scripta*. — 1989. — Vol. 29. — P. 77.
12. Plakida N. M., Udovenko V. S. Electron-phonon pairing in the Hubbard model // *Mod. Phys. Lett. B*. — 1992. — Vol. 6. — P. 541.
 13. Local anharmonic vibrations, strong correlations and superconductivity: A quantum simulation study / M. Frick, W. von der Linden, I. Morgenstern, H. Raedt // *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter*. — 1990. — Vol. 81, no. 2. — P. 327–335.
 14. Stasyuk I. V., Shvaika A. M., Schachinger E. On the electron spectrum of the Hubbard model including interactions with local anharmonic vibrations // *Phys. C*. — 1993. — Vol. 213, no. 1. — P. 57.
 15. Stasyuk I. V., Shvaika A. M. Dielectric instabilities and phase transitions in pseudospin-electron model of HTSC systems // *Fiz. Nizk. Temp.* — 1996. — Vol. 22. — P. 535.
 16. Stasyuk I. V., Shvaika A. M. Dielectric instability and vibronic-type spectrum of local anharmonic model of high- T_c superconductors // *Ferroelectrics*. — 1997. — Vol. 192. — P. 1.
 17. Stasyuk I. V., Shvaika A. M. A model with local anharmonicity in theory of HTSC systems: correlation functions and “transverse” dielectric susceptibility // *Cond. Matt. Phys.* — 1994. — Vol. 3. — P. 134.
 18. Stasyuk I. V., Shvaika A. M. Pseudospin-electron model in large dimensions // *Journal of Physical Studies*. — 1999. — Vol. 2. — P. 177.
 19. Stasyuk I. V., Shvaika A. M., Tabunshchyk K. V. Thermodynamics of a pseudospin-electron model without correlations // *Cond. Matt. Phys.* — 1999. — Vol. 2, no. 1(17). — P. 109–132.
 20. Stasyuk I. V., Shvaika A. M., Tabunshchyk K. V. Thermodynamics of pseudospin-electron model in the $U = 0$ limit // *Acta Physica Polonica A*. — 2000. — Vol. 97, no. 3. — P. 411–414.
 21. Stasyuk I. V., Shvaika A. M., Tabunshchyk K. V. Self-consistent approach for the thermodynamics of a simplified pseudospin-electron model // *Ukr. Journ. of Phys.* — 2000. — Vol. 45, no. 4-5. — P. 520–528.

22. Stasyuk I. V., Mysakovich T. S. Phase transitions in pseudospin-electron model at weak coupling // J. Phys. Studies. — 2001. — Vol. 5. — P. 268.
23. Stasyuk I. V., Mysakovich T. S. Pseudospin-electron model at weak coupling // Cond. Matt. Phys. — 2002. — Vol. 5. — P. 473.
24. Mysakovich T. S., Stasyuk I. V. Superconductivity in the pseudospin-electron model // Ukr. J. Phys. — 2004. — Vol. 49, no. 6. — P. 607.
25. Danyliv O. D., Stasyuk I. V. The analysis of ferroelectric type instabilities in the two-sublattice model of high temperature superconducting systems // Cond. Matt. Phys. — 1996. — Vol. 7. — P. 163–177.
26. Stasyuk I. V., Shvaika A. M., Danyliv O. D. Dielectric instability and charge ordering in the local anharmonic model of high T_c superconductors // Molecular Physics Reports. — 1995. — Vol. 9. — P. 61–75.
27. Danyliv O. D. Phase transitions in the two-sublattice pseudospin-electron model of high temperature superconducting systems // Physica C. — 1998. — Vol. 309. — P. 303–314.
28. Stasyuk I. V., Danyliv O. D. Thermodynamics of pseudospin-electron model in mean field approximation // Phys. Stat. Sol. B. — 2000. — Vol. 219. — P. 299–312.
29. Danyliv O. D., Stasyuk I. V. The phase separation effects is a pseudospin-electron model // Cond. Matt. Phys. — 2002. — Vol. 5. — P. 523.
30. Izyumov Y. A., Letfulov B. M. A diagram technique for Hubbard operators: the magnetic phase diagram in the $(t - J)$ model // J. Phys: Cond. Matter. Phys. — 1990. — Vol. 2. — P. 347.
31. Izyumov Y. A., Letfulov B. M., Shipitsyn E. V. A mean-field-type approximation for the $(t - J)$ model // J. Phys: Cond. Matter. Phys. — 1994. — Vol. 6, no. 27. — P. 319–323.
32. Stasyuk I. V., Mysakovich T. S. Raman scattering in pseudospin-electron model // J. Phys. Studies. — 1999. — Vol. 3. — P. 344.
33. Stasyuk I. V., Mysakovich T. S. Raman scattering in a locally anharmonic model with strong electron correlations // Physica C. — 2000. — Vol. 171. —

