Ігор Васильович Стасюк
Ірина Романівна Дулепа
Олег Володимирович Величко

Дослідження спектральних характеристик бозонного спектру двовимірних оптичних ґраток зі структурою типу графену

Роботу отримано 20 грудня 2013 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–13–11U

І.В. Стасюк, І.Р. Дулепа, О.В. Величко

ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК БОЗОННОГО СПЕКТРУ ДВОВИМІРНИХ ОПТИЧНИХ ҐРАТОК ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ ГРАФЕНУ

ЛЬВІВ

УДК: 538.931, 538.911, 538.941

PACS: 66.30.Dn, 66.10.Ed

Дослідження спектральних характеристик бозонного спектру двовимірних оптичних ґраток зі структурою типу графену

І.В. Стасюк, І.Р. Дулепа, О.В. Величко

Анотація. Досліджено зонний спектр бозонних атомів у двовимірних оптичних ґратках із структурою типу графену. У наближенні хаотичних фаз розраховано для нормальної фази закони дисперсії в зонах та одночастинкові спектральні густини. Отримано безщілинний спектр з точками Дірака на краю зони Брілюена при відсутності розділення кристалу на підґратки. Встановлено, що навіть при малих відмінностях між енергіями частинок на вузлах двох підґраток, виникає щілина у спектрі. Визначено частотні залежності одночастинкової спектральної густини для обидвох підґраток в залежності від розміщення рівня хімічного потенціалу, величини щілини у зонному спектрі та температури.

Investigation of spectral features of boson spectrum of two-dimensional optical lattices with the graphene type structure

I.V. Stasyuk, I.R. Dulepa, O.V. Velychko

Abstract. The band spectrum of boson atoms in two-dimensional optical lattices with the graphene type structure is investigated. Dispersion laws in the bands and single-particle spectral densities for normal phase are calculated in the random phase approximation. The gapless spectrum with Dirac points placed on the border of Brillouin zone is obtained in the case if absence of crystal separation into two sublattices. It is shown that even at small differences between particle on site energies in sublattices, there appears a gap in the spectrum. The frequency dependences of the single-particle spectral density for both sublattices (as function of the chemical potential level, the magnitude of gap in the band spectrum as well as temperature) are determined.

Подається в Condens. Matter Phys.
Submitted to Condens. Matter Phys.

Вступ

У дослідженні та описі поведінки ультрахолодних бозе-атомів у двовимірних оптичних ґратках з гексагональною структурою поєднались два важливі напрямки сучасної квантової фізики. З одного боку, в оптичних ґратках відбуваються фазові переходи у підсистемі бозонів, пов'язані з їх бозе-конденсацією; можуть також виникати нові фази особливого типу. Інтерес до таких об'єктів зумовлений ще й тим, що ряд явищ фізики конденсованого стану та систем з сильними кореляціями частинок можуть бути відтворені шляхом розгляду поведінки атомів, поміщених в оптичні ґратки. З другого боку, предметом особливої уваги є останнім часом двовимірна гексагональна вуглецева структура, відома як графен. Вона має унікальні фізичні властивості, поява яких викликана т. зв. діраківським енергетичним спектром електронів провідності (лінійним законом дисперсії в області K-точок зони Брилюена). Тому вивченню термодинаміки і енергетичного спектру бозе- (а також фермі-) атомів у оптичних ґратках типу графену надається значна увага. До важливих проблем належить, зокрема, дослідження впливу згаданої особливості енергетичного спектру на картину фазових переходів у системі ультрахолодних атомів. Цікавою є і зворотня задача, яка стосується змін у структурі спектру при переходах від одних фаз до інших.

Квантові стани системи бозе-атомів і перехід до фази з бозе-конденсатом (т. зв. SF-фази) у оптичній ґратці типу графену були спостережені в [1]. Виявлені при цьому області існування різних фаз (моттівського діелектрика і надплинної) узгоджувались якісно з фазовими діаграмами, розрахованими у наближенні середнього поля. Уточнення фазових границь шляхом врахування міжвузлових кореляцій за допомогою кластерного узагальнення схеми Гутцвіллера було проведено пізніше [2]. Зверталась також увага на гексагональні ґратки, у яких на відміну від графену локалізовані стани у вузлах оптичної ґратки є енергетично нееквівалентними, якщо ці вузли належать до різних підґраток. Розглядались випадки різних енергій одновузлового відштовхування ($U_A \neq U_B$) [3] та різних глибин потенціальних ям ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_B$) [4,5]. У другому з них було враховано, що у процесах перенесення частинок і утворення конденсату можуть брати участь, крім s-, ще й збуджені $p_{x,y}$-стани атомів, локалізованих у більш глибоких ямах. Це дало змогу дослідити механізми, що ведуть до утворення т. зв. орбітальної (мультиорбітальної) надплинної фази.

Особливостям енергетичного спектру бозонів у оптичних ґратках зі структурою типу графену присвячено небагато робіт. В [6] розглядались зміни у розташуванні діраківських точок і топології спектру під впливом взаємодії між частинками. Було застосоване наближення слабкого зв'язку (в рамках підходу Боголюбова). В роботах [5, 7] ставилось питання про переміщення і можливе зникнення діраківських точок внаслідок анізотропної ($t_{ij} \neq t_{ij'}$) зміни параметрів перенесення частинок між сусідніми вузлами у ґратці (така зміна може бути зумовлена дією механічного струшування [7]). Більш повний аналіз спектру і його перебудови при переходах з одних фаз до інших не проводився.

Теоретичний опис конденсації бозе-частинок у оптичних ґратках, взагалі, і у ґратках зі структурою типу графену, зокрема, проводиться переважно на основі моделі Бозе-Хаббарда, а також у її граничному випадку ($U \to \infty$) - моделі жорстик бозонів. Ця модель адекватно описує термодинаміку і енергетичний спектр бозонної системи при малих рівнях заповнення ($0 \leq n \leq 1$) і при застосуванні (у її найбільш простому формулюванні) до гексагональних ґраток дає можливість встановити межі областей, де існують основні фази - моттівського діелектрика (MI), надплинна (SF), а також модульована (CDW); остання існує при нееквівалентності підґраток. Розширення моделі жорстких бозонів (шляхом врахування перестрибування t_{ij} частинок на дальші, крім найближчих, вузли в ґратці) виявило існування нових фаз. Як показано в [8], більший радіус функції t_{ij} приводить до появи у ґратці типу графену особливої фази - т. зв. бозе - металу.

Модель жорстких бозонів відома ще з 1950-х років. Її перше застосування пов'язане з теорією рідкого гелію в рамках ґраткового опису [9]. Модель була використана в теорії систем джозефсонівських контактів [10], теорії високотемпературної надпровідності у підході локальних пар [11]; була також покладена в основу обчислень іонної провідності у кристалах [12]. На протязі останніх років, крім опису систем ультрахолодних бозе-частинок у оптичних ґратках, модель застосовується при розгляді фізичних процесів, пов'язаних з іонною інтеркаляцією та адсорбцією квантових частинок на поверхні металів [13, 14].

Дана робота є продовженням наших теоретичних досліджень [15–18] енергетичного спектру та спектральних характеристик квантового ґраткового бозе-газу і, зокрема, моделі жорстких бозонів. В рамках псевдоспінового опису шляхом застосування процедури ферміонізації у одновимірному випадку [15], та у наближенні хаотичних фаз у більш загальному тривимірному [16], досліджено зміни у одночастинкових спектральних густинах при переході від невпорядкованого (NO) до впорядкованого стану (у якому $\langle S^x \rangle = \langle b^+ \rangle = \langle b \rangle \neq 0$), який є аналогом фази із ґратковим бозе-конденсатом (SF-фази). Отримані в [16] спектральні густини та їх зміни із частотою якісно узгоджуються з частотними залежностями таких густин, розрахованих на основі ферміонізації, а також методом точної діагоналізації на одновимірних кластерах [17].

Об'єктом нашого теперішнього дослідження є спектральні характеристики одночастинкового спектру моделі жорстких бозонів на плоскій гексагональній ґратці (ґратці типу ґрафену) з енергетично нееквівалентними вузлами. Подібна задача для тривимірної ґратки з модельною густиною станів для незбуреного одночастинкового спектру розглядалась в [18] і певні загальні закономірності структури зонного спектру жорстких бозонів були з'ясовані. Ґратка типу графену вносить, однак, свою специфіку у будову спектру і це потрібно вивчити. Ми застосовуємо підхід, викладений в [16,18]; він грунтується на псевдоспіновому формалізмі і використанні методики функцій Гріна при обчисленні спектральних густин. На першому етапі розрахунків, який складає зміст даної публікації, знайдемо зонну структуру і одночастинкові спектральні густини для невпорядкованої (нормальної) фази та дослідимо їх залежності від розміщення рівня хімічного потенціалу бозе-частинок відносно зонного спектру, величини різниці одновузлових енергій $\delta = (\varepsilon_A - \varepsilon_B)/2$ та температури.

