

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

КРАСНОВ Володимир Олександрович



УДК 538.9, 538.915, 544.225.23, 535.33

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

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Львів — 2017

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України, м. Львів.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор,  
член-кореспондент НАН України,  
**Стасюк Ігор Васильович**  
Інститут фізики конденсованих систем  
Національної академії наук України (м. Львів),  
головний науковий співробітник  
відділу квантової статистики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор,  
**Вільчинський Станіслав Йосипович**  
Київський національний університет  
імені Тараса Шевченка,  
завідувач кафедри квантової теорії поля,  
фізичний факультет

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Ваврух Маркіян Васильович**  
Львівський національний університет  
імені Івана Франка,  
професор кафедри астрофізики, фізичний факультет

Захист відбудеться 27 грудня 2017 року о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:

79011 Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:

79026 Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат дисертації розісланий 27 листопада 2017 року.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,  
доктор фіз.-мат. наук



Швайка А. М.

### 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 (квазічастинок), які описуються різною статистикою - Бозе, Фермі, або змішаною (типу статистики Паулі, де при теоретичному описі 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 [M. Greiner et al.// Nature, 2002, **415**, 39] у системі  $^{87}\text{Rb}$  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 ( $^{87}\text{Rb}$ ) та фермі ( $^{40}\text{K}$ ) 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) [A. Albus, F. Illuminati, J. Eisert// Phys. Rev. A, 2003, **68**, 023606], а у випадку жорстких бозонів – псевдоспін-ферміонної та псевдоспін-електронної моделі [K.A. Müller// Z.Phys. B - Condensed Matter, 1990, **80**] (останню можна розглядати як граничний випадок моделі БФХ). ПЕМ є однією з тих, що активно використовується в фізиці сильнокорельованих електронних систем. Початково вона була запропонована до опису високотемпературних надпровідників і дозволила розглянути роль ангармонічної підсистеми іонів кисню у появі неоднорідних станів та явищі бістабільності [I.V Stasyuk// In: Highlights in condensed matter physics, AIP Conference Proceedings, 2003. **695**. 281]. Псевдоспінове представлення також використовується для опису іонних провідників та інтеграції

іонів в кристалах [G.D. Mahan// Phys. Rev. B, 1976, **14**, 780]. На базі згаданих моделей найбільш повно вивчені фазові переходи між різними (однорідними, модульованими і т.п.) 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. Заслугове 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 [R.M. Lutchyn, S. Tewari, S. Das Sarma// Phys. Rev. A, 2009, **79**, 011606]. 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 держреєстрації 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 і 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 дина-

мічного середнього поля (ДСП), 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 бозеконденсації) в режимі заданих хімічних потенціалів частинок, а також особливостей ферміонного спектру в таких системах у різних квантових станах, у тому числі у надплинній 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.
- Вивчення 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 фазових діаграм 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.
- Дослідження електронного енергетичного спектру моделі БФХ у границі сильної хаббардівської кореляції в наближенні жорстких бозонів та аналіз умов появи додаткових підзон в ферміонному спектрі за наявності бозеконденсату.

### **Наукова новизна одержаних результатів.**

1. Вперше в рамках схеми ДСП показано, що взаємодія з локально ангармонічними модами коливальних 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 показа-

но, 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  $(T, \mu)$  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  $\mu$  та  $\mu'$ ; при заданих концентраціях частинок виникатиме при цьому фазове розшарування. При ненульових температурах можуть існувати “ре-ентрант” 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 з більшою 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 діаграм моделі БФХ може бути безпосередньо перенесена на випадок притягаль-

ної одноузлової 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 результатів експериментального 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); 9-th ISSFIT International symposium on systems with fast ionic transport,( Ruga, Latvia 1-5 June 2010); 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 [1-8] та восьми тезах доповідей на конференціях [9-16].

**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.

### Основний зміст роботи

У першому розділі наведено приклади ґраткових бозон-ферміонних систем із сильними кореляціями, обговорено ряд явищ, що спостерігаються в таких системах та розглянуто методи та моделі, котрі використовуються для їх опису.

**Другий** розділ присвячено дослідженню електронного енергетичного спектру псевдоспін-електронної моделі у наближенні сплаву в рамках теорії динамічного середнього поля. Розглянуто випадок двох близьких електронних підзон хаббардівського типу, які визначають положення хімічного потенціалу при заданому наборі параметрів моделі. Особливо проаналізовано випадок нескінченного відштовхування електронів на вузлі (чотиристанова модель).

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі записано у вигляді:

$$H = \sum_i (U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + E_0 (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) + g (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) S_i^z - \Omega S_i^x - h S_i^z) + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \quad (1)$$

де  $\Omega$  - це тунельне розщеплення,  $g$  - константа псевдоспін-електронної взаємодії та  $h$  - поле асиметрії локального ангармонічного потенціалу, а доданок з  $t_{ij}$  описує електронне перенесення між вузлами ґратки. З метою непертурбативного врахування одновузлових кореляцій використано процедуру, запропоновану в [А.М. Shvaika, I.V. Stasyuk// Acta Phys. Polon. A, 1993, **84**, 293]. Запроваджено базис одновузлових станів  $\{|R\rangle = |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}; S_i^z = 1/2\rangle; |\tilde{R}\rangle = |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}; S_i^z = -1/2\rangle\}$ , де  $|1\rangle = |0, 0; 1/2\rangle$ ,  $|2\rangle = |1, 1; 1/2\rangle$ ,  $|3\rangle = |0, 1; 1/2\rangle$ ,  $|4\rangle = |1, 0; 1/2\rangle$  і т.п., та шляхом перетворення  $\{|R\rangle; |\tilde{R}\rangle\} \rightarrow \{|r\rangle; |\tilde{r}\rangle\}$  типу повороту приведено до діагональної форми одновузлову частину  $\hat{H}_i$  оператора (1), яка трактується як гамільтоніан нульового наближення. Здійснено перехід до операторів Хаббарда, які діють на базисі  $\{|r\rangle; |\tilde{r}\rangle\}$ ; при цьому  $c_{i,\sigma} = \sum_{m,n} A_{mn}^\sigma X_i^{mn}$ .

Розрахунок електронного спектру ПЕМ проведено за допомогою функцій Гріна в рамках підходу динамічного середнього поля. Розглянуто випадок ґратки Бете з незбуреною густиною станів  $\rho_0(t) = (2/\pi W^2) \sqrt{W^2 - t^2}$ . Ефективну одновузлову задачу, яка складає основу цього підходу і встановлює функціональну залежність  $G_\sigma^{(a)}(\omega) = f([J_\sigma(\omega)])$  між одновузловою електронною функцією Гріна  $G_\sigma^{(a)}(\omega)$  і когерентним потенціалом  $J_\sigma(\omega)$ , розв'язано в дисертації у наближенні сплаву. Використовуючи, що для ґратки Бете  $J_\sigma(\omega) = (W^2/4)G_\sigma(\omega)$  [D. Vollhardt, W. Metzner// Phys. Rev. Lett., 1989, **62**, 260], отримано рівняння, з якого знайдено когерентний потенціал і електронну функцію Гріна  $G_k^\sigma(\omega) = \left[ J_\sigma(\omega) + \left( G_\sigma^{(a)}(\omega) \right)^{-1} - t_k \right]^{-1}$ .