P. 341–348.

34. Freericks J. K., Zlatić V. Exact dynamical mean-field theory of the Falicov-Kimball model // *Rev Mod. Phys.* — 2003. — Vol. 75. — P. 1333.
35. Metzner W., Vollhardt D. Correlated lattice fermions in $d \rightarrow \infty$ dimensions // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 62. — P. 260.
36. Metzner W. Linked-cluster expansion around the atomic limit of the Hubbard-model // *Phys. Rev. B.* — 1991. — Vol. 43. — P. 8549.
37. Müller-Hartmann E. The Hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory // *Z. Phys. B.* — 1989. — Vol. 74. — P. 507.
38. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions / A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg // *Rev. Mod. Phys.* — 1996. — Vol. 68. — P. 13.
39. The moment sum rule and its consequences for ferromagnetism in the Hubbard model / M. Potthoff, T. Herrmann, T. Wegner, W. Nolting // *Phys. Stat. Sol. (b)*. — 1998. — Vol. 210. — P. 199.
40. Stasyuk I. V. Approximate analytical dynamical mean-field approach to strongly correlated electron systems // *Cond. Matt. Phys.* — 2000. — Vol. 3, no. 22. — P. 437.
41. Stasyuk I. V., Stetsiv R. Y., Sizonenko Y. V. Dynamics of charge transfer along hydrogen bond // *Cond. Matt. Phys.* — 2002. — Vol. 5. — P. 685.
42. Stasyuk I. V., Dublenych Y. I. Phase transitions and phase separations in an $S = 1$ pseudospin-electron model: Application of the model to the intercalated crystals // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 224209.
43. Multiple Li positions inside oxygen octahedra in lithiated TiO_2 anatase. / W. Wagemaker, G. J. Kearley, A. A. van Well et al. // *J. Am. Chem. Soc.* — 2003. — Vol. 125. — P. 840.
44. Interface-mediated pairing in field effect devices / V. Koerting, Yuan Qingshan, P. J. Hirschfeld et al. // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — P. 104510.
45. Grygorchak I. I. Intercalation: achievements, problems, outlook (Review) // *Phys. Chem. Sol. State.* — 2001. — Vol. 2. — P. 7.

46. Shollhorn R. Geometrical and electronic constraiuble in redox intercalation systems // Proc. NATO Advantige Research Work. — Dordrecht(Holland), 1986. — P. 323–340.
47. Friend R. H., Yoffe A. D. Electonic properties of intercalation complexes of transitions metal dichalcogenides // Adv. Phys. — 1987. — Vol. 1. — P. 1–94.
48. Padula A., Patriarca M., Scrosati B. Intercalation electrodes in copper solid state cells // Solid State Ionics. — 1983. — Vol. 8, no. 4. — P. 305–310.
49. Физико-химические свойства графита и его соединений / И. П. Черныш, И. И Карпов, Г. П. Приходько, В. М. Шай. — К. : Наукова думка, 1990. — 200 с.
50. McKinnon W. R., Dahn J. R. Structure and electrochemistry of $Li_xMo_6S_8$ // Phys. Rev. B: Condensed Matter. — 1985. — Vol. 51, no. 5. — P. 3084–3087.
51. Polarized X-ray adsorption studies of graphite intercalated-bromine compounds / J. L. Feldman, W. T. Elam, A. C. Enrlich et al. // Phys. Rev. B: Condens. Mater. — 1986. — Vol. 33, no. 12. — P. 7961–7982.
52. Chen Z. M., Karim O. A., Pittitt O. M. The free energy of intercalation. Structure of graphite intercalated compounds // Proc. Int. Meet. on Phys. Chem. and Biophys. — Amsterdam (Holland), 1990. — P. 103–106.
53. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G. Charge transfer mechanism in acceptor GIGs // Synth. Metals. — 1985. — Vol. 12, no. 1-2. — P. 72–84.
54. Whittingam M. S. Intercalation chemistry and energy storage // J. Solid State Chem. — 1979. — Vol. 29, no. 3. — P. 303–310.
55. Bernard L., Glaunsinger N., Colombet P. Magnetic investigation of the intercalation compounds Li_xTiS_2 // Solid State Ionics. — 1985. — Vol. 71, no. 1. — P. 81–89.
56. Silbernagel B. G., Whittingham M. S. An NMR study of the alkali metal intercalation phase Li_xTiS_2 : relation to structure, thermodynamics and ionicity // J. Chem. Phys. — 1976. — Vol. 64, no. 9. — P. 3670–3683.
57. McKinnon W. R., Haering R. R. Physical mechanisms of intercalation // Modern Aspects of Electrochemistry. — 1983. — Vol. 15. — P. 325–261.

58. Явление расщепления энергетических зон в интеркалированных диэлектриках / К. А. Катрунов, В. М. Кошкин, А. П. Мильнер, С. И. Шевченко // Физика низких температур. — 1978. — Т. 4, № 4. — С. 531–535.
59. Beal A. R., Liang W. Y. Intercalation studies of some transition metal dichalcogenides // J. Phys. C: Solid St. Phys. — 1973. — Vol. 6. — P. 482.
60. Yacobi B. G., Boswell F. W., Corbett J. M. Intercalation induced shift of the adsorption edge in ZrS_2 and HfS_2 // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1979. — Vol. 12. — P. 2189–2196.
61. Iwasaki T., Kuroda N., Nishina Y. Effects of iron intercalation on the electronic structures of ZrS_2 and HfS_2 // Synth. Met. — 1983. — Vol. 6, no. 2-3. — P. 157–163.
62. Возникновение электретного состояния в слоистых интеркалированных монокристаллах *gase* / И. В. Минтянский, И. И. Григорчак, З. Д. Ковалюк, С. В. Гаврилюк // Физ. тверд. тела. — 1986. — Т. 28, № 4. — С. 1263–1265.
63. Григорчак И. И., Ковалюк З. Д., Минтянский И. В. Фотополяризационные процессы в интеркалатах Li_xgase и Li_xinse // Физ. тверд. тела. — 1989. — Т. 31, № 2. — С. 222–224.
64. Булаевский Л. Н. Сверхпроводимость и электронные свойства слоистых соединений // Успехи физических наук. — 1975. — Т. 116, № 3. — С. 449–483.
65. The thermodynamic and thermoelectric properties of Li_xTiS_2 and Li_xCoO_2 / A. Honders, J. M. Kinderen, A. H. Heeren et al. // Solid State Ionics. — 1984. — Vol. 4, no. 3. — P. 205–216.
66. Theoretical study of lithium intercalation in rutile and anatase / A. Stashans, S. Lunell, R. Bergström et al. // Phys. Rev. B. — 1996. — Vol. 53. — P. 159.
67. Koudriachova M. V., Harrison N. M., de Leeuw W. Effect of diffusion on lithium intercalation in titanium dioxide // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 86. — P. 1275.
68. Koudriachova M. V., Harrison N. M., de Leeuw W. Density-functional simulations of lithium intercalation in rutile // Phys. Rev. B. — 2002. — Vol. 65. — P. 235423.