1. Будова ґратки

Розглядаємо гексагональну двовимірну структуру типу ґратки графену. У випадку оптичних ґраток, гексагональна ґратка отримується інтерференцією трьох лазерних променів [5], сума хвильових векторів яких дорівнює нулю $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$ і кути між напрямками $\frac{2\pi}{3}$ (рис. 1 (a)). Така ґратка містить дві трикутні підґратки A і B, зсунуті на вектор $\frac{(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)}{3}$. Елементарна комірка ґратки містить два вузли, по одному вузлу із обидвох підґраток. Для даної ґратки (рис. 1 (b)) вектори трансляцій:

$$\mathbf{a_1} = \left(a\sqrt{3}, 0\right), \mathbf{a_2} = \left(a\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}a\right).$$

Гексагональній ґратці відповідає гексагональна зона Брилюена в оберненому просторі хвильових векторів (рис. 2). Це є правильний

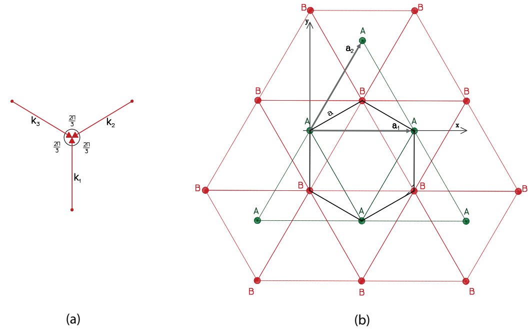

Рис. 1. Хід трьох компланарних лазерних променів в експериментальній установці для створення гексагональної оптичної ґратки (a). Гексагональна ґратка у прямому просторі (b).

шестикутник з двома нееквівалентними точками K, K' в кутах зони. Вектори трансляцій:

$$\mathbf{b_1} = \left(\frac{1}{\sqrt{3}a}, \frac{1}{3a}\right), \mathbf{b_2} = \left(0, \frac{2}{3a}\right);$$

$|\mathbf{b_1}| = |\mathbf{b_2}| = \frac{2}{3a}$, a - відстань між найближчими сусідами у прямій ґратці. Віддаль від центру зони Брилюена до точок K, K' дорівнює $\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$.

При розгляді енергетичного спектру квантових частинок (бозонів) на оптичній ґратці можна використовувати підхід сильного зв'язку. Він грунтується на врахуванні перестрибувань частинки між найближчими вузлами, яке описується параметром t, пов'язаним із перекриттям хвильових функцій бозе-частинок, локалізованих у цих вузлах. Координаційне число кожного атома $z = 3$. Три вектори, спрямовані до сусідніх вузлів ($|\mathbf{R}_1| = |\mathbf{R}_2| = |\mathbf{R}_3| = a$) (рис. 3), є наступними

$$\mathbf{R}_1 = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2}\right), \mathbf{R}_2 = \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2}\right), \mathbf{R}_3 = (0, -a).$$

Фур'є-образи енергії перестрибування на сусідні вузли у двох випадках: $A \Rightarrow B$ ($t^{AB}(\mathbf{q})$) і $B \Rightarrow A$ ($t^{BA}(\mathbf{q})$) відрізняються знаком перед векторами $\mathbf{R}_c$ (рис. 3):

$$t^{AB}(\mathbf{q}) = t\sum_{c=1}^{3} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_c}, t^{BA}(\mathbf{q}) = t\sum_{c=1}^{3} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_c}.$$

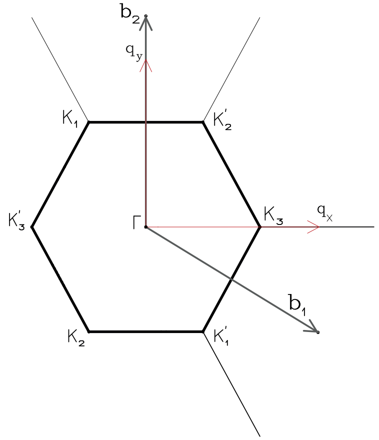

Рис. 2. I-а зона Брилюена, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ - вектори трансляцій.

Отримуємо

$$t^{AB}(\mathbf{q}) = t\left(e^{-iq_y a} + 2\cos\left(q_x\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)e^{i\frac{q_y a}{2}}\right),$$

$$t^{BA}(\mathbf{q}) = t\left(e^{iq_y a} + 2\cos\left(q_x\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)e^{-i\frac{q_y a}{2}}\right)$$

і в загальному випадку безрозмірний параметр, пов'язаний із пере-

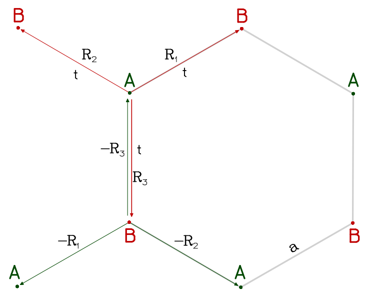

Рис. 3. Найближчі сусіди вузлів з підґраток A і B.

носом $A \rightleftharpoons B$ між найближчими сусідами, має вигляд:

$$\gamma(\mathbf{q}) = \pm\frac{\sqrt{|t^{AB}(\mathbf{q})\,t^{BA}(\mathbf{q})|}}{t} =$$

$$\pm\sqrt{1+4\cos\left(q_x\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)\cos\left(q_y\frac{3}{2}a\right)+4\cos^2\left(q_x\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)}. \qquad (1.1)$$

Він використовуватиметься нами нижче.

2. Модель

Гамільтоніан квантового ґраткового газу у загальному випадку дається виразом

$$H = -\sum_{i,j} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_i (\varepsilon_\alpha - \mu) n_i - \sum_{i,j} K_{ij} n_i n_j.$$

Тут t_{ij} - інтеграл переносу, ε_α - енергія на вузлі ($\alpha = A, B$ - індекс підґратки), μ - хімічний потенціал, K_{ij} - енергія міжвузлової взаємодії, b_i^+ (b_i) - оператори народження (знищення) частинки, n_i - число частинок на вузлі i.

У випадку оптичних ґраток з глибокими потенціальними ямами енергія одновузлового відштовхування бозе-атомів є великою і добрим наближенням є підхід жорстких бозонів, у якому існує обмеження на їх число заповнення (n_i =0 або 1). Такі бозони описуються операторами Паулі з комутаційними співвідношеннями.

$$[b_i^+, b_j^+] = [b_i, b_j] = [b_i^+, b_j] = 0,\; i \neq j; \{b_i, b_i^+\} = 1$$

.

Модель стає еквівалентною до задачі зі спіном $S =\downarrow$ ($S =\uparrow$) в результаті перетворення

$$b_i^+ = S_i^-, b_i = S_i^+, b_i^+ b_i = n_i = \frac{1}{2} - S_i^z.$$

Гамільтоніан у спіновому представленні записується у вигляді

$$H = -\sum_{i,j} t_{ij} S_i^- S_j^+ - \sum_i h_\alpha S_i^z - \sum_{i,j} K_{ij} S_i^z S_j^z + const, \qquad (2.1)$$

де

$$h_\alpha = (\varepsilon_\alpha - \mu) - K(0),\; const = \sum_{\alpha=A,B} (\varepsilon_\alpha - \mu)\frac{N}{2} - \frac{1}{4} N K(0).$$

Надалі сталий доданок у гамільтоніані опускаємо. Сума за індексом i (j) вміщує суми: за n (n') - пробігає вузли ґратки та за α (β) - враховує підґратку.

$$\sum_i \to \sum_{n=1}^{N} \sum_{\alpha=A,B}, \qquad \sum_j \to \sum_{n'=1}^{N} \sum_{\beta=A,B}.$$

Член у гамільтоніані (2.1), який описує перенесення частинок, у спіновому представленні має вигляд:

$$\sum_{i,j} t_{ij} S_i^- S_j^+ = \sum_{n,n'} \sum_{\alpha,\beta} J_{nn'}^{\alpha\beta} (S_{n\alpha}^x S_{n'\beta}^x + S_{n\alpha}^y S_{n'\beta}^y).$$

Враховуючи вищесказане, у випадку двох підґраток отримуємо вираз для гамільтоніана системи:

$$H = -\sum_{nn'} \left[J_{nn'}^{AB} (S_{nA}^x S_{n'B}^x + S_{nA}^y S_{n'B}^y) + J_{nn'}^{BA} (S_{nB}^x S_{n'A}^x + S_{nB}^y S_{n'A}^y) \right]$$
$$- h_A \sum_n S_{nA}^z - h_B \sum_{n'} S_{n'B}^z - \sum_{nn'} (K_{nn'}^{AB} S_{nA}^z S_{n'B}^z + K_{nn'}^{BA} S_{nB}^z S_{n'A}^z).$$

Здійснимо поворот у спіновому просторі на деякий кут θ_α:

$$\begin{aligned} S_{n\alpha}^z &= \sigma_{n\alpha}^z \cos\theta_\alpha + \sigma_{n\alpha}^x \sin\theta_\alpha \\ S_{n\alpha}^x &= \sigma_{n\alpha}^x \cos\theta_\alpha - \sigma_{n\alpha}^z \sin\theta_\alpha, \\ S_{n\alpha}^y &= \sigma_{n\alpha}^y. \end{aligned}$$