Для розв'язання одновузлової задачі для ПЕМ застосовано два способи. Перший з них, використаний в п.2.2., ґрунтується на наближеній аналітичній схемі, розвиненій в [I.V. Stasyuk// Condens. Matter Phys., 2000, **3**, 437] для моделі Хаббарда. В рамках такого підходу, у основі якого є проектування у рівняннях руху на підпростір фермі-операторів  $X_i^{pq}$  та техніка різночасових розщеплень, в п.2.2 досліджено особливості електронного зонного спектру ПЕМ, пов'язані з по-



явою енергетичної щілини та переходом метал-діелектрик. Розглянуто ділянку спектру, утворену близькими підзонами, що формуються електронними переходами ( $\tilde{1}\tilde{4}$ ) і ( $\tilde{3}\tilde{2}$ ). Це реалізується при  $h < 0$  та при електронному заповненні, близькому до половинного. Вираз для одновузлової функції Гріна зводиться у цьому випадку до такого

$$G_{\uparrow}^{(a)} = \frac{\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} + X^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle \cos^2 \varphi_{41}}{\omega - \varepsilon_{\tilde{4}\tilde{1}} - J_{\uparrow} \cos^2 \varphi_{41}} + \frac{\langle X^{\tilde{3}\tilde{3}} + X^{\tilde{2}\tilde{2}} \rangle \cos^2 \varphi_{32}}{\omega - \varepsilon_{\tilde{2}\tilde{3}} - J_{\uparrow} \cos^2 \varphi_{32}}; \quad (2)$$

тут  $\varepsilon_{\tilde{4}\tilde{1}} = \varepsilon_{\tilde{4}} - \varepsilon_{\tilde{1}} = E_0 - \frac{1}{2}\sqrt{(g-h)^2 + \Omega^2} + \frac{1}{2}\sqrt{h^2 + \Omega^2}$ ;  $\varepsilon_{\tilde{2}\tilde{3}} = \varepsilon_{\tilde{2}} - \varepsilon_{\tilde{3}} = E_0 + U - \frac{1}{2}\sqrt{(2g-h)^2 + \Omega^2} + \frac{1}{2}\sqrt{(g-h)^2 + \Omega^2}$ ; кути  $\varphi_{41}$  і  $\varphi_{32}$  є параметрами перетворення до базису  $\{|r\rangle; |\tilde{r}\rangle\}$ . Середні  $\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} + X^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle \cong 1 - \frac{n}{2}$  і т.п. розраховані за допомогою спектральної теореми для відповідних функцій Гріна. Рівняння для  $J_{\sigma}(\omega)$ , яке випливає із співвідношення  $J_{\uparrow} = \frac{W^2}{4} G_{\uparrow}^{(a)}$ , розв'язано числовим методом для різних значень параметрів моделі. Виходячи з умови  $\text{Im}J_q(\omega - i0^+) \rightarrow 0$ , яка відповідає зануленню повної густини електронних станів  $\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im}G_{\uparrow}(\omega - i0^+)$ , встановлено межі енергетичних зон. Досліджено можливість існування двох розділених підзон чи об'єднання їх в одну (коли щілина в спектрі зникає), що залежить від значень параметрів моделі.

Критичне значення параметра взаємодії на вузлі  $U_{\text{eff}}$ , при якому густина станів  $\rho(\omega)$  змінює свою топологію (щілина існує при  $U > U_{\text{eff}}$ ), залежить від поля  $h$  та параметра  $\Omega$  (показано на рис. 1). Умова відкриття щілини визначається також ступенем локальної ангармонічності; щілина існує лише при частотах  $\Omega$  менших за критичну, що відповідає більшій висоті бар'єра у подвійних потенціальних ямах.

Другий спосіб розрахунку одновузлової функції Гріна  $G_{\sigma}^{(a)}$ , який запропонований в п. 2.3, пов'язаний з використанням теорії збурень у мацубарівському представленні та запровадженням допоміжного фермі-поля  $\xi$  із взаємодією  $V(c^+\xi + \xi^+c)$ , для якого  $V^2 \langle T \xi_{\sigma}^+ \xi_{\sigma} \rangle = J_{\sigma}$ . Тут, при розкладах за степенями  $V$  усереднення проводиться з використанням модифікованої форми теореми Віка для  $X$ -операторів [П.М. Слободян, І.В. Стасюк // ТМФ, 1974, **19**, 423], що відповідає наближенню сплаву. Застосування такої схеми у випадку нескінченного одновузлового відштовхування електронів, коли виключаються стани  $|2\rangle$  і  $|\tilde{2}\rangle$ , приводить до наступного рівняння для когерентного

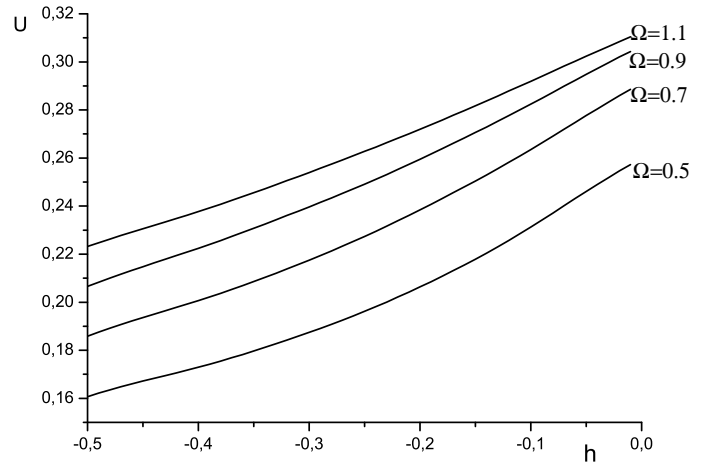


Рис. 1: Залежність критичного значення кулонівського потенціалу  $U_{\text{eff}}$  від поля  $h$  при різних значеннях  $\Omega$  ( $n = 1.0, g = 1.0, W = 0.1$ )

Тут, при розкладах за степенями  $V$  усереднення проводиться з використанням модифікованої форми теореми Віка для  $X$ -операторів [П.М. Слободян, І.В. Стасюк // ТМФ, 1974, **19**, 423], що відповідає наближенню сплаву. Застосування такої схеми у випадку нескінченного одновузлового відштовхування електронів, коли виключаються стани  $|2\rangle$  і  $|\tilde{2}\rangle$ , приводить до наступного рівняння для когерентного

потенціалу

$$J_{\sigma}(\omega_n) = \frac{W^2 \sum_r \frac{g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)}{1+g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)J_{\sigma}(\omega_n)} \langle X^{rr} \rangle_0 e^{Q_r}}{4 \sum_p e^{Q_p} \langle X^{pp} \rangle_0} \quad (3)$$

де  $\sigma = \uparrow$  чи  $\downarrow$ ;  $Q_r = \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} \ln(1 + g_{0\sigma}^{(r)}(\omega_n)J_{\sigma}(\omega_n))$ ;  $g_{0\uparrow}^{(r)} = g_0^{pq} \cos^2 \varphi_{41} + g_0^{mn} \sin^2 \varphi_{41}$ , причому  $(pq, mn)$  дорівнює:  $(14, \tilde{14}), r = 1$ ;  $(\tilde{14}, \tilde{14}), r = \tilde{1}$ ;  $(14, \tilde{14}), r = 4$ ;  $(\tilde{14}, \tilde{14}), r = \tilde{4}$ ;  $g_0^{qp}(\omega_n) = -(i\omega_n - \varepsilon_{pq})^{-1}$ .