69. Two phase morphology limits lithium diffusion in TiO_2 (anatase): A 7Li MAS NMR study / W. Wagemaker, R. van de Krol, Kentgens A. P. M. et al. // J. Am. Chem. Soc. — 2001. — Vol. 123. — P. 11454.
70. Jung K. N., Pyun S. I., Kim S. W. Thermodynamic and kinetic approaches to lithium intercalation into $Li[Ti_{5/3}Li_{1/3}]O_4$ film electrode // J. Power Sources. — 2003. — Vol. 119-121. — P. 637.
71. Nondilute diffusion from first principles: Li diffusion in Li_xTiS_2 / A. Van der Ven, J. C. Thomas, Q. Xu et al. // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 104306.
72. Dahl J. R., McKinnon W. R. Lithium intercalation in $2H - Li_xTaS_2$ // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1984. — Vol. 17. — P. 4231.
73. Order - disorder transitions in the intercalation compounds with repulsive interactions: application to Li_xTiS_2 battery / H. Ennamiri, R. Nassif, Y. Boughaleb, J. F. Gouyet // J. Phys: Condens. Matter. — 1997. — Vol. 9. — P. 2433.
74. Role of host distortion in the intercalation process / E. V. Vakarin, J. P. Badiali, M. D. Levi, D. Auerbach // Phys. Rev. B. — 2000. — Vol. 63. — P. 014304.
75. Фазові переходи в моделі дипольного ґраткового газу / І. В. Стасюк, К. Д. Товстюк, О. Б. Гера, О. В. Величко. — Л., 2002. — 27 с. — Препр./ ІФКС НАНУ.
76. Mysakovich T. S., Stasyuk I. V. Pseudospin-electron model of intercalation // J. Phys. Studies. — 2007. — Vol. 11, no. 2. — P. 195–199.
77. Velychko O. V., Stasyuk I. V. Phase separation in lithium intercalated anatase: A theory // Condens. Matter Phys. — 2009. — Vol. 12, no. 2. — P. 249.
78. Greiner M., Regal C. A., Jin D. S. M. Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas // Nature. — 2003. — Vol. 426, no. 537.
79. Boson localization and the superfluid-insulator transition / M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, D. S. Fisher // Phys. Rev. B. — 1989. — Vol. 40. — P. 546.
80. Cold bosonic atoms in optical lattices / D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac

- et al. // Phys. Rev. Lett. — 1998. — Vol. 81. — P. 3108.
81. Superfluid and insulating phases in an interacting-boson model: mean-field theory and the RPA / K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, T. V. Ramakrishnan // Europhys. Lett. — 1993. — Vol. 22. — P. 257.
 82. Konabe S., Nikuni T., Nakamura N. Laser probing of single-particle energy gap of a Bose gas in an optical lattice in the Mott insulator phase // Phys. Rev. A. — 2006. — Vol. 73. — P. 033621.
 83. Ohashi Y., Kitaura M., Matsumoto H. Itinerant-localized dual character of a strongly correlated superfluid Bose gas in an optical lattice // Phys. Rev. A. — 2006. — Vol. 73. — P. 033617.
 84. Freericks J. K., Monien H. Phase diagram of the Bose-Hubbard model // Europhys. Lett. — 1994. — Vol. 26. — P. 545.
 85. Monte Carlo study of the two-dimensional Bose-Hubbard model / B. Capogrosso-Sansone, S. G. Söyler, N. Prokof'ev, B. V. Svistunov // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 77. — P. 015602.
 86. Byczuk K., Vollhardt D. Correlated bosons on a lattice: Dynamical mean-field theory for Bose-Einstein condensed and normal phases // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 77. — P. 235106.
 87. Tomoyose T. Excitons in carbon nanotubes // J. Phys. Soc. Jpn. — 1997. — Vol. 66. — P. 2383.
 88. Stasyuk I. V., Dulepa I. R. Density of states of one-dimensional Pauli ionic conductor // Cond. Matt. Phys. — 2007. — Vol. 10. — P. 259.
 89. Reyilly P. D., Harris R. A., Whaley K. B. Multiple-band theory of dynamics for interacting adsorbates coupled to phonons. I. Variationally optimized hamiltonian // J. Chem. Phys. — 1991. — Vol. 95. — P. 8599–8615.
 90. Stasyuk I., Mysakovich T. Phase diagrams of the Bose-Hubbard model at finite temperature // Condens Matter Phys. — 2009. — Vol. 12. — P. 539–546.
 91. Stasyuk I. V., Dulepa I. R. One-particle spectrum and phase transition in ionic Pauli conductor // J. Phys. Stud. — 2009. — Vol. 13, no. 2. — P. 2701.
 92. Elstner N., Monien H. Dynamics and thermodynamics of the Bose-Hubbard