Отримаємо

$$\begin{aligned} H \;=\; & -\sum_{nn'} L_1^{\alpha\beta} \sigma_{nA}^x \sigma_{n'B}^x - \sum_{nn'} L_2^{\alpha\beta} \sigma_{nA}^z \sigma_{n'B}^z \\ & + \sum_{nn'} L_3^{\alpha\beta} \sigma_{nA}^x \sigma_{n'B}^z + \sum_{nn'} L_4^{\alpha\beta} \sigma_{nA}^z \sigma_{n'B}^x - \sum_{nn'} L_5^{\alpha\beta} \sigma_{nA}^y \sigma_{n'B}^y \\ & - \sum_\alpha h_\alpha \sum_n (\sigma_{n\alpha}^z \cos\theta_\alpha + \sigma_{n\alpha}^x \sin\theta_\alpha), \end{aligned}$$

де введено позначення $L_\mu^{\alpha\beta}$, $\mu = 1\ldots5$:

$$\begin{aligned} L_1^{\alpha\beta} &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \cos\theta_A \cos\theta_B + (K_{nn'}^{AB} + K_{n'n}^{BA}) \sin\theta_A \sin\theta_B, \\ L_2^{\alpha\beta} &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \sin\theta_A \sin\theta_B + (K_{nn'}^{AB} + K_{n'n}^{BA}) \cos\theta_A \cos\theta_B, \\ L_3^{\alpha\beta} &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \cos\theta_A \sin\theta_B - (K_{nn'}^{AB} + K_{n'n}^{BA}) \sin\theta_A \cos\theta_B, \\ L_4^{\alpha\beta} &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \sin\theta_A \cos\theta_B - (K_{nn'}^{AB} + K_{n'n}^{BA}) \cos\theta_A \sin\theta_B, \\ L_5^{\alpha\beta} &= J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}. \end{aligned}$$

Виконаємо фур'є перетворення до хвильових векторів:

$$t_{\mathbf{q}}^{\alpha\beta} = \sum_{n-n'} (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{n\alpha} - \mathbf{R}_{n'\beta})} \equiv J(\mathbf{q}),$$
$$(t_{\mathbf{q}}^{\alpha\beta} = t_{-\mathbf{q}}^{\beta\alpha},\ n \leftrightarrow n',\ \alpha \neq \beta)$$
$$K_{\mathbf{q}}^{\alpha\beta} = \sum_{n-n'} (K_{nn'}^{AB} + K_{n'n}^{BA}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{n\alpha} - \mathbf{R}_{n'\beta})} \equiv K(\mathbf{q}).$$

Тоді

$$\begin{aligned} L_1(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \cos\theta_A \cos\theta_B + K(\mathbf{q}) \sin\theta_A \sin\theta_B, \\ L_2(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \sin\theta_A \sin\theta_B + K(\mathbf{q}) \cos\theta_A \cos\theta_B, \\ L_3(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \cos\theta_A \sin\theta_B - K(\mathbf{q}) \sin\theta_A \cos\theta_B, \\ L_4(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \sin\theta_A \cos\theta_B - K(\mathbf{q}) \cos\theta_A \sin\theta_B, \\ L_5(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}). \end{aligned}$$

Підсумування за внутрішнім індексом n' дає:

$$\sum_{n'} [\ldots]_{\mu}^{nn'} = L_{\mu}(0).$$

Розглянемо випадок відсутності взаємодій між частинками, покладаючи $K^{\alpha\beta} = 0$. Враховуючи еквівалентність оточення вузлів з різних підґраток можемо записати $J_A(0) = J_B(0) \equiv J(0) = 3t$. Виділимо у гамільтоніані частину, що відповідає наближенню середнього поля (MF):

$$\sigma_{nA}^{\nu} \sigma_{n'B}^{\nu'} \to \langle \sigma_A^{\nu} \rangle \sigma_{n'B}^{\nu'} + \langle \sigma_B^{\nu'} \rangle \sigma_{nA}^{\nu} - \langle \sigma_A^{\nu} \rangle \langle \sigma_B^{\nu'} \rangle,$$
$$\nu, \nu' = x, y, z, \langle \sigma_{\alpha}^{x} \rangle = \langle \sigma_{\alpha}^{y} \rangle = 0.$$

У результаті гамільтоніан середнього поля набере вигляду

$$H_{MF} = -\sum_{n\alpha} E_{\alpha} \sigma_{n\alpha}^{z}. \tag{2.2}$$

Власні значення і кути повороту θ_{α} отримуються зі системи рівнянь

$$E_{\alpha} = (\varepsilon_{\alpha} - \mu) \cos\theta_{\alpha} - J(0) \langle S_{\beta}^{x} \rangle \sin\theta_{\alpha}, \tag{2.3}$$
$$(\varepsilon_{\alpha} - \mu) \sin\theta_{\alpha} + J(0) \langle S_{\beta}^{x} \rangle \cos\theta_{\alpha} = 0, \tag{2.4}$$

де

$$\langle S_{\alpha}^{x} \rangle = -\langle \sigma_{\alpha}^{z} \rangle \sin\theta_{\alpha},\ \langle S_{\alpha}^{z} \rangle = \langle \sigma_{\alpha}^{z} \rangle \cos\theta_{\alpha}, \tag{2.5}$$
$$\langle \sigma_{\alpha}^{z} \rangle = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta E_{\alpha}}{2},\ \alpha, \beta = A, B,\ \alpha \neq \beta. \tag{2.6}$$

У невпорядкованій (для системи бозонів - т. зв. нормальній) фазі: $\theta_{\alpha} = 0, \langle S_{\alpha}^{x} \rangle = 0, \langle S_{\alpha}^{z} \rangle = \langle \sigma_{\alpha}^{z} \rangle, E_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha}$. Розв'язок $\theta_{\alpha} \neq 0$ описує "впорядковану" фазу (фазу з конденсатом жорстких бозонів), для якої $\langle S_{\alpha}^{x} \rangle \equiv \langle b_{\alpha} \rangle \neq 0$ є параметром порядку. Система рівнянь (2.4) з (2.5),(2.6) визначає поведінку параметра порядку та середнього $\langle S_{\alpha}^{z} \rangle$ тобто $\langle n_{\alpha} \rangle$ із зміною температури у впорядкованій фазі. Зміна параметра порядку $\langle S^{x} \rangle$ з температурою у випадку, коли кристал не розділений на підґратки (рис. 4) [2] при заданому значенні енергії на вузлі в наближенні середнього поля є такою ж, як і для моделі Ізінга із поперечним полем (яке діє на спін, роль якого в даній роботі відіграє величина $h_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha} - \mu$). Надалі при обчисленнях будемо досліджувати поведінку зонного спектру бозонів у невпорядкованій (NO) фазі при фіксованій температурі в залежності від значень полів h_{α} при різній віддалі від ліній на фазових діаграмах (див. [18]), що визначають переходи до фази з бозе-конденсатом (SF-фази).

3. Функції Гріна та енергетичний спектр моделі

Одночастинковий енергетичний спектр можемо обчислити методом функцій Гріна із використанням наближення хаотичних фаз. Одночастинкова функція Гріна на операторах $\langle\langle b_{l\alpha} | b_{n\beta}^{+} \rangle\rangle$ дорівнює функції Гріна на операторах спіну $\langle\langle S_{l\alpha}^{+} | S_{n\beta}^{-} \rangle\rangle \equiv G_{l\alpha,n\beta}^{+-}$ [16,18]:

$$\langle\langle S_{l\alpha}^{+} | S_{n\beta}^{-} \rangle\rangle = \langle\langle S_{l\alpha}^{x} | S_{n\beta}^{x} \rangle\rangle - i \langle\langle S_{l\alpha}^{x} | S_{n\beta}^{y} \rangle\rangle + i \langle\langle S_{l\alpha}^{y} | S_{n\beta}^{x} \rangle\rangle + \langle\langle S_{l\alpha}^{y} | S_{n\beta}^{y} \rangle\rangle.$$

У NO-фазі ($\cos\theta_{\alpha} = 1, \sin\theta_{\alpha} = 0$):

$$G_{l\alpha,n\beta}^{+-} = \langle\langle \sigma_{l\alpha}^{x} | \sigma_{n\beta}^{x} \rangle\rangle - i \langle\langle \sigma_{l\alpha}^{x} | \sigma_{n\beta}^{y} \rangle\rangle + i \langle\langle \sigma_{l\alpha}^{y} | \sigma_{n\beta}^{x} \rangle\rangle + \langle\langle \sigma_{l\alpha}^{y} | \sigma_{n\beta}^{y} \rangle\rangle. \tag{3.1}$$

Записуємо рівняння руху для функцій Гріна на компонентах спіну:

$$\hbar\omega \langle\langle \sigma_{l\alpha}^{\nu} | \sigma_{n\beta}^{\nu'} \rangle\rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \langle [\sigma_{l\alpha}^{\nu}, \sigma_{n\beta}^{\nu'}] \rangle + \langle\langle [\sigma_{l\alpha}^{\nu}, H] | \sigma_{n\beta}^{\nu'} \rangle\rangle,$$
$$\nu, \nu' = x, y.$$