Електронний спектр у даному випадку складається з чотирьох зон, які формуються переходами (41), (4 $\tilde{1}$ ), ( $\tilde{4}$ 1) і ( $\tilde{4}\tilde{1}$ ). Має місце значна перебудова спектру при зміні параметрів  $\Omega$  і  $h$  та константи зв'язку  $g$ . У порівнянні з незбуреним спектром, який при  $g = 0$  складається з однієї зони, відбувається розщеплення і з'являються заборонені щілини. Для малих значень  $\Omega$  і  $h$  щілина виникає при  $g \approx W$ ; цей результат відповідає отриманому в [А.М. Shvaika, I.V. Stasyuk // Journ. Phys. Studies, 1999, **2**, 177] для ПЕМ без тунельного розщеплення. При збільшенні  $\Omega$  можуть виникати додаткові щілини; існують два критичні значення  $\Omega$ , при яких відбувається злиття або поява нових зон. При зміні  $h$  найбільш суттєва перебудова спектру відбувається в області  $h = g/2$ .

**Третій** розділ дисертації присвячено застосуванню ПЕМ до опису термодинаміки іонної інтеркаляції у кристалах. Модель доповнено шляхом врахування перенесення інтеркальованих іонів між їх рівноважними позиціями в кристалі. Досліджено вплив взаємодії іонів з електронами провідності на рівноважні стани підсистеми інтеркалянта; в рамках наближення середнього поля (НСП) побудовано відповідні фазові діаграми.

Розгляд ґрунтується на гамільтоніані, який є узагальненим гамільтоніаном ПЕМ:

$$H = \sum_{ij} \Omega_{ij} S_i^+ S_j^- + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (g S_i^z n_{i\sigma} - \mu n_{i\sigma}) - \sum_i h S_i^z. \quad (4)$$

Тут  $S_i^z = 1/2$ , коли є інтеркальований іон на вузлі  $i$  та  $S_i^z = -1/2$ , коли немає іона;  $c_{i\sigma}^+$  та  $c_{i\sigma}$  – оператори народження та знищення електрона у стані Ваньє на атомі “господаря” у комірці  $i$ . Враховано перенесення іонів та електронів між вузлами ґратки (перший та другий доданки в (4)) та взаємодію електронів з домішковими іонами (параметр взаємодії  $g$ );  $\mu$  та  $h$  – хімічні потенціали електронів та іонів, відповідно.

Для дослідження термодинаміки моделі застосовано наближення середнього поля стосовно псевдоспін-електронної взаємодії та перенесення інтеркальованих іонів. Взято до уваги можливість формування модульованих фаз. При розбитті на дві підґратки ( $\alpha = 1, 2$ ) параметрами самоузгодження є електронна кон-

центрація  $n_\alpha = \sum_\sigma \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle$  та середнє  $\eta_\alpha = \langle S_{i\alpha}^z \rangle$ , що визначає заселеність іонних позицій, а також середнє  $\langle S_{i\alpha}^x \rangle$ , яке має зміст параметра порядку у випадку фаз з бозе-конденсацією домішкових іонів.

Шляхом діагоналізації електронної та псевдоспінової частини гамільтоніана середнього поля знайдено електронну зонну енергію  $\lambda_{k\alpha}$  у присутності інтеркалянта та середнє поле  $\tilde{\lambda}_\alpha$ , що діє на псевдоспіни

$$\lambda_{k\alpha} = g \frac{\eta_1 + \eta_2}{2} + (-1)^\alpha \sqrt{\left(g \frac{\eta_1 - \eta_2}{2}\right)^2 + t_k^2}; \tilde{\lambda}_\alpha = \sqrt{(gn_\alpha - h)^2 + (2\Omega \langle S_\beta^x \rangle)^2}, \alpha \neq \beta \quad (5)$$

Електронна зона змінює своє положення при інтеркаляції, має місце також її розщеплення. Псевдоспіновий спектр зазнає модифікації, характерної для фаз з конденсатом.

Повний термодинамічний потенціал має у НСП вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\Phi}{\frac{N}{2}} = & -\frac{T}{N} \sum_{k,\sigma} \ln \left( \left(1 + e^{\frac{\mu - \lambda_{k1}}{T}}\right) \left(1 + e^{\frac{\mu - \lambda_{k2}}{T}}\right) \right) \\ & - T \ln \left( 4 \cosh \frac{\beta \tilde{\lambda}_1}{2} \cosh \frac{\beta \tilde{\lambda}_2}{2} \right) - g(n_1 \eta_1 + n_2 \eta_2) - 2\Omega \langle S_1^x \rangle \langle S_2^x \rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

Виходячи з умов рівноваги  $\partial\Phi/\partial\eta_\alpha = 0$ ,  $\partial\Phi/\partial\langle S_\alpha^x \rangle = 0$ ,  $\partial\Phi/\partial n_\alpha = 0$ , отримано систему рівнянь для параметрів самоузгодження; їх розв'язки знайдено числовим способом (при розрахунках використовувалась густина електронних станів  $\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - \varepsilon^2}$ ). Відбір термодинамічно стійких станів та аналіз фазових переходів виконано за допомогою потенціалу (6). Побудовано фазові діаграми, що визначають області існування різних фаз у випадках інтеркалянта донорного ( $g < 0$ ) та акцепторного ( $g > 0$ ) типу. Якщо  $\mu = 0$  (що відповідає половинному заповненню електронної зони) та при малих значеннях параметра  $\Omega$ , в системі відбувається фазовий перехід 1-го роду з однорідної “2” в модульовану фазу “4а” (у якій  $n_1 \neq n_2, \eta_1 \neq \eta_2$ ), при зміні хімічного потенціалу іонів в області  $h \sim g$  (див. рис. 2). У випадках коли  $\mu$  перебуває поблизу краю зони (нижнього, при  $g < 0$ , чи верхнього, при  $g > 0$ ) та при малих значеннях  $\Omega$  має місце фазовий перехід 1-го роду між двома однорідними фазами “2” зі стрибком середніх концентрацій іонів та електронів. Цьому відповідає розшарування на “бідну” і “багату” фази, що узгоджується з експериментальними даними для низки напівпровідникових систем [M. Wagemaker et al.// J. Am. Chem. Soc., 2003, **125**, 840]. Даний ефект є наслідком появи ефективного притягання між іонами. Для великих значень параметра  $\Omega$  реалізуються однорідні фази з  $\langle S^x \rangle \neq 0$  (фази “1” та “3”) та  $\langle S^x \rangle = 0$  (фаза “2”). Фаза з  $\langle S^x \rangle \neq 0$  виникає внаслідок перестрибування домішкових іонів

між вузлами ґратки; ця фаза може мати відношення до стану з високою рухливістю інтеркальованих іонів.