- model // Phys. Rev. B. — 1999. — Vol. 59. — P. 012184.
93. Batrouni G. G., Scalettar R. T., Zimanyi G. T. Quantum critical phenomena in one-dimensional Bose systems // Phys. Rev. Lett. — 1990. — Vol. 65. — P. 1765.
 94. Ultracold atoms in optical lattices / D. B. M. Dirkerscheid, D. van Oosten, P. J. H. Denteneer, H. T. C. Stoof // Phys. Rev. A. — 2006. — Vol. 68. — P. 043623.
 95. Sengupta K., Dupuis N. Mott-insulator-to-superfluid transition in the Bose-Hubbard model: A strong-coupling approach // Phys. Rev. A. — 2005. — Vol. 71. — P. 033629.
 96. Bloch I. Ultracold quantum gases in optical lattices // Nature Phys. — 2005. — Vol. 1. — P. 23.
 97. Bloch I., Dalibard J., Zwerger W. Many-body physics with ultracold gases // Rev. Mod. Phys. — 2008. — Vol. 80. — P. 885.
 98. Lewenstein M., Sanpera A., Ahufinger V. Ultracold atoms in optical lattices: Simulating quantum many-body systems. — Oxford University Press, 2002.
 99. Quantum phase transitions of interacting bosons and the supersolid phase / A. van Otterlo, K. H. Wagenblast, R. Baltin et al. // Phys. Rev. B. — 1995. — Vol. 52. — P. 16176.
 100. Yamamoto K., Todo S., Miyashita S. Successive phase transitions at finite temperatures toward the supersolid state in a three-dimensional extended Bose-Hubbard model // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 79. — P. 094503.
 101. Isacsson A., Girvin S. M. Multiflavor bosonic Hubbard models in the first excited Bloch band of an optical lattice // Phys. Rev. A. — 2005. — Vol. 72. — P. 053604.
 102. Kimura T., Tsuchiya S., Kurihara S. Possibility of a first-order superfluid-Mott-insulator transition of spinor bosons in an optical lattice // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 94. — P. 110403.
 103. Pai R. V., Sheshadri K., Pandit R. Phases and transitions in the spin-1 Bose-Hubbard model: Systematics of a mean-field theory // Phys. Rev. B. —

2008. — Vol. 77. — P. 014503.
104. Role of interactions in $Rb^{87} - K^{40}$ Bose-Fermi mixtures in a 3D optical lattice / T. Best, S. Will, U. Schneider et al. // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Vol. 102. — P. 030408.
 105. Bose-Fermi mixtures in a three-dimensional optical lattice / K. Gunter, T. Stoferle, H. Moritz et al. // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Vol. 96. — P. 180402.
 106. Ultracold heteronuclear molecules in a 3D optical lattice / C. Ospelkaus, S. Ospelkaus, L. Humbert et al. // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 97. — P. 120402.
 107. Self-trapping of bosons and fermions in optical lattices / D. S. Lühmann, K. Bongs, K. Sengstock, D. Pfannkuche // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 101. — P. 050402.
 108. Tewari S., Lutchyn R. M., Das Sarma S. Effects of a dilute gas of fermions on the superfluid-insulator phase diagram of the Bose-Hubbard model // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 054511.
 109. Mering A., Fleischhauer M. One-dimensional Bose-Fermi-Hubbard model in the heavy-fermion limit // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 77. — P. 023601.
 110. Jürgensen O., Sengstock K., Lühmann D. S. Density-induced processes in quantum gas mixtures in optical lattices // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 86. — P. 043623.
 111. Bukov M., Pollet L. Mean-field phase diagram of the Bose-Fermi Hubbard model // Phys. Rev. A. — 2014. — Vol. 89. — P. 094502.
 112. Quantum phases of Bose-Fermi mixtures in optical lattices / H. Fehrmann, M. Baranov, M. Lewenstein, L. Santos // Optics. Express. — 2004. — Vol. 12. — P. 55.
 113. Cramer M., Eisert J., Illuminati F. Inhomogeneous atomic Bose-Fermi mixtures in cubic lattices // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 93. — P. 190405.
 114. Feshbach H. Unified theory of nuclear reactions // Ann. Phys. — 1958. — Vol. 5. — P. 337.
 115. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate / S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger et al. // Nature. — 1998. — Vol. 392. — P. 151.