В результаті отримуємо системи рівнянь

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^x_{l\alpha}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle = iE_\alpha\langle\langle\sigma^y_{l\alpha}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle - i\langle\sigma^z_\alpha\rangle\sum_n L_5^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^y_{n\beta}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle,$$

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^y_{l\alpha}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle = -i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle\delta_{ln} - iE_\alpha\langle\langle\sigma^x_{l\alpha}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle + i\langle\sigma^z_\alpha\rangle\sum_n L_1^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^x_{n\beta}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle,$$

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^x_{l\beta}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle = iE_\beta\langle\langle\sigma^y_{l\beta}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle - i\langle\sigma^z_\beta\rangle\sum_n L_5^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^y_{n\alpha}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle,$$

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^y_{l\beta}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle = -iE_\beta\langle\langle\sigma^x_{l\beta}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle + i\langle\sigma^z_\beta\rangle\sum_n L_1^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^x_{n\alpha}|\sigma^x_{n\alpha}\rangle\rangle$$

та

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^x_{l\alpha}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle = i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle\delta_{ln} + iE_\alpha\langle\langle\sigma^y_{l\alpha}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle - i\langle\sigma^z_\alpha\rangle\sum_n L_5^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^y_{n\beta}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle,$$

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^y_{l\alpha}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle = -iE_\alpha\langle\langle\sigma^x_{l\alpha}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle + i\langle\sigma^z_\alpha\rangle\sum_n L_1^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^x_{n\beta}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle,$$

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^x_{l\beta}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle = iE_\beta\langle\langle\sigma^y_{l\beta}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle - i\langle\sigma^z_\beta\rangle\sum_n L_5^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^y_{n\alpha}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle,$$

$$\hbar\omega\langle\langle\sigma^y_{l\beta}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle = -iE_\beta\langle\langle\sigma^x_{l\beta}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle + i\langle\sigma^z_\beta\rangle\sum_n L_1^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma^x_{n\alpha}|\sigma^y_{n\alpha}\rangle\rangle.$$

Після фур'є-перетворення до хвильових векторів

$$G^{\nu\nu'}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \equiv \langle\langle\sigma^\nu_\alpha|\sigma^{\nu'}_\beta\rangle\rangle_\mathbf{q} = \sum_{l-n}\langle\langle\sigma^\nu_{l\alpha}|\sigma^{\nu'}_{n\beta}\rangle\rangle e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{l\alpha}-\mathbf{R}_{l\beta})}$$

з $L_1(\mathbf{q}) = L_5(\mathbf{q}) = J(\mathbf{q})$ рівняння систем для функцій Гріна отримують форму:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega G^{xx}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= iE_\alpha G^{yx}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) - iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{yx}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}),\\
\hbar\omega G^{yx}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= -i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle - iE_\alpha G^{xx}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) + iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{xx}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}),\\
\hbar\omega G^{xx}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= iE_\beta G^{yx}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) - iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{yx}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}),\\
\hbar\omega G^{yx}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= -iE_\beta G^{xx}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) + iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{xx}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q})
\end{aligned}$$

та

$$\begin{aligned}
\hbar\omega G^{xy}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle + iE_\alpha G^{yy}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) - iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{yy}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}),\\
\hbar\omega G^{yy}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= -iE_\alpha G^{xy}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) + iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{xy}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}),\\
\hbar\omega G^{xy}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= iE_B G^{yy}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) - iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{yy}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}),\\
\hbar\omega G^{yy}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= -iE_\beta G^{xy}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) + iJ(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{xy}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}).
\end{aligned}$$

Шуканою є функція Гріна

$$G^{+-}_\alpha(\mathbf{q}) = \langle\langle b_\alpha|b^+_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q} = G^{+x}_\alpha(\mathbf{q}) - iG^{+y}_\alpha(\mathbf{q}). \tag{3.2}$$

Врахуємо властивості спінових функцій Гріна

$$\begin{aligned}
G^{+x}_\alpha(\mathbf{q}) &= \langle\langle\sigma^+_\alpha|\sigma^x_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q} = \langle\langle\sigma^x_\alpha|\sigma^x_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q} + i\langle\langle\sigma^y_\alpha|\sigma^x_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q},\\
G^{+y}_\alpha(\mathbf{q}) &= \langle\langle\sigma^+_\alpha|\sigma^y_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q} = \langle\langle\sigma^x_\alpha|\sigma^y_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q} + i\langle\langle\sigma^y_\alpha|\sigma^y_\alpha\rangle\rangle_\mathbf{q};
\end{aligned}$$

тоді попарно додавши і віднявши наведені вище рівняння, отримуємо наступні, з яких видно, чому дорівнюють вихідні функції:

$$\begin{aligned}
(\hbar\omega - E_\alpha)G^{+x}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{+x}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= \frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle,\\
(\hbar\omega + E_\alpha)G^{-x}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) - J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{-x}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= -\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle,\\
(\hbar\omega - E_\beta)G^{+x}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{+x}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= 0,\\
(\hbar\omega + E_\beta)G^{-x}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) - J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{-x}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= 0
\end{aligned}$$

та

$$\begin{aligned}
(\hbar\omega - E_\alpha)G^{+y}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{+y}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle,\\
(\hbar\omega + E_\alpha)G^{-y}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) - J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\alpha\rangle G^{-y}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) &= i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle,\\
(\hbar\omega - E_\beta)G^{+y}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{+y}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= 0,\\
(\hbar\omega + E_\beta)G^{-y}_{\beta\alpha}(\mathbf{q}) - J(\mathbf{q})\langle\sigma^z_\beta\rangle G^{-y}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) &= 0.
\end{aligned}$$

В результаті маємо

$$\begin{aligned}
G^{\pm x}_{\alpha\alpha}(\omega,\mathbf{q}) &= \pm\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle\frac{\hbar\omega \mp E_\beta}{(\hbar\omega - E_\alpha)(\hbar\omega - E_\beta) - \langle\sigma^z_\alpha\rangle\langle\sigma^z_\beta\rangle J^2(\mathbf{q})},\\
G^{\pm y}_{\alpha\alpha}(\omega,\mathbf{q}) &= i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle\frac{\hbar\omega \mp E_\beta}{(\hbar\omega - E_\alpha)(\hbar\omega - E_\beta) - \langle\sigma^z_\alpha\rangle\langle\sigma^z_\beta\rangle J^2(\mathbf{q})}.
\end{aligned}$$

Остаточно з (3.2) для одночастинкових функцій Гріна отримуємо вирази:

$$G^{+-}_{\beta\alpha}(\omega,\mathbf{q}) = -\frac{\langle\sigma^z_\beta\rangle J(\mathbf{q})}{\hbar\omega - E_\beta}G^{+-}_{\alpha\alpha}(\omega,\mathbf{q}), \tag{3.3}$$

$$G^{+-}_{\alpha\alpha}(\omega,\mathbf{q}) = \frac{\hbar}{\pi}\langle\sigma^z_\alpha\rangle\frac{\hbar\omega - E_\beta}{(\hbar\omega - E_\alpha)(\hbar\omega - E_\beta) - \langle\sigma^z_\alpha\rangle\langle\sigma^z_\beta\rangle J^2(\mathbf{q})}. \tag{3.4}$$

У нормальній фазі спектр бозонних збуджень, визначений з (3.4), має вигляд (див. також [18])

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{q}) = \frac{h_A + h_B}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(h_A - h_B)^2 + 4\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle|J(\mathbf{q})|^2}, \qquad (3.5)$$

$$J(\mathbf{q}) = t\left(e^{iq_y a} + 2e^{-iq_y a}\cos\left(q_x\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)\right),\ J(0) = 3t.$$

У позначеннях $h = \frac{h_A+h_B}{2}$, $\delta = \frac{h_A-h_B}{2}$ вираз для спектру записується як

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{q}) = h \pm \sqrt{\delta^2 + \frac{1}{9}\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle J^2(0)|\gamma(\mathbf{q})|^2}. \qquad (3.6)$$

Фазова діаграма (T, h) в одиницях $J(0)$, що визначає області існування SF- та NO-фаз випливає з умови

$$h^2 - \delta^2 = \langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle J^2(0) \equiv \langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle 9t^2$$

і зображена на рисунку 4.

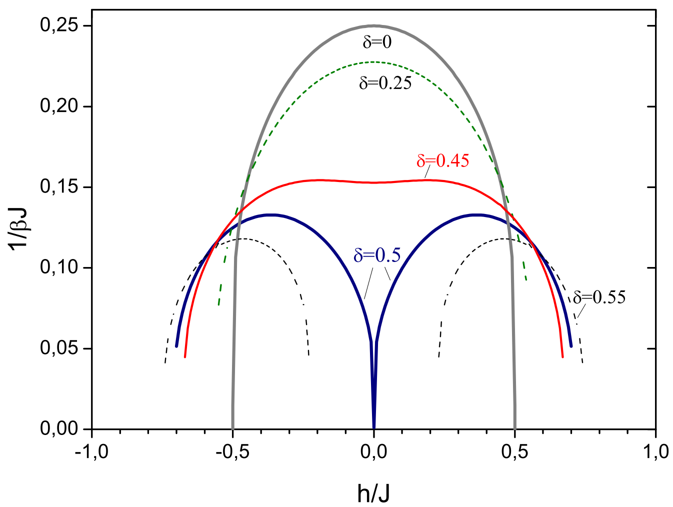

Рис. 4. Фазова діаграма на площині (T, h) при різних значеннях δ ($\delta = 0, 0.25, 0.45, 0.5, 0.55$) [18].