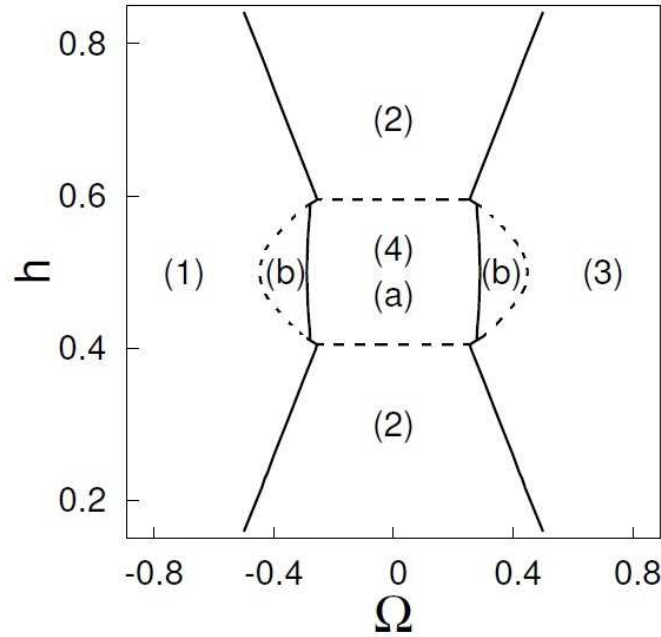


Рис. 2: Фазова діаграма на площині  $(h, \Omega)$   $\mu = 0, g = 0.4, W = 1, T = 0.05$ . (1),(3) - однорідна фаза з  $\langle S^x \rangle \neq 0$  ((1):  $\langle S_1^x \rangle = \langle S_2^x \rangle$ , (3):  $\langle S_1^x \rangle = -\langle S_2^x \rangle$ ); (2) - однорідна фаза з  $\langle S^x \rangle = 0$ ; (4) - модульована фаза ((а):  $\langle S_{1,2}^x \rangle = 0$ , (b):  $\langle S_{1,2}^x \rangle \neq 0$ ). Суцільні лінії відповідають фазовим переходам 2-го роду, штрихові лінії - фазовим переходам 1-го роду.

яку використовують при описі суміші ультрахолодних бозе- та фермі- атомів у оптичних ґратках. Звернуто увагу на вплив ферміонів на перехід від нормальної (MI) до наділинної (SF) фази; розраховано лінії спінодалей, які є лініями фазових переходів (ФП) 2-го роду коли термодинамічно можливою є їх реалізація. В доповнення до досліджень [Н. Fehrmann et al.//Opt. Commun., 2004, **243**, 23], для  $T = 0$ , побудовано фазові діаграми для ненульових температур. Розглянуто випадки притягання ( $U' < 0$ ) та відштовхування ( $U' > 0$ ) між бозонами і ферміонами за скінченної бозонної кореляції  $U$  хаббардівського типу;  $t_{ij}(t'_{ij})$  - параметри перенесення бозонів (ферміонів) у ґратці.

Для встановлення умов стабільності MI фази відносно появи бозеконденсату 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 запроваджено оператори Хаббарда  $X_i^{nm} = |n, i \rangle \langle m, i|$ ,  $X_i^{\tilde{n}\tilde{m}} = |\tilde{n}, i \rangle \langle \tilde{m}, i|$ ,

У випадку  $\Omega < 0$  реалізується  $\langle S_1^x \rangle = \langle S_2^x \rangle$ , а при  $\Omega > 0$   $\langle S_1^x \rangle = -\langle S_2^x \rangle$ . При проміжних значеннях  $\Omega$  може реалізуватись фаза "4b", для якої одночасно  $\langle S_\alpha^x \rangle \neq 0$  і існує просторова модуляція концентрацій. Така фаза відомий з літератури фазі суперсолід (SS), механізм появи якої пов'язують, зокрема, з впливом ефективної взаємодії між іонами через електрони. Фазовий перехід з однорідної в модульовану фази може бути як першого так і другого роду (рис. 2).

**Четвертий** розділ присвячено розгляду фазової поведінки та нестійкості щодо появи бозеконденсату у моделі Бозе-Фермі-Хаббарда (БФХ) з гамільтоніаном

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} b_i^+ b_j - \sum_{ij} t'_{ij} f_i^+ f_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + U' \sum_i n_i^b n_i^f - \mu \sum_i b_i^+ b_i - \mu' \sum_i f_i^+ f_i. \quad (7)$$

що діють на базисі вузлових станів  $(n_i^b = n, n_i^f = 0) \equiv |n, i \rangle$ ;  $(n_i^b = n, n_i^f = 1) \equiv |\tilde{n}, i \rangle$ .

Функцію Гріна  $G_{ij}(t - t') = \ll b_i(t) | b_j^\dagger(t') \gg$ , де  $b_i = \sum_n \sqrt{n+1} X_i^{n, n+1} + \sum_{\tilde{n}} \sqrt{\tilde{n}+1} X_i^{\tilde{n}, \tilde{n}+1}$ , розраховано для нормальної фази у наближенні хаотичних фаз, застосовуючи розчеплення типу

$$\begin{aligned} \langle \langle (X_l^{m, m} - X_l^{m+1, m+1}) b_j | X_p^{r+1, r} \rangle \rangle &\approx \langle X^{m, m} - X^{m+1, m+1} \rangle \langle \langle b_j | X_p^{r+1, r} \rangle \rangle, \\ \langle \langle b_i^\dagger X^{m, m+2} | X_r^{r+1, r} \rangle \rangle &\approx 0. \end{aligned} \quad (8)$$

які придатні при  $\langle b_i \rangle = 0$ . У випадку локалізованих ферміонів ( $t'_{ij} = 0$ ) для фур'є-образу функції  $G$  отримано  $G_k(\omega) = \frac{1}{2\pi} [1 - g^0(\omega) t_k]^{-1}$ , де незбурена одновузлова функція Гріна

$$g^0(\omega) = \sum_m \left[ \frac{Q_m(m+1)}{\omega - \Delta_m} + \frac{Q_{\tilde{m}}(\tilde{m}+1)}{\omega - \Delta_{\tilde{m}}} \right]. \quad (9)$$

$\Delta_m = \lambda_{m+1} - \lambda_m$  ( $\Delta_{\tilde{m}} = \lambda_{\tilde{m}+1} - \lambda_{\tilde{m}}$ ) - відстань між одновузловими рівнями енергії ( $\lambda_m = \frac{U}{2} m(m-1) - \mu m$ ;  $\lambda_{\tilde{m}} = \frac{U}{2} \tilde{m}(\tilde{m}-1) - \mu \tilde{m} - \mu' + U' \tilde{m}$ );  $Q_m$  ( $Q_{\tilde{m}}$ ) - різниця заселеності рівнів  $m$  і  $m+1$  ( $\tilde{m}$  і  $\tilde{m}+1$ ).