116. Mean-field theory of Bose-Fermi mixtures in optical lattices / H. Fehrmann, M. A. Baranov, B. Damski et al. // Optics Communications. — 2004. — Vol. 243.
117. Atomic Bose-Fermi mixtures in an optical lattice / M. Lewenstein, L. Santos, M. A. Baranov, H. Fehrmann // Phys.Rev. Lett. — 2004. — Vol. 92. — P. 050401.
118. Büchler H. P., G. B. Supersolid versus phase separation in atomic Bose-Fermi mixtures // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Vol. 91. — P. 130404.
119. Polak T. P., Kopeć T. K. Zero-temperature phase diagram of Bose-Fermi gaseous mixtures in optical lattices // Phys. Rev. A. — 2010. — Vol. 81. — P. 043612.
120. Refael G., Demler E. Superfluid-insulator transition in Fermi-Bose mixtures and the orthogonality catastrophe // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 77. — P. 144511.
121. Titvinidze I., Snoeck M., Hofstetter W. Supersolid Bose-Fermi mixtures in optical lattices // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 100. — P. 100401.
122. Bijlsma M. J., Herings B. A., Stoof H. T. C. Condensate growth in trapped Bose gases // Phys. Rev. A. — 2000. — Vol. 61. — P. 053601.
123. Influence of induced interactions on the superfluid transition in dilute fermi gases / H. Heiselberg, C. J. Pethick, H. Smith, L. Viverit // Phys. Rev. Lett. — 2000. — Vol. 85. — P. 2418.
124. Viverit L., Giorgini B. Ground-state properties of a dilute Bose-Fermi mixture // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 66. — P. 063604.
125. From the Cooper problem to canted supersolids in Bose-Fermi mixtures / P. Anders, P. Werner, M. Troyer et al. // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Vol. 109. — P. 206401.
126. Luttinger liquid of polarons in one-dimensional boson-fermion mixtures / L. Mathey, D. W. Wang, W. Hofstetter et al. // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 93. — P. 120404.
127. Micnas R., Ranninger J., Robaszkiewicz S. Superconductivity in narrow-band

- systems with local nonretarded attractive interactions // *Rev. Mod. Phys.* — 1990. — Vol. 62. — P. 113.
128. Sengupta K., Dupuis N., Majumdar P. Bose-Fermi mixtures in an optical lattice // *Phys. Rev. A.* — 2007. — Vol. 75. — P. 063625.
 129. Stasyuk I. V., Velychko O. V. Two-state Bose-Hubbard model in the hard-core boson limit // *Condens. Matter Phys.* — 2011. — Vol. 14. — P. 13004.
 130. Stasyuk I. V., Vorobyov O. Energy spectrum and phase diagrams of two-sublattice hard-core boson model // *Cond. Matter Phys.* — 2013. — Vol. 16. — P. 23005.
 131. Mysakovych T. S. Bose-Fermi-Hubbard model at finite temperature // *J.Phys.Stud: Condens. Matter.* — 2010. — Vol. 22. — P. 355601.
 132. Mysakovych T. S. Bose-Fermi-Hubbard model: Pseudospin operator approach // *Physica B.* — 2011. — Vol. 406. — P. 1858.
 133. Stasyuk I. V., Shvaika A. M. Dielectric properties and electron spectrum of the Müller model in the high-temperature superconductivity theory // *Acta Physica Polonica A.* — 1993. — Vol. 84, no. 2. — P. 293.
 134. Церковников Ю. А. О расщеплении цепочек уравнений для двухвременных функций грин // *Теоретическая и математическая физика.* — 1971. — Т. 7, № 2. — С. 250–261.
 135. Plakida N. M. Dyson equation for Heisenberg ferromagnet // *Phys. Lett. A.* — 1973. — Vol. 43. — P. 467.
 136. Плакида Н. М. Метод двухвременных функций грин в теории ангармонических кристаллов // *Статистическая физика и квантовая теория поля.* — М., 1973. — С. 240.
 137. J. E. Hirsch S. T. Effective interactions in an oxygen-hole metal // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40, no. 4. — P. 2179.
 138. Слободян П. М., Стасюк И. В. Диаграмная техника для операторов Хаббарда // *Теоретическая и математическая физика.* — 1974. — Т. 19, № 3. — С. 423–429.
 139. Mysakovych T. S., Stasyuk I. V. Pseudospin-electron model of intercalation //

- J. Phys. Studies. — 2007. — Vol. 11. — P. 195.
140. Robaszkiewicz S., Pawłowski G. Effects of disorder on charge orderings and superconductivity in the system of coexisting itinerant electrons and local pairs // Supercunductivity. — 2004. — Vol. 17, no. 1. — P. 37.
 141. Dupuis N., Sengupta K. Superfluid to Mott-insulator transition of cold atoms in optical lattices // Physica B: Phys. Condens. Matt. — 2008. — Vol. 404. — P. 517.
 142. Atomic Fermi-Bose mixtures in inhomogeneous and random lattices: From Fermi glass to quantum spin glass and quantum percolation / A. Sanpera, K. Kantian, L. Sanchez-Palencia et al. // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 93, no. 4. — P. 040401.
 143. Schulte T. e. a. Cold atomic gases in optical lattices with disorder // Acta Phys. Polon. A. — 2006. — Vol. 109. — P. 89.
 144. Mysakovych T. S. Bose-Fermi-Hubbard model on a lattice with two nonequivalent sublattices // Cond. Mat. Phys. — 2011. — Vol. 14, no. 4. — P. 43301.
 145. Akhanjee S. Quantum phase coherence in non-Markovian and reaction-diffusive transport // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 82. — P. 075138.