4. Спектр бозонних збуджень. Одночастинкова спектральна густина станів

Знайдемо спектральну густину бозонних збуджень для обидвох підґраток як уявну частину функції Гріна $\langle\langle b_\alpha|b_\alpha^+\rangle\rangle_{\mathbf{q}}$

$$\rho_\alpha(\omega) = -\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}} Im\langle\langle b_\alpha|b_\alpha^+\rangle\rangle_{\mathbf{q},\omega+i\varepsilon}.$$

Виходячи з (3.4), отримуємо

$$\rho_\alpha(\omega) = \frac{\langle\sigma_\alpha^z\rangle}{N}\sum_{\mathbf{q}}\Big(C_1(\mathbf{q})\delta(\omega - \frac{\varepsilon_1(\mathbf{q})}{\hbar}) + C_2(\mathbf{q})\delta(\omega - \frac{\varepsilon_2(\mathbf{q})}{\hbar})\Big), \qquad (4.1)$$

де коефіцієнти при δ-функціях

$$C_{1,2}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \pm \frac{\delta_\alpha}{2\sqrt{\delta^2 + \frac{1}{9}\langle\sigma_\alpha^z\rangle\langle\sigma_\beta^z\rangle J^2(0)|\gamma(\mathbf{q})|^2}},\ \alpha \neq \beta;$$

$$\delta_\alpha = \begin{cases} \delta, & \alpha = A; \\ -\delta, & \alpha = B; \end{cases}$$

$\varepsilon_1(\mathbf{q})$, $\varepsilon_2(\mathbf{q})$ - вітки спектру (3.6). Даний вираз для спектральної густини в NO формально співпадає з отриманим в [18] для випадку кубічної ґратки.

Залежність $\rho_\alpha(\omega, \mathbf{q})$ від хвильового вектора виражається через залежність $J(\mathbf{q})$ від $\mathbf{q}$. Підсумування за $\mathbf{q}$ відбувається у межах I-ї зони Брилюена Ω. Для розрахунку даної суми переходимо до інтегралу за змінною $x \equiv |\gamma_{\mathbf{q}}|^2$, вводячи функцію $\rho_0(x)$:

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\in\Omega}\Phi(|J(\mathbf{q})|^2) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\in\Omega}\Phi(t^2|\gamma_{\mathbf{q}}|^2) = \int dx\rho_0(x)\Phi(t^2x),$$

$$\rho_0(x) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\in\Omega}\delta(x - |\gamma_{\mathbf{q}}|^2).$$

За означенням перехід від суми по $\mathbf{q}$ до інтегралу в межах I-ї зони Брилюена Ω:

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\in\Omega}(...) = \frac{S}{(2\pi)^2N}\int_\Omega dq_x dq_y\,(...)\,,$$

де S - площа так званої основної області кристалу, N - число комірок. Відношення $\frac{S}{N}$ має зміст площі елементарної комірки у прямому

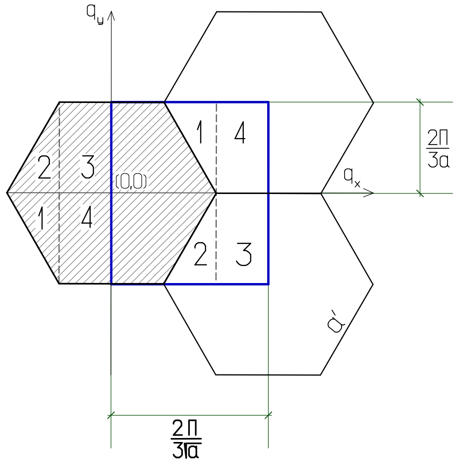

Рис. 5. I-а зона Брилюена Ω у оберненій ґратці (однаковими цифрами позначено трансляційно еквівалентні області)

просторі, утвореної базисними векторами $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a\sqrt{3}$, $\frac{S}{N} = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$. Розглянемо межі інтегрування по q_x і q_y. З рисунку 5 видно, що замість інтегрувати по заштрихованій області Ω, можна інтегрувати по виділеному прямокутнику. Оскільки, підінтегральна функція парна по q_x, q_y, то для суми по $\mathbf{q} \in \Omega$ маємо:

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}(...) = \frac{3\sqrt{3}a^2}{(2\pi)^2}\int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}} dq_x \int_0^{\frac{2\pi}{3a}} dq_y\,(...)\,.$$

У змінних $2\vartheta = \frac{\sqrt{3}}{2}q_x a, \varphi = \frac{3}{2}q_y a$:

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}(...) = \frac{2}{\pi^2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \int_0^{\pi} d\varphi(...).$$

Остаточно вираз для $\rho_0(x)$ у даному випадку набуває вигляду

$$\rho_0(x) = \frac{1}{\pi^2}\int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{\pi} d\varphi\delta(x - 1 - 4\cos 2\vartheta\cos\varphi - 4\cos^2 2\vartheta). \qquad (4.2)$$

Формула (4.2) прямо відповідає виразу для функції розподілу за квадратом енергії $g(\varepsilon^2)$ для невзаємодіючих частинок у ґратці зі структурою графену [19, 20], згідно з яким $\rho_0(x)$ можемо записати через повний еліптичний інтеграл I роду $F(\frac{\pi}{2}, m)$:

$$\rho_0(x) = \frac{1}{\pi^2}\frac{1}{\sqrt{Z_0}}F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}}\right), \qquad (4.3)$$

де

$$Z_0 = \begin{cases} (1+\sqrt{x}))^2 - \frac{1}{4}(x-1)^2, & x \leqslant 1, \\ 4\sqrt{x}, & 1 \leqslant x \leqslant 9; \end{cases}$$

$$Z_1 = \begin{cases} 4\sqrt{x}, & x \leqslant 1, \\ (1+\sqrt{x})^2 - \frac{1}{4}(x-1)^2, & 1 \leqslant x \leqslant 9. \end{cases}$$

Отриману функцію застосуємо для розрахунку спектральної густини:

$$\rho_\alpha(\omega) = \langle\sigma^z_\alpha\rangle \int dx\rho_0(x)\left(C_1(x)\delta\Big(\omega - \frac{\varepsilon_1(\mathbf{q})}{\hbar}\Big) + C_2(x)\delta\Big(\omega - \frac{\varepsilon_2(\mathbf{q})}{\hbar}\Big)\right),$$

де

$$C_{1,2}(x) = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\delta_\alpha}{\sqrt{\delta^2 + \langle\sigma^z_\alpha\rangle\langle\sigma^z_\beta\rangle t^2 x}}\right), \qquad \langle\sigma^z_\alpha\rangle = \frac{1}{2}\tanh\frac{\beta h_\alpha}{2}.$$

Використаємо для δ-функцій у виразі для $\rho_\alpha(\omega)$ представлення $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$, де x_i - корені рівняння $f(x) = 0$. Таким коренем для обидвох δ - функцій є $x_0 = \frac{(\hbar\omega - h)^2 - \delta^2}{<\sigma^z_\alpha><\sigma^z_\beta>t^2}$, причому перша з них дає ненульовий внесок при $\hbar\omega > h$, а друга - при $\hbar\omega < h$. Значення похідної $|f'(x_{1,2})| = \frac{t^2}{\hbar}|\frac{\langle\sigma^z_\alpha\rangle\langle\sigma^z_\beta\rangle}{2(\hbar\omega - h)}|$. Після деяких спрощень маємо

$$\rho_\alpha(\hbar\omega) = \frac{\rho_\alpha(\omega)}{\hbar} = \frac{\langle\sigma^z_\alpha\rangle}{t^2}\Big(\rho^{(}_\alpha 1)(\omega) + \rho^{(}_\alpha 2)(\omega)\Big); \qquad (4.4)$$

тут запроваджено спектральну густину $\rho_\alpha(\hbar\omega)$, розраховану на одиничний інтервал енергії;

$$\rho^{(1,2)}_\alpha(\omega) = \rho_0(x_0)\left|\frac{\hbar\omega - h}{\langle\sigma^z_\alpha\rangle\langle\sigma^z_\beta\rangle}\right|\frac{\hbar\omega - h + \delta_\alpha}{\hbar\omega - h},\ \alpha, \beta = A, B,\ \alpha \neq \beta, \quad (4.5)$$

причому $\rho^{(1)}_\alpha(\omega)$ стосується області $\hbar\omega > h$, а $\rho^{(2)}_\alpha(\omega)$ - області $\hbar\omega < h$.

Розглянемо межі, в яких змінюються енергії $\varepsilon_1(x)$ і $\varepsilon_2(x)$ зонного спектру бозонів в області значень аргумента $0 \leqslant x \leqslant 9$. Для визначеності візьмемо $\delta > 0$. Можливі такі випадки:

1) $\langle\sigma^z_A\rangle\langle\sigma^z_B\rangle > 0$.