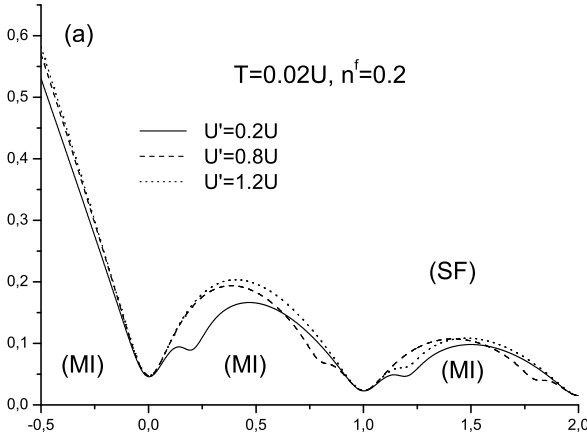


Рис. 3:  $(W, \mu)$  фазова діаграма для різних значень  $U'$ ,  $n^f = 0.2$

Лінії спінодалей визначено з умови  $1 = t_0 g_0(\omega = 0)$ , яка у випадку  $t_{ij} > 0$  виконується в центрі зони Брилюена (при  $T \rightarrow 0$  рівняння (6) відповідає отриманому в [M. Lewenstein et al. // Phys. Rev. Lett., 2004, **92**, 050401] в рамках теорії середнього поля). Результати подано у вигляді фазових діаграм  $(W, \mu)$  (де  $W$  - півширина вихідної бозонної зони;  $\mu$  - хімпотенціал бозонів) при різних  $T$ ,  $U'$  і заданій концентрації ферміонів  $n'$ . Їх характерною рисою є наявність послідовності куполів вздовж осі  $\mu$ , що обмежують області МІ фази; переходи між ними згладжуються при зростанні  $T$ , а розташування і ширини змінюються залежно від  $U'$  і  $n'$  (рис. 3). Якісно цей ефект пов'язаний з тим, що при  $t \neq 0$  SF фаза з'являється в околі значень  $\mu = nU$  ( $\mu = nU + U'$ ); відповідно, бозе-конденсат виникає у супроводі ферміонів з їх малою (великою) концентрацією (існування двох типів бозе-конденсату у БФ-сумішах було відзначено в [A. Mering, M. Fleischhauer // Phys. Rev. A, 2008, **77**, 023601]). Появу додаткових областей SF фази при проміжних концентраціях  $n'$  отримано і на фазових

діаграмах  $(T, \mu)$ ; виявлено ефект “відриву” від осі абсцис областей SF фази при активаційному механізмі перенесення бозонів. Нижчу критичну температуру, можна пов’язувати з переходом до суперіонного стану при застосуванні моделі до систем з суперіонною провідністю [I.V. Stasyuk, N. Pavlenko // J. Phys.: Condens. Matter, 1998, **10**, 7079].

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, виходячи 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  $\mu$  та ферміонів  $\mu'$ .

Гамільтоніан моделі БФХ (7) записано у представленні операторів Хаббарда, що діють на одновузловому базисі  $|n_i^b, n_i^f\rangle$ , який при  $U \rightarrow \infty$  складається з чотирьох станів  $|0\rangle = |0, 0\rangle$ ,  $|\tilde{0}\rangle = |0, 1\rangle$ ,  $|1\rangle = |1, 0\rangle$ ,  $|\tilde{1}\rangle = |1, 1\rangle$ . Виділено параметр порядку для бозе-конденсату  $\varphi = \langle b_i \rangle = \langle b_i^+ \rangle$ ; середньопольова частина гамільтоніана після діагоналізації має вигляд  $\hat{H}_{MF} = \sum_i H_i$ , де  $\hat{H}_i = \sum_{p'} \varepsilon_{p'} X_i^{p'p'} - t_0 \varphi^2$  причому  $p' = 0', 1', \tilde{0}', \tilde{1}'$  - індекси, що визначають стани на новому базисі,

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

$$(t_0 = \sum_j t_{ij} = -|t_0|; \quad t_0 < 0) \quad (10)$$

Відповідно, великий термодинамічний потенціал у НСП:  $\Omega_{MF}/N = -\theta \ln Z_0 = -\theta \ln \left( \sum_{p'} e^{-\beta \varepsilon_{p'}} \right)$ . Рівноважні значення параметра  $\varphi$  визначаються з умови  $\partial \Omega_{MF} / \partial \varphi = 0$ . Для розв’язку  $\varphi \neq 0$  отримано рівняння

$$\frac{1}{|t_0|} = \frac{\langle X^{1'1'} \rangle - \langle X^{0'0'} \rangle}{2\sqrt{\frac{\mu^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}} + \frac{\langle X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle - \langle X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{2\sqrt{\frac{(U' - \mu)^2}{4} + t_0^2 \varphi^2}} \quad (11)$$

За наявності декількох розв’язків береться той, що відповідає абсолютному мінімуму  $\Omega_{MF}$ . З рівняння (11), покладаючи  $\varphi = 0$ , отримано умову нестабільності нормальної (MI) фази щодо появи бозе-конденсату (на діаграмах їй відповідають лінії спінодалей, які можуть бути лініями переходів 2-го роду при виконанні критеріїв термодинамічної стійкості).

Ми обмежилися при цьому випадком ( $U' > 0$ ) та  $T = 0$ , коли система може переходити шляхом квантового фазового переходу з одного основного стану в інший. Виявлено наявність S-подібних залежностей  $\varphi(\mu)$  і, відповідно, переходів 1-

го роду (замість 2-го) до SF фази у певних областях значень хімічних потенціалів  $\mu$  і  $\mu'$ . Ефект має місце, коли хімічний потенціал  $\mu'$  розміщений в межах інтервалу  $[0, U']$ . Поява переходів 1-го роду і стрибків параметра порядку  $\varphi$  пов'язана із конкуренцією між станами, у яких поряд з бозонами присутні або відсутні ферміони. Точка  $\mu' = U'/2$  є особливою, у цій точці зі зменшенням  $\mu'$  відбувається розпад області SF фази на дві окремі. Це підтверджує існування двох типів бозе-конденсату -  $SF^{\tilde{1}'}$  (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  $(\mu', \mu)$  і  $(|t_0|, \mu)$ , розрахованих при різних значеннях  $|t_0|$  і  $\mu'$  відповідно (надплинна фаза є в областях, де основними є стани  $|1'\rangle$  і  $|\tilde{1}'\rangle$ ).