ДОДАТОК А

БАЗОВІ РІВНЯННЯ ТЕОРІЇ ДИНАМІЧНОГО СЕРЕДНЬОГО ПОЛЯ

Основу теорії динамічного середнього поля (ДСП) складає перехід до границі нескінченної вимірності простору $d = \infty$. Він супроводжується скейлінгом параметра переносу електронів:

$$t_{ij} \rightarrow \frac{t_{ij}}{\sqrt{d}}. \quad (\text{A.1})$$

У цьому випадку власноенергетична частина електронної функції Гріна стає локальною [36, 37]:

$$\Sigma_{ij,\sigma}(\omega) = \Sigma_{\sigma} \delta_{ij}, \quad d = \infty. \quad (\text{A.2})$$

Фур'є-образ $\Sigma_{ij,\sigma}(\omega)$ не залежить від імпульса

$$\Sigma_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega). \quad (\text{A.3})$$

Тому електронна функція Гріна в представленні (k, ω) :

$$G_k^{\sigma}(\omega) = \sum_{i-j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} G_{ij,\sigma}(\omega), \quad (\text{A.4})$$

може бути переписана як:

$$G_k^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{[\Xi_{\sigma}(\omega)]^{-1} - t_k} \quad (\text{A.5})$$

де $\Xi_{\sigma}(\omega)$ є незвідною (в діаграмному представленні) за Ларкіним.

Для розрахунку функції $\Xi_\sigma(\omega)$ використовується ефективна одновузлова задача. Перехід до такої задачі відбувається заміною

$$e^{-\beta H} \rightarrow e^{-\beta H_{eff}} = e^{-\beta H_0} \text{Exp} \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma J_\sigma(\tau - \tau') a_\sigma^+(\tau) a_\sigma(\tau') \right\} \equiv e^{-\beta H_0} \tilde{\sigma}(\beta), \quad (\text{A.6})$$

де

$$H_0 = H_i, \quad (\text{A.7})$$

та $J_\sigma(\tau - \tau')$ - ефективне часовозалежне поле (когерентний потенціал), що самоузгоджено визначається з умови, що та сама власноенергетична частина $\Xi_\sigma(\omega)$ визначає як граткову функцію $G_k^\sigma(\omega)$ так і функцію Гріна $G_\sigma^{(a)}(\omega)$ ефективної одновузлової задачі:

$$G_\sigma^{(a)}(\omega) = \frac{1}{[\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} - J_\sigma(\omega)}. \quad (\text{A.8})$$

В такому випадку:

$$G_\sigma^{(a)} = G_{ii,\sigma}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k G_k^\sigma(\omega). \quad (\text{A.9})$$

Система рівнянь [A.5, A.8, A.9](#) стає замкнутою, якщо її доповнити функціональною залежністю

$$G_\sigma^{(a)}(\omega) = f([J_\sigma(\omega)]), \quad (\text{A.10})$$

що отримується як результат розв'язку ефективної одновузлової задачі з статистичним оператором $\exp(-\beta H_{eff})$.

Така схема розрахунку одночастинкової функції Гріна застосовується у розділі [2](#) для знаходження електронної функції Гріна псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ).

ДОДАТОК Б

РІЗНОЧАСОВІ РОЗЩЕПЛЕННЯ ФУНКЦІЙ ГРІНА

Функція Гріна $\langle\langle \widetilde{X^{12}\xi_{\downarrow}^+} | \widetilde{\xi_{\downarrow} X^{21}} \rangle\rangle \equiv I_3(\omega)$

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \xi_{\downarrow}(t) X^{21}(t) X^{12} \xi_{\downarrow}^+ \rangle\rangle^{\text{ir}} &\approx \langle X^{21}(t) X^{12} \rangle \langle\langle \xi_{\downarrow}(t) \xi_{\downarrow}^+ \rangle\rangle, \\
 \langle X^{21}(t) X^{12} \rangle &= \exp[i(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)t] \langle X^{22} \rangle, \\
 I_3(\omega) &= \frac{1}{2} \langle X^{11} + X^{22} \rangle \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_2 + \varepsilon_1} + \frac{1}{2\pi} \langle X^{11} - X^{22} \rangle \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta\omega'}{2} \left[-2\text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega' + i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_2 + \varepsilon_1}. \quad (\text{Б.1})
 \end{aligned}$$

Функція Гріна $\langle\langle \widetilde{X^{34}\xi_{\downarrow}} | \widetilde{\xi_{\downarrow}^+ X^{43}} \rangle\rangle \equiv I_4(\omega)$:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \xi_{\downarrow}^+(t) X^{43}(t) X^{34} \xi_{\downarrow} \rangle\rangle^{\text{ir}} &\approx \langle X^{43}(t) X^{34} \rangle \langle\langle \xi_{\downarrow}(t) \xi_{\downarrow}^+ \rangle\rangle, \\
 \langle X^{43}(t) X^{34} \rangle &\approx \langle X^{44} \rangle, \\
 I_4(\omega) &= \langle X^{44} \rangle \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega}. \quad (\text{Б.2})
 \end{aligned}$$

Функція Гріна $\langle\langle \widetilde{X^{12}\tilde{\xi}_{\downarrow}^+} | \widetilde{\xi_{\downarrow} X^{\tilde{2}1}} \rangle\rangle \equiv I_5(\omega)$:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \xi_{\downarrow}(t) X^{\tilde{2}1}(t) X^{12} \tilde{\xi}_{\downarrow}^+ \rangle\rangle^{\text{ir}} &\approx \langle X^{\tilde{2}1}(t) X^{12} \rangle \langle\langle \xi_{\downarrow}(t) \xi_{\downarrow}^+ \rangle\rangle, \\
 \langle X^{\tilde{2}1}(t) X^{12} \rangle &= \exp[i(\varepsilon_{\tilde{2}} - \varepsilon_1)t] \langle X^{\tilde{2}2} \rangle, \\
 I_5(\omega) &= \frac{1}{2} \langle X^{11} + X^{\tilde{2}2} \rangle \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_{\tilde{2}} + \varepsilon_1} + \frac{1}{2\pi} \langle X^{11} - X^{\tilde{2}2} \rangle
 \end{aligned}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta \omega'}{2} \left[-2 \text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega' + i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_2 + \varepsilon_1}. \quad (\text{Б.3})$$