Ця нерівність виконується, якщо $h_A > 0, h_B > 0\,(h > 0)$ або $h_A < 0,\, h_B < 0\,(h < 0)$ $(h_A = h+\delta,\, h_B = h-\delta)$. Спектральна густина $\rho_\alpha(\hbar\omega)$ відмінна від нуля, якщо

$$h - \sqrt{\delta^2 + 9\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle t^2} \leqslant \hbar\omega \leqslant h - \delta.$$

та

$$h + \delta \leqslant \hbar\omega \leqslant h + \sqrt{\delta^2 + 9\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle t^2}.$$

Межі зон даються максимальним і мінімальним значенням енергій $\varepsilon_2(x)$ і $\varepsilon_1(x)$, відповідно. При цьому

$$\begin{aligned} \min\varepsilon_1 &= \varepsilon_1(x=0) \equiv h+\delta, \\ \max\varepsilon_2 &= \varepsilon_2(x=0) \equiv h-\delta. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Дані значення енергій визначають щілину в спектрі (ширина щілини $\Delta\varepsilon = 2\delta$). Система є в нормальній фазі, якщо для додатних енергій h_A і h_B хімічний потенціал μ розташований під нижнім краєм зони $\varepsilon_2(x)$, а для від'ємних енергій - над верхнім краєм зони $\varepsilon_1(x)$. Повинні виконуватись умови

$$\min\varepsilon_2 = \varepsilon_2(x=9) \equiv h - \sqrt{\delta^2 + 9\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle t^2} > 0$$

у першому із цих випадків та

$$\max\varepsilon_1 = \varepsilon_1(x=9) \equiv h + \sqrt{\delta^2 + 9\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle t^2} < 0$$

- у другому (у нашій моделі енергія бозонів завжди відраховується від рівня хімічного потенціалу).

2) $\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle < 0$.

При $\delta > 0$ така нерівність має місце, коли $h_A > 0,\, h_B < 0$ $(h > 0$ або $h < 0)$. Межі зон визначаються тепер нерівностями

$$h - \delta \leqslant \hbar\omega \leqslant h - \sqrt{\delta^2 - 9|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle| t^2}$$

та

$$h + \sqrt{\delta^2 - 9|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle| t^2} \leqslant \hbar\omega \leqslant h + \delta.$$

Щілина в спектрі є обмежена значеннями енергії

$$\begin{aligned} \min\varepsilon_1 &= \varepsilon_1(x=9) = h + \sqrt{\delta^2 - 9|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle| t^2} > 0, \\ \max\varepsilon_2 &= \varepsilon_2(x=9) = h - \sqrt{\delta^2 - 9|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle| t^2} < 0 \end{aligned} \tag{4.7}$$

і ширина щілини складає $\Delta\varepsilon = 2\sqrt{\delta^2 - 9|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle| t^2}$. Хімічний потенціал перебуває у щілині при виконанні вказаних нерівностей. Сама ж щілина тут зникає при $\delta = \pm 3t\sqrt{|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle|}$.

Поведінка функцій $\rho_\alpha(\hbar\omega)$ на краях зон визначається функцією розподілу $\rho_0(x_0)$, де аргумент x_0 змінюється з частотою, так і усім множником, що є біля $\rho_0(x_0)$ у формулі (4.5). При наближенні до країв зон, у тому числі при $x_0 \to 0$ (що відповідає граничному переходу $\hbar\omega \to h\pm\delta$) функція $\rho_0(x_0)$ прямує до скінченного значення, яке дорівнює $\frac{1}{\pi\sqrt{3}}$. Це випливає з формули (14), оскільки у цій границі $Z_1(X_0)/Z_0(X_0) \to 0$, $\sqrt{Z_0(x_0)} \to \frac{\sqrt{3}}{2}$, $F(\pi/2, 0) = \frac{\pi}{2}$.

З другого боку,

$$\hbar\omega - h + \delta_\alpha \to \begin{cases} 1, & \hbar\omega \to h + \delta_\alpha, \\ 0, & \hbar\omega \to h - \delta_\alpha; \end{cases}$$

і тому

$$\begin{aligned} \rho_A(\hbar\omega) &\to \begin{cases} \frac{2}{t^2}\frac{\delta}{|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle|}\langle\sigma_A^z\rangle\frac{1}{\pi\sqrt{3}}, & \hbar\omega \to h+\delta, \\ 0, & \hbar\omega \to h-\delta; \end{cases} \\ \rho_B(\hbar\omega) &\to \begin{cases} 0, & \hbar\omega \to h+\delta, \\ \frac{2}{t^2}\frac{\delta}{|\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle|}\langle\sigma_B^z\rangle\frac{1}{\pi\sqrt{3}}, & \hbar\omega \to h-\delta. \end{cases} \end{aligned} \tag{4.8}$$

Розкладаючи у ряди функції $Z_0(x), Z_1(x), F(\pi/2, m)$ при малих значеннях аргумента, можна переконатись, що при невеликих відхиленнях від точок, де $\rho_{A,B} = 0$, ці функції наростають зі зміною частоти за лінійним законом. У всіх інших випадках функції $\rho_A(\hbar\omega)$ і $\rho_B(\hbar\omega)$ на краях зон стають рівними нулю стрибкоподібно.

Числові розрахунки, проведені за формулою (4.5) при врахуванні виразів (2.6) для середніх $\langle\sigma_A^z\rangle, \langle\sigma_B^z\rangle$, підтверджують таку топологію спектральних густин. Зокрема, у вище згаданому випадку 1), коли хімічний потенціал перебуває під або над обома зонами, спектральна густина з одного боку щілини має стрибок, а з другого - наростає плавно. Якщо хімічний потенціал є в щілині, то спектральна густина має стрибки з обох боків. Загальною і відомою для моделі Бозе-Хаббарда властивістю є те, що в області $\hbar\omega < 0$ (нижче рівня хімічного потенціалу) спектральні густини ρ_A і ρ_B від'ємні, а в області $\hbar\omega > 0$ (вище рівня μ) вони є додатними.

Для гексагональної ґратки типу графену у випадку, коли глибини потенціальних ям однакові $(\varepsilon_A = \varepsilon_B)$, маємо безщілинний спектр $(\Delta\varepsilon = 0)$ бозонних збуджень. На рисунку 6 (a),(b) - зображено зміну ширини енергетичної зони у спектрі із зміною температури: в міру

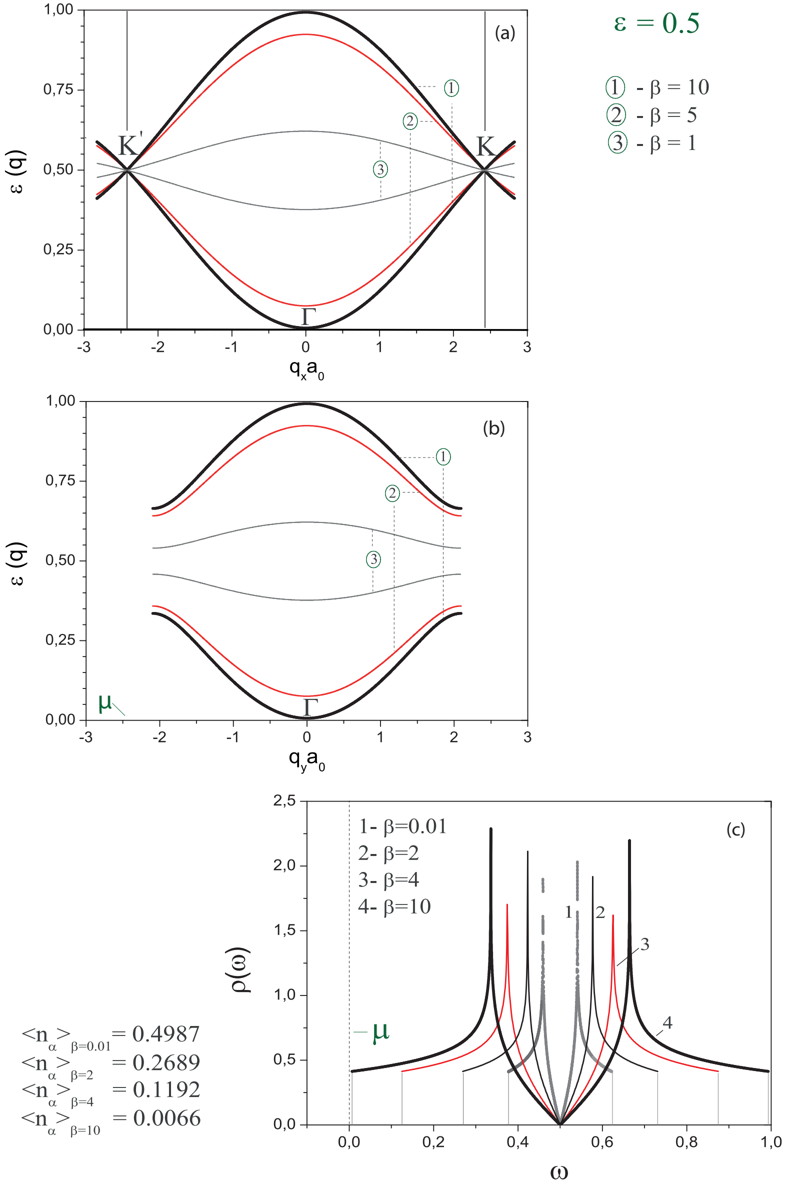

Рис. 6. Закон дисперсії бозонних збуджень в гексагональній ґратці (a), (b) та частотна залежність одночастинкової спектральної густини станів $\rho(\omega)$ (c) у випадку $\delta = 0$; ($\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{2} - \langle \sigma_\alpha^z \rangle$).

