

© 2011 г.

И. В. Стасюк\*, О. В. Величко\*

## БОЗЕ-КОНДЕНСАЦИЯ В ВОЗБУЖДЕННОЙ ЗОНЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР МОДЕЛИ БОЗЕ–ХАББАРДА

Исследуется переход в фазу с бозе-конденсатом в модели Бозе–Хаббарда с двумя локальными состояниями при переносе бозонов лишь в возбужденной зоне. В основу рассмотрения положено приближение среднего поля. В пределе жестких бозонов изучена неустойчивость, связанная с данным переходом, который происходит при энергиях возбуждения  $\delta < |t'_0|$ , где  $|t'_0|$  – параметр