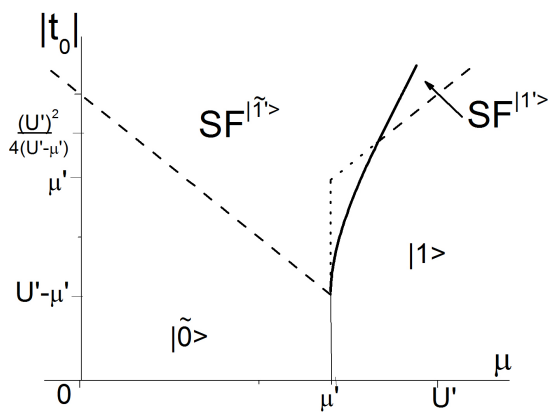


Рис. 4:  $(|t_0|, \mu)$  діаграма, випадок  $U'/2 < \mu' < U'$  вплив ферміонів проявляється лише у зміщенні точки мінімуму [Т.Р. Polak, Т.К. Корєс// Phys. Rev. A, 2001, **81**, 043612]]. Даний ефект показує, що присутність ферміонів утруднює бозе-конденсацію; це відповідає даним експерименту для суміші  $^{87}\text{Rb} - ^{40}\text{K}$  [С. Ospelkaus et al//Phys. Rev. Lett., 2006, **97**, 120402].

На лінії фазових переходів першого роду в режимі фіксованих значень  $\mu$  та  $\mu'$  має місце стрибкоподібна поведінка концентрації бозонів  $\bar{n}_B = -\partial(\Omega_{MF}/N)/\partial\mu$ . В режимі фіксованих  $\bar{n}_B$  та  $\mu'$  цьому відповідає розділення на фази з різною концентрацією  $\bar{n}_B$ , яке, проте, відсутнє в центральній області  $|t_0| < \mu' < U' - |t_0|$ , яка існує при  $|t_0| < U'/2$ ; при заданій проміжній величині  $\bar{n}_B$  система перебуває в змішаному стані, у якому вузли ґратки заповнені (стан  $|\tilde{1}'\rangle$ ) або порожні ( $|0\rangle$ ) з імовірностями,  $\bar{n}_B$  або  $1 - \bar{n}_B$ , відповідно.

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 у **шостому розділі** на ненульові температури. Застосовано аналогічний підхід: бозон-ферміонну взаємодію  $U' > 0$  враховано точно, а перенесення бозонів по ґратці - у НСП.

Характерною рисою моделі є асиметрія фазових діаграм  $(|t_0|, \mu)$ , що відрізняє їх від діаграм для чистої моделі жорстких бозонів. Існує, крім цього, мінімальне значення параметра перенесення бозонів  $|t_0|$ , нижче якого при  $T = 0$  SF фаза не виникає (див. рис. 4); це отримано шляхом прямого врахування бозон-ферміонної взаємодії (у наближенні Хартрі-Фока  $|t_0|_{min} = 0$  і

Проаналізовано поведінку параметра порядку бозе-конденсату та термодинамічного потенціалу як функцій хімічних потенціалів частинок при ненульових температурах. Виділено термодинамічно стійкі стани, які відповідають абсолютному мінімуму термодинамічного потенціалу; розраховано лінії спінодалей та побудовано фазові діаграми на площині  $(T, \mu)$ . Їх характерною рисою є “ре-ентрант” - поведінка (існування SF фази як проміжної при зміні температури) при потраплянні  $\mu'$  всередину інтервалу  $[0, U']$ .

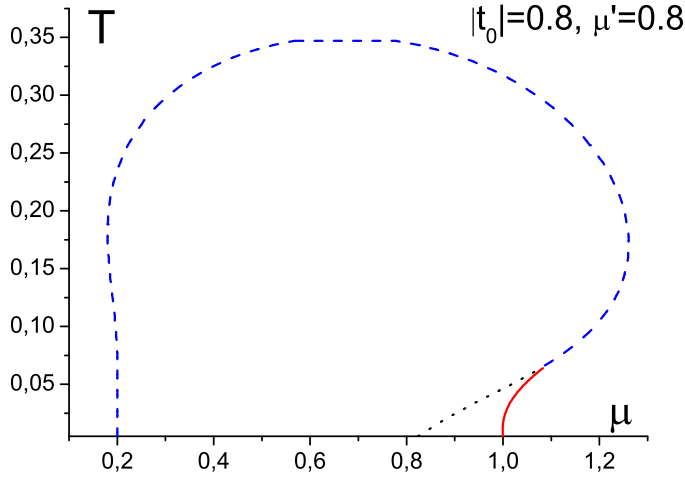


Рис. 5:  $(T, \mu)$  фазова діаграма у випадку  $|t_0| = 0.8, \mu' = 0.8, U' = 1$ . Тут - суцільна (штрихова) лінія є лінією фазового переходу 1го (2го) роду; пунктирна лінія – спінодалі. Всі величини дано в одиницях  $U'$ .

одна область SF фази при низьких температурах, проте при зростанні  $T$  настає зміна топології і область SF фази стає двозв'язною. Таке розщеплення на дві частини відбувається в точці з координатами  $\mu = \mu' = 0,5U'$ , що відповідає заповненню з  $\bar{n}_B = 1/2$ . Тут має місце фазовий перехід 2-го роду з SF до MI фази за температури  $\theta_{spinod} = U'[4ArthU'/2|t_0|]^{-1}$  яка не залежить від хімічного потенціалу ферміонів  $\mu'$ . Для  $U'_{crit} = 2|t_0|$  фаза SF у випадку  $\mu = U'/2$  зникає.

Значення параметра перенесення бозонів  $|t_0|_{min}$ , нижче якого неможлива їх конденсація, зростає при підвищенні температури. Це узгоджується з даними, отриманими в [G. Refael, F. Demler// Phys. Rev. B, 2008, **77**, 144511].

Проаналізовано стрибки концентрацій  $\Delta\bar{n}_B$  та  $\Delta\bar{n}_F$  на лінії фазових переходів 1-го роду при різних температурах. Існують два окремі інтервали значень  $\mu'$  із стрибками концентрацій; вони з'єднуються в точці  $\mu' = U'/2$  у границі  $T \rightarrow 0$  у випадку  $U'/2 < |t_0| < U'$ . При підвищенні  $T$  стрибки зникають у критичних та трикритичних точках.

**Сьомий** розділ присвячено дослідженню ферміонного спектру моделі Бозе-Фермі-Хаббарда (БФХ) в рамках методу, що базується на застосуванні опе-

Встановлено умови, за яких лінії фазових переходів не накладаються на спінодали і переходи є 1-го роду. Є два випадки: і) переходи між MI і SF фазами, які переходять у трикритичних точках у переходи 2-го роду (рис.5); ii) переходи в межах області SF фази, лінії яких закінчується у критичних точках (при  $T = 0$  вони розділяють цю область на частини  $SF^{(i)}$  і  $SF^{(1)}$  з різними типами бозе-конденсату, описані в розділі 5).

На фазових діаграмах  $(\mu', \mu)$ , отриманих при  $T \neq 0$ , області SF фази при  $|t_0| < U'/2$  завжди роз'єднані.

У випадку  $U'/2 < |t_0| < U'$  існує лише



раторів 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, що дозволяє трактувати їх як “безспінові”.