пониження температури ширина зони збільшується і досягає максимуму при температурі фазового переходу у стан із бозе конденсатом. Дві вітки спектру дотикаються у кутах зони Брилюена в точках Дірака K', K.

Закон дисперсії бозонних збуджень для іншого перерізу енергетичної поверхні спектру вздовж осі q_y в межах I-ї зони Брилюена (компонента $q_x = 0$) зображено на рисунку 6(b). Тут дві вітки спектру розходяться на краю зони Брилюена. Для даного випадку $\delta = 0$ ($\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0.5$) отримано одночастинкову спектральну густину (рис. 6 (c)) для деяких температур. В околі точок Дірака енергетичний спектр (рис. 6 (a)) змінюється за лінійним законом.

У випадку різних глибин потенціальних ям ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_B$) на краю зони Брилюена виникає згадана вище щілина, ширина якої визначається різницею одновузлових енергій. На рисунку 7(a) зображено енергетичний спектр бозонних збуджень при оберненій температурі $\beta = 5$. Тут розглянуто невелику різницю одновузлових енергій δ=0.005, 0.05, 0.2 ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_B > 0$). Величина щілини $\Delta\varepsilon$ у спектрі дорівнює 2δ ($\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle > 0$), а її межами є $\hbar\omega_{1,2} = h \pm \delta$. Для спектру бозонних збуджень, розміщеного над рівнем хімічного потенціалу μ, отримуємо додатні значення спектральних густин, а у випадку, коли зони розташовані під рівнем μ спектральні густини від'ємні (рис. 6 (c), 7 (b)). Крайні значення частот, які обмежують область, де $\rho_\alpha(\hbar\omega) \neq 0$, дорівнюють $\hbar\omega_{3,4} = h \pm \sqrt{\delta^2 + \langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle J^2(0)}$.

У випадку, коли рівень хімічного потенціалу заходить між зони (див. рис. 8 (a) при тій же температурі $\beta = 5$), отримуємо суттєво іншу поведінку енергетичного спектру бозонних збуджень. Екстремуми віток спектру при $\mathbf{q} = 0$ звернені у напрямку рівня хімічного потенціалу μ. Від'ємні значення одночастинкової спектральної густини ($\rho(\hbar\omega) < 0$) відповідають нижній зоні, розміщеній під рівнем хімічного потенціалу μ, а додатні - верхній зоні (рис. 8 (b)).

З фазової діаграми (T, h) (рис. 4) у точці фазового переходу між NO і SF-фазами, де відбувається розділення на дві області SF-фази, отримуємо критичне значення щілини у спектрі бозонних збуджень $\Delta(kT_c) = 2\delta_c = 1$ в одиницях $J(0)$. На рисунку 9(a) для $\delta = 0.5$, проілюстровано поведінку енергетичного спектру бозонних збуджень у випадку, коли рівень хімічного потенціалу лежить у центрі зони, і зображено вигляд спектру при різних температурах. При температурі $\beta = 100$ дві вітки спектру практично дотикаються у центрі зони при ($\mathbf{q} = 0$); це відповідає точці фазового переходу ($NO \to SF$) для $\delta = 0.5$, $\beta_c \to \infty$. Середнє число заповнення бозе частинкою вузла підґратки A $\langle n_A \rangle = 0$, в той час як для підґратки B $\langle n_B \rangle = 1$. Також

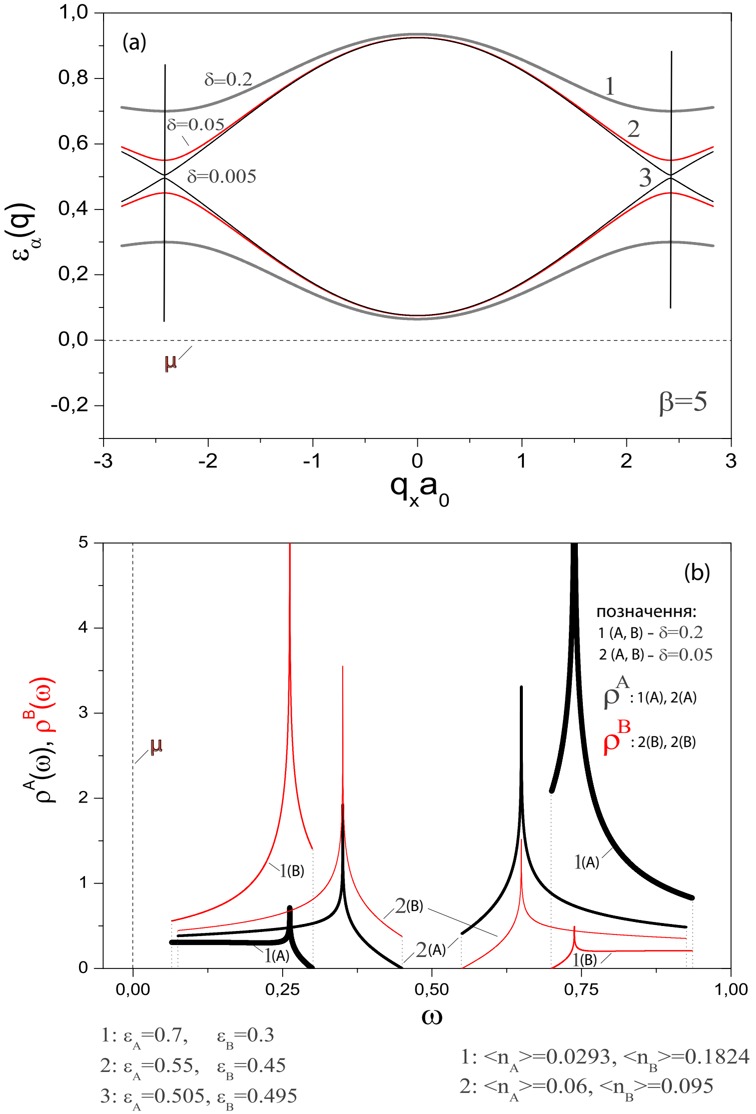

Рис. 7. Закон дисперсії $\varepsilon(\mathbf{q})$ для NO-фази для деяких значень δ при $\beta = 5$ (a). Рівень хімічного потенціалу ($\mu = 0$) розміщений нижче зонного спектру (пунктирна лінія). Частотна залежність одночастинкової спектральної густини для підґраток A, B наведена для значень $\delta = 0.2, 0.05$ при $\beta = 5$ (b).

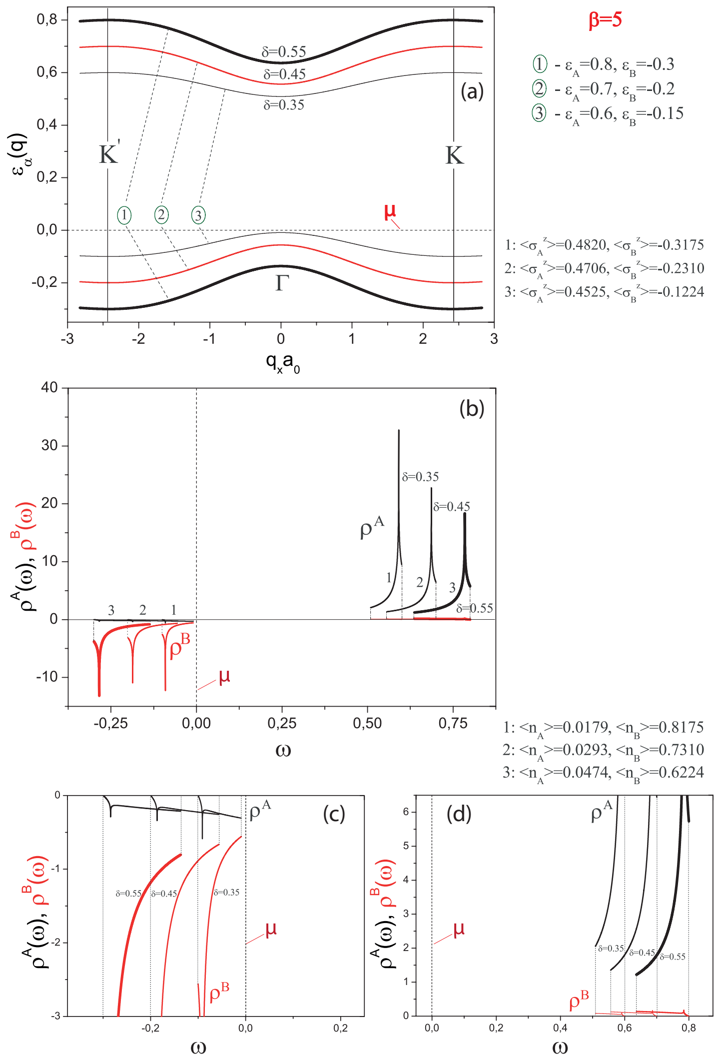

Рис. 8. Закон дисперсії для NO-фази при різних значеннях δ (a) та одночастинкові спектральні густини станів (b), (c), (d) для значень $\varepsilon_A, \varepsilon_B$, вказаних на рисунках. Рисунки (c), (d) подано для кращої ілюстрації частотної залежності спектральної густини станів: (c) - $\rho(\omega) < 0$; (d) - $\rho(\omega) > 0$. Пунктирна лінія вказує розташування рівня хімічного потенціалу ($\mu = 0$).