Функція Гріна $\widetilde{\langle \langle X^{\tilde{3}4} \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ X^{4\tilde{3}} \rangle \rangle} \equiv I_6(\omega)$:

$$\begin{aligned} \left\langle \xi_{\downarrow}^+(t) X^{4\tilde{3}}(t) X^{\tilde{3}4} \xi_{\downarrow} \right\rangle^{\text{ir}} &\approx \left\langle X^{4\tilde{3}}(t) X^{\tilde{3}4} \right\rangle \left\langle \xi_{\downarrow}^+(t) \xi_{\downarrow} \right\rangle, \\ \left\langle X^{4\tilde{3}}(t) X^{\tilde{3}4} \right\rangle &= \exp[i(\varepsilon_4 - \varepsilon_{\tilde{4}})t] \left\langle X^{44} \right\rangle, \\ I_6(\omega) &= \frac{1}{2} \left\langle X^{44} + X^{\tilde{3}\tilde{3}} \right\rangle \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_4 + \varepsilon_{\tilde{3}}} + \frac{1}{2\pi} \left\langle X^{44} - X^{\tilde{3}\tilde{3}} \right\rangle \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta \omega'}{2} \left[-2 \text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega' + i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_4 + \varepsilon_{\tilde{3}}}. \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

Повний вираз для незвідної функції Гріна $\langle \langle Z^{14} | Z^{41} \rangle \rangle$

$$\langle \langle Z^{14} | Z^{41} \rangle \rangle \frac{1}{V^2} = \cos^2(\phi_4 - \phi_1) A_{14} \left\langle \left\langle \xi_{\uparrow} | \xi_{\uparrow}^+ \right\rangle \right\rangle + R_{(1)\uparrow}^{14}(\omega) + R_{(2)\uparrow}^{14}(\omega). \quad (\text{Б.5})$$

Тут, для $R_{(1)\uparrow}^{14}(\omega)$:

$$\begin{aligned} R_{(1)\uparrow}^{14}(\omega) &= \frac{1}{2} \sin^2(\phi_4 - \phi_1) A_{4\tilde{4}} \left\langle \left\langle \xi_{\uparrow} | \xi_{\uparrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_4 + \varepsilon_{\tilde{4}}} \\ &+ \frac{1}{2} \sin^2(\phi_4 - \phi_1) A_{1\tilde{1}} \left\langle \left\langle \xi_{\uparrow} | \xi_{\uparrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_{\tilde{1}} + \varepsilon_1} \\ &+ \frac{1}{2} \cos^2(\phi_2 - \phi_4) A_{12} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_2 + \varepsilon_1} \\ &+ \left\langle X^{44} \right\rangle \cos^2(\phi_3 - \phi_1) \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega} \\ &+ \frac{1}{2} \sin^2(\phi_2 - \phi_4) A_{1\tilde{2}} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_{\tilde{2}} + \varepsilon_1} \\ &+ \frac{1}{2} \sin^2(\phi_3 - \phi_1) A_{4\tilde{3}} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega - \varepsilon_4 + \varepsilon_{\tilde{3}}} \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

Цей доданок враховує самоузгоджене ренормування одновузлового спектру внаслідок дії зовнішнього динамічного поля, сформованого збудженнями магнетного типу, електронними (дірковими) парами та псевдоспіновою підсистемою.

Останній доданок $R_{(2)\uparrow}^{14}(\omega)$:

$$\begin{aligned}
R_{(2)\uparrow}^{14}(\omega) = & \frac{1}{2\pi} \sin^2 \phi_{41} \langle X^{\widetilde{44}} - X^{44} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta\omega'}{2} \left[-2\text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\uparrow} | \xi_{\uparrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega'+i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_4 + \varepsilon_{\widetilde{4}}} \\
& + \frac{1}{2\pi} \sin^2 \phi_{41} \langle X^{11} - X^{\widetilde{11}} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta\omega'}{2} \left[-2\text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\uparrow} | \xi_{\uparrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega'+i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_{\widetilde{1}} + \varepsilon_1} \\
& + \frac{1}{2\pi} \cos^2 \phi_{24} \langle X^{11} - X^{22} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta\omega'}{2} \left[-2\text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega'+i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_2 + \varepsilon_1} \\
& + \frac{1}{2\pi} \sin^2 \phi_{24} \langle X^{11} - X^{\widetilde{22}} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta\omega'}{2} \left[-2\text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow}^+ | \xi_{\downarrow} \right\rangle \right\rangle_{\omega'+i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_{\widetilde{2}} + \varepsilon_1} \\
& + \frac{1}{2\pi} \sin^2 \phi_{31} \langle X^{44} - X^{\widetilde{33}} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th} \frac{\beta\omega'}{2} \left[-2\text{Im} \left\langle \left\langle \xi_{\downarrow} | \xi_{\downarrow}^+ \right\rangle \right\rangle_{\omega'+i\delta} \right] d\omega'}{\omega - \omega' - \varepsilon_4 + \varepsilon_{\widetilde{3}}}, \tag{Б.7}
\end{aligned}$$

відповідає за процеси розсіяння.