Виходячи з гамільтоніана (7), для дослідження ферміонного спектру використано підхід двочасових температурних функцій Гріна  $\langle\langle a_i | a_j^+ \rangle\rangle$ , побудованих на фермі-операторах, де  $a_i = \sum X_i^{n\tilde{n}}$ . Задача зведена до розрахунку функції Гріна на операторах Хаббарда  $\langle\langle X^{n\tilde{n}} | X^{\tilde{r}r} \rangle\rangle$ . Використано розчеплення, що відповідають наближенню середнього поля для бозонів та наближенню Хаббард-I для ферміонів [J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Lond. A 276, 238 (1963)]; це дозволяє врахувати одновузлову взаємодію  $U'$  в рамках нульового наближення. У рівняннях руху для функцій Гріна  $\langle\langle X_p^{m\tilde{m}} | X_r^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$  застосовано наближення

$$\begin{aligned} b_i^+ X_p^{m-1, \tilde{m}} &\rightarrow \langle b_i^+ \rangle X_p^{m-1, \tilde{m}}; & X_p^{m+1, \tilde{m}} b_j &\rightarrow X_p^{m+1, \tilde{m}} \langle b_j \rangle, \\ (X_p^{mm} + X_p^{\tilde{m}\tilde{m}}) a_j &\rightarrow \langle X_p^{mm} + X_p^{\tilde{m}\tilde{m}} \rangle a_j \end{aligned} \quad (12)$$

і т.п., причому  $\langle b_i^+ \rangle = \langle b_j \rangle \equiv \varphi$  – параметр порядку бозе-конденсату. В результаті отримано загальну систему рівнянь, де входять функції Гріна  $\langle\langle X^{m\tilde{m}} | X^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$ ,  $\langle\langle X^{mm-1} | X^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$ ,  $\langle\langle a | X^{\tilde{n}n} \rangle\rangle$ .

Подальші розрахунки виконано у підході жорстких бозонів. При наявності безспінових ферміонів це відповідає переходу до 4-станової моделі (зі станами  $|0\rangle$ ,  $|\tilde{0}\rangle$ ,  $|1\rangle$ ,  $|\tilde{1}\rangle$ ), що використовувалась у розділах 5 і 6. Тут  $a_i = X_i^{0, \tilde{0}} + X_i^{1, \tilde{1}}$  і після перетворення, що діагоналізує  $H_{MF}$ ,  $a_i = \cos(\tilde{\psi} - \psi) (X_i^{0\tilde{0}'} + X_i^{1\tilde{1}'}) + \sin(\tilde{\psi} - \psi) (X_i^{1\tilde{0}'} - X_i^{0\tilde{1}'})$  де  $\sin 2\psi = t_0\varphi [\mu^2/4 + t_0^2\varphi^2]^{-1/2}$ ;  $\sin 2\tilde{\psi} = t_0\varphi \left[ \left( \frac{U' - \mu}{2} \right)^2 + t_0^2\varphi^2 \right]^{-1/2}$ .

Для ферміонної функції Гріна отримано вираз  $\langle\langle a | a^+ \rangle\rangle_{q, \omega} = \frac{\hbar}{2\pi} [g_{0F}^{-1}(\omega) - t_q]$ , де

$$\begin{aligned} g_{0F}(\omega) &= \cos^2(\tilde{\psi} - \psi) \left[ \frac{\langle X^{0'0'} + X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{0}'} + \varepsilon_{0'}} + \frac{\langle X^{1'1'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{1'}} \right] + \\ &+ \sin^2(\tilde{\psi} - \psi) \left[ \frac{\langle X^{1'1'} + X^{\tilde{0}'\tilde{0}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{0}'} + \varepsilon_{1'}} + \frac{\langle X^{0'0'} + X^{\tilde{1}'\tilde{1}'} \rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_{\tilde{1}'} + \varepsilon_{0'}} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

У випадку  $T = 0$  внески до  $g_{0F}(\omega)$  визначаються станами з найнижчими енергіями. Залежно від значень  $\mu$  і  $\mu'$  основні стани змінюються. При переміщенні  $\mu$  у додатньому напрямку мають місце, зокрема, послідовності: (а)  $|0\rangle \rightarrow |1'\rangle \rightarrow |1\rangle$  для  $\mu' < 0$ ; (б)  $|\tilde{0}\rangle \rightarrow |\tilde{1}'\rangle \rightarrow |\tilde{1}\rangle$  для  $\mu' > U'$ ; (в)  $|\tilde{0}\rangle \rightarrow |\tilde{1}'\rangle \rightarrow |1'\rangle \rightarrow |1\rangle$  для  $\mu' \sim U'/2$ ,  $U'/2 < |t_0| < U'$ . На рис.6 представлено розраховані для цих випадків межі енергетичних зон, отримані з густин електронних станів  $\rho(\hbar\omega) =$

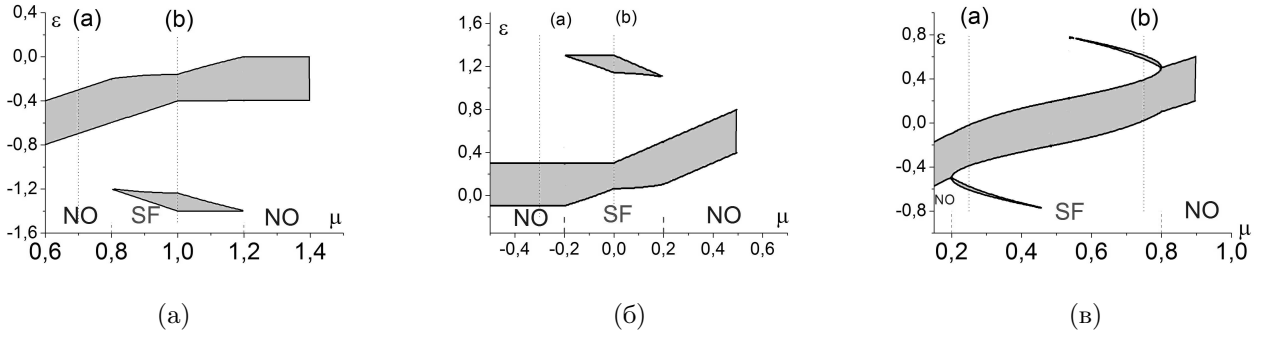


Рис. 6: Енергетичні рівні ферміонів  $U' = 1$ , (а)  $t_0 = -0.2, \mu' = 1.2$ ; (б)  $t_0 = -0.2, \mu' = -0.1$ ; (в)  $t_0 = -0.8, \mu' = 0.5$ . Лінії (а) та (б) на графіках відповідають різним значенням хімічного потенціалу  $\mu$  ((а)  $\mu = 0.7$  та  $\mu = 1$ ; (б)  $\mu = -0.3$  та  $\mu = 0$ ; (в)  $\mu = 0.25$  та  $\mu = 0.75$ )

$\int_w^w dx \rho_0(x) (A_1(x)\delta(x - \varepsilon_1)) + A_2(x)\delta(x - \varepsilon_2)$  (тут  $A_i(x)$  - ваги відповідних полюсів функції Гріна  $\langle\langle a|a^+ \rangle\rangle$ ,  $\rho_0(x) = \frac{1}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - x^2}$ ). З отриманих результатів видно, що крім зсуву ферміонних рівнів енергії, що залежить від хімічного потенціалу бозонів, у фазі з бозе-конденсатом (де  $\varphi \neq 0$ ) має місце поява нових підзон. У випадку (а) додаткова підзона появляється над основною зоною на віддалі  $\sim U'$ ; у випадку (б) вона існує під основною зоною на такій самій віддалі (рис. 6). Поступове відщеплення підзони у випадку (б) пов'язане з переходами 2-го роду між відповідними фазами. Причиною розщеплення спектру у SF фазі є поява нових ферміонних переходів (що супроводжуються народженням або знищенням бозона внаслідок змішування станів з різним числом бозонів). Такі збудження подібні до “композитних ферміонів”, описаних в [Fehrmann H., Baranov M., Lewenstein M., Santos L.// Opt. Express, 2004, **12**, 55].