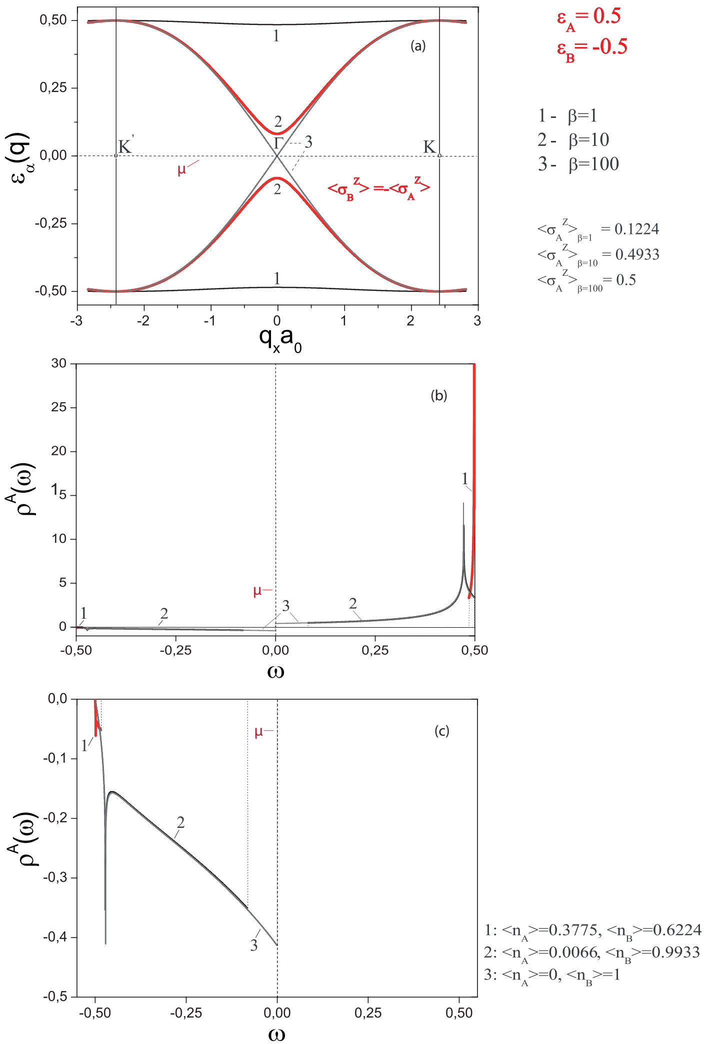

Рис. 9. Закон дисперсії $\varepsilon(\mathbf{q})$ для NO-фази ($\delta = 0.5$), для різних температур (значення критичної температури $kT_c = 0$) на рисунку (a); одночастинкова спектральна густина станів $\rho_A(\omega)$ для підґратки А зображена на рисунках (b), (c). Нижній рисунок для спектральної густини станів (c) подано для кращої ілюстрації частотної залежності $\rho_A(\omega) < 0$ в (b). Рівень хімічного потенціалу розміщений у середині енергетичної щілини.

показано, який вигляд має одночастинкова спектральна густина станів на вузлі А для значень $\beta = 1, 10$ і близько критичної точки при $\beta = 100\,(kT_c \simeq 0)$), (рис. 9 (b).

Характер перебудови частотної залежності одночастинкової спектральної густини станів щодо розташування рівня хімічного потенціалу якісно узгоджується із результатами розрахунків методом точної діагоналізації моделі для одновимірного ланцюжка, де розглядалися перестрибування частинки на сусідній вузол [17] і отримувалися від'ємні значення одночастинкових спектральних густин для енергій, розташованих нижче рівня хімічного потенціалу.

5. Висновки

На основі моделі жорстких бозонів розраховано енергетичний спектр бозонних збуджень та одночастинкові спектральні густини для плоскої гексагональної ґратки типу графену.

Розглянуто особливості форми зонного спектру та спектральної густини у нормальній фазі (NO) в залежності від розташування рівня хімічного потенціалу, різниці між локальними енергіями частинок у підґратках та температури.

Проаналізовано умови появи щілини у зонному спектрі. Отримано, що у випадку жорстких бозонів, коли частинки описуються статистикою Паулі, виникає температурно залежна щілина (на відміну від електронів у ґратках типу графену).

Щілина у спектрі існує:

- на краю зони Брілюена (рівень хімічного потенціалу розташований нижче (вище) енергетичних зон), $\Delta\varepsilon = 2\delta$;
- при $\mathbf{q} = 0$ (рівень хімічного потенціалу розташований між енергетичними зонами), $\Delta\varepsilon = 2\sqrt{\delta^2 - |\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle| J^2(0)}$.

У першому із цих випадків щілина зникає при $\delta = 0$; як наслідок, з'являються діраківські точки з лінійним законом дисперсії в точках K, K' зони Брилюена.

У другому випадку щілина стає відсутньою при $kT = 0$, $h = 0$ і $\delta = \frac{1}{2}J(0)$ ($\delta = \frac{1}{2}$ в одиницях $J(0)$). Тут також з'являється лінійний спектр діраківського вигляду ($\varepsilon_{\mathbf{q}} \sim \frac{J(0)}{2\sqrt{2}} aq$).

Вигляд спектральних густин задовольняє загальні критерії; вони від'ємні в області $\mu < 0$ і додатні при $\mu > 0$. Існує дзеркальна симетрія між кривими для ρ_A і ρ_B. Специфіка гексагональної структури ґратки проявляється в наявності логарифмічних сингулярностей у кривих $\rho_\alpha(\hbar\omega)$ для кожної із зон, та у стрибкоподібному обертанні в нуль на краях спектру (за винятком точок $\hbar\omega = h - \delta_\alpha$, де густина прямує до нуля за лінійним законом).

Література

1. P. Soltau-Panahi, J. Struck, A. Bick, W. Plenkers, G. Meineke, C. Becker, P. Windpassinger, K. Sengstock, P. Hauke, M. Lewenstein//arXiv: 1005.1276v1 (cond-mat. quant-gas) 7 May 2010.
2. D.-S. Lühmann//Phys. Rev. A **87**, 043619 (2013).
3. Q.-Q. Lu, J.-M. Hou//Commun. Theor. Phys. **53**, 861 (2010).
4. P. Soltau-Panahi, D.-S. Lühmann, J. Struck, P. Windpassinger, K. Sengstock// arXiv: 1104.3456v1 (cond-mat. quant-gas) 18 Apr 2011.
5. E. Albus, X. Fernandez-Gonzalvo, J. Mur-Petit, J. J. Garcia-Ripoli, J. K. Pachos// arXiv: 1107.3673 (cond-mat. quant-gas) 27 Feb 2013.
6. Z. Chen, B. Wu//arXiv: 1104.3625v2 (cond-mat. quant-gas) 7 Jul 2011.
7. S. Koghee, L.-K. Lim, M. O. Goerbig, C. Morais-Smith// arXiv: 1111.2210v2 (cond-mat. quant-gas) 31 Jun 2012.
8. C. N. Varney, K. Sun, V. Galitski, M. Rigol//New Journ. Phys. **14**, 115028 (2012).
9. T. Matsubara, H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. **16**, 569 (1956); ibid. **17**, 19 (1957).
10. G. A. Czathy, J. D. Reppy, M. H. W. Chan//Phys. Rev. Lett. **91**, 235301 (2003).
11. S. Robashkiewicz, R. Micnas, K. A. Chao//Phys. Rev. B **23**, 1447 (1981); ibid. 24, 1579 (1981).
12. G. D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 780 (1976).
13. M. J. Puska, R. M. Niemenen//Surf. Sci. **157**, 413 (1985).
14. W. Brenig//Surf. Sci. **291**, 207 (1993).
15. I. V. Stasyuk, I. R. Dulepa//Condens. Matter Phys. **10**, 259 (2007).
16. І. В. Стасюк, І. Р. Дулепа, Журн. фіз. досл. **13**, 2701 (2009).
17. I. V. Stasyuk, O. Vorobyov, R. Ya. Stetsiv//Ferroelectrics, **426**, 6 (2012).
18. I. V. Stasyuk, O. Vorobyov//Condens. Matter Phys. **16**, 23005 (2013).
19. H. B. Roseustock//J. Chem. Phys. **16**, 2064 (1953).
20. J. P. Hobson, W. A. Nierenberg//Phys. Rev. **89**, 662 (1953).

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua http://www.icmp.lviv.ua