Доданки типу $R_{(1)\uparrow}^{14}(\omega)$ та $R_{(2)\uparrow}^{14}(\omega)$ розглядаються по-різному в різних наближеннях. Наприклад, для наближення Хаббард-III тільки перший з них враховується [39, 40]. В нашому випадку використовується наближення сплаву тому нехтується обидвома доданками (див. [40]).

ДОДАТОК В

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

1. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Pseudospin-electron model spectrum in alloy analogy approximation // Condens. Matter Phys. — 2006. — Vol. 9, no. 4(48) — P. 725–739.
2. Mysakovych T.S., Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Phase transitions in the lattice model of intercalation // Condens. Matter Phys. — 2008. — Vol. 11, no. 4(56) — P. 663–667.
3. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S., Krasnov V.O. Phase diagrams of the Bose-Fermi-Hubbard model: Hubbard operator approach // Condens. Matter Phys. — 2010. — Vol. 13, no. 1 — P. 1–7.
4. Mysakovych T.S., Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Lattice Model of Intercalation // Ukr. J. Phys. — 2010. — Vol. 5, no. 2. — P. 228–234.
5. Stasyuk I. V., Krasnov V.O. Energy Spectrum of the Pseudospin-Electron Model in a Dynamical Mean-Field Approach // Ukr. J. Phys. — 2013. — Vol. 58, no. 1. — P. 68–76.
6. Krasnov V.O. Fermion Spectrum of Bose-Fermi-Hubbard Model in the Phase with Bose-Einstein Condensate // Ukr. J. Phys. — 2015. — Vol. 60, no. 5. — P. 443–451.
7. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Phase transitions in Bose-Fermi-Hubbard model in the heavy fermion limit: Hard-core boson approach // Condens. Matter Phys. — 2015. — Vol. 18, no. 4. — P. 1–20.
8. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Phase transitions in the hard-core Bose-Fermi-

- Hubbard model at non-zero temperatures in the heavy-fermion limit // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. — 2017. — Vol. 511, no. 1. — P. 109–122.
9. Стасюк І. В., Краснов В. О. Спектр псевдоспін-електронної моделі в сплавному наближенні // *Матеріали V міжнародної школи - конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”* — Дрогобич (Україна), 2005. — 27–30 червня. — С. 220.
 10. Stasyuk I. V., Krasnov V. O. Pseudospin-electron model spectrum in alloy analogy approxymation // *Book of Abstracts of the International Conference “Statistical Physics 2006. Condensed Matter: Theory and Applications”*. — Kharkiv (Ukraine), 2006. — September 11–15 — P. 84.
 11. Мисакович Т. С., Стасюк І. В., Краснов В. О. Граткова модель інтеркаляції // *Матеріали IV Міжнародної наукової конференції “Фізика невідпорядкованих систем”* — Львів (Україна), 2008. — 14–16 жовтня. — С. 56.
 12. Mysakovych T. S., Stasyuk I. V., Krasnov V. O. Thermodynamics of lattice model of intercalation // *Program and abstracts of the 3-rd conference “Statistical physics: modern trends and applications”*. — Lviv (Ukraine), 2009. — June 23–25 — P. 197.
 13. Mysakovych T. S., Krasnov V. O., Stasyuk I. V. Phase transitions in the lattice model of intercalation // *Book of abstracts ICPTTFN-XII*. — Ivano-Frankivsk (Ukraine), 2009. — May 18–22 — vol. 1, — P. 465.
 14. Stasyuk I. V., Mysakovych T. S., Krasnov V. O. Phase diagrams of Bose-Fermi-Hubbard model at nonzero temperature // *9-th ISSFIT International symposium on systems with fast ionic transport*. — Ryga, (Latvia), 2010. — June 1–5 — poster 4.
 15. Стасюк І. В., Мисакович Т. С., Краснов В. О. Модель Бозе-Фермі-Хаббарда: підхід операторів Хаббарда // *VII Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”* — Дрогобич (Україна), 2010. — 28 вересня – 1 жовтня. — С. 70.

16. Krasnov V.O. Fermion spectrum of the Bose-Fermi-Hubbard model // In: Program and Proceedings of the V Young Scientists Conference “Problems of Theoretical Physics”. — Kyiv (Ukraine), 2013. — December 24-27, 2013. — P. 29.

ДОДАТОК Г

АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

Результати дисертації доповідались і опубліковані в матеріалах таких конференцій, нарад та семінарів: V,VI,VII міжнародні школи - конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, (Дрогобич, Національний педагогічний університет, 27-30.06.2005 р., 23-26.09.2008 р., 29.09-1.10.2010 р.); IV Міжнародна наукова конференція “Фізика неупорядкованих систем”, (Львів, 14-16 жовтня 2008 р.); The 3-rd conference “Statistical physics: modern trends and applications” (Lviv, 23-25 June, 2009); Конференція молодих вчених “Проблеми теоретичної фізики” (Київ, Інститут теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України, 24-27 грудня 2013 р.).

Окремі результати доповідалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України та відділу квантової статистики цього інституту.