## Основні результати та 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  $\Omega$ , 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 гратковій 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  $(T, \mu)$  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  $\mu$  і  $\mu'$ , 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  $(\mu', \mu)$  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. “ре-ентрант” переходи (коли фаза з бозе-конденсатом є проміжною); на фазових  $(T, \mu)$  діаграмах лінії переходів 1-го роду, залежно від значень хімічного потенціалу ферміонів  $\mu'$ , 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).

**Результати дисертації опубліковано в таких роботах:**

1. Stasyuk I.V., Krasnov V.O. Pseudospin-electron model spectrum in alloy analogy approximation // *Condens. Matter Phys.* – 2006. – Vol. 9. – P. 725.

2. Mysakovych T.S, Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Phase transitions in the lattice model of intercalation // *Condens. Matter Phys.*– 2008. – Vol. 11. – P. 663.
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.13003.
4. Mysakovych T.S, Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Lattice Model of Intercalation // *Ukr. J. Phys.* – 2010. – Vol. 55, no 2. – P. 228.
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.
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.
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.43702.
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.* – 2017. – Vol. 511. – P. 109.
9. Стасюк І.В., Краснов В.О. Спектр псевдоспін-електронної моделі в сплавному наближенні // *V міжнародна школа - конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”*. – Дрогобич, 2005. – 27-30 Червня. - С. 220.
10. Stasyuk I.V, Krasnov V.O. Pseudospin-electron model spectrum in alloy analogy approximation // *International Conference “Statistical Physics 2006. Condensed Matter: Theory and Applications” (CMPT 2006)*. – Kharkiv, 2006. – 11-15 September. – P. 84.
11. Мисакович Т.С., Стасюк І.В, Краснов В.О. Граткова модель інтеркаляції// *IV Міжнародна наукова конференція “Фізика невідпорядкованих систем”*. – Львів, 2008. – 14-16 Жовтня. – С. 56.
12. Mysakovych T.S., Krasnov V.O. Thermodynamics of lattice model of intercalation // *The 3-rd conference “Statistical physics: modern trends and applications”*. – Lviv, 2009. – 23-25 June. – P. 197.
13. Mysakovych T.S., Krasnov V.O., Stasyuk I.V. Phase transitions in the lattice model of intercalation // *ICPTTFN-XII*. – Vol.1. – Ivano-Frankivsk, 2009. – 18-23 May. – 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. – 1-5 June.

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, 2010. – 28 Вересня - 1 Жовтня. – С. 70.
16. Krasnov V.O. Fermion spectrum of the Bose-Fermi-Hubbard model// *Program and Proceedings of the V Young Scientists Conference “Problems of Theoretical Physics”*. – Kyiv, 2013. – 24-27 December. – P. 29.

## АНОТАЦІЯ

**Краснов В.О. Термодинаміка та енергетичні спектри ґраткових бозе-фермі систем із сильними кореляціями. - Рукопис.**

*Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 - теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук 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 на основі методу динамічного середнього поля перебудову електронного спектру та перехід типу Мотта у локально-ангармонічних кристалах із тунельним розщепленням коливних рівнів. Шляхом застосування ПЕМ до опису іонної інтеркаляції в кристалах показано, що під впливом взаємодії з електронами та міжпозиційного перестрибування можуть виникати: однорідний або просторово модульований розподіл інтеркалянта; фазове розшарування; фази з високою рухливістю іонів. У рамках моделі Бозе-Фермі-Хаббарда (БФХ), яку використовують для опису бозон-ферміонних сумішей у оптичних ґратках, встановлено, що у границі жорстких бозонів та ”важких” ферміонів фазові переходи до надплинної (SF) фази у режимі фіксованих хімічних потенціалів стають при певних умовах переходами 1-го роду, що призводить до фазового розшарування при заданих концентраціях. Область існування SF фази змінює свою топологію залежно від величини бозон-ферміонної взаємодії та температури і може містити окремі ділянки, що відповідають різним типам бозе-конденсату. У таких системах при ненульових температурах можуть існувати “ре-ентрант” переходи (коли фаза з бозе-конденсатом є проміжною). Досліджено ферміонний енергетичний спектр моделі БФХ у границі жорстких бозонів та сильної хаббардівської кореляції; показано, що при переході до SF фази у спектрі з’являються додаткові підзони, що є наслідком існування бозе-конденсату.

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

## АННОТАЦИЯ

**Краснов В.О. Термодинамика и энергетические спектры решеточных бозе-ферми систем с сильными корреляциями. - Рукопись.**

*Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2017.*

Диссертация посвящена развитию модельного описания взаимодействующих решеточных бозе-ферми систем с целью изучения влияния фермионной подсистемы на их термодинамические свойства, а также особенностей фермионного спектра в различных фазовых состояниях. В рамках псевдоспин-электронной модели (ПЭМ) исследованы, на основе метода динамического среднего поля, перестройка электронного спектра и переход типа Мотта в локально-ангармонических кристаллах с туннельным расщеплением колебательных уровней. Путем применения ПЭМ к описанию ионной интеркаляции в кристаллах показано, что под влиянием взаимодействия с электронами и межпозиционных перескоков могут возникать: однородное или пространственно модулированное распределение интеркалянта; фазовое расслоение; фазы с высокой подвижностью ионов. В рамках модели Бозе-Ферми-Хаббарда (БФХ), которую используют для описания бозон-фермионных смесей в оптических решетках, показано, что в пределе жестких бозонов и “тяжёлых” фермионов фазовые переходы в сверхтекучую (SF) фазу в режиме фиксированных химических потенциалов становятся при некоторых условиях переходами 1-го рода, что приводит к фазовому расслоению при заданных концентрациях. Область существования SF фазы изменяет свою топологию в зависимости от величины бозон-фермионного взаимодействия и температуры и может содержать отдельные участки, соответствующие различным типам бозе-конденсата. В таких системах, при ненулевой температуре могут наблюдаться “ре-энтрант” переходы (когда фаза с бозе-конденсатом является промежуточной). Исследован фермионный энергетический спектр модели БФХ в предел жестких бозонов и сильной хаббардовской корреляции; показано, что при переходе в SF фазу в спектре появляются дополнительные подзоны, что является следствием наличия бозе-конденсата.

**Ключевые слова:** бозе-ферми системы, энергетический спектр, ионная интеркаляция, оптические решетки, бозе-конденсат.

## ABSTRACT

**Krasnov V.O. Thermodynamics and energy spectra of lattice Bose-Fermi mixtures with strong correlations. - Manuscript.**

*Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 - Theoretical Physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2017.*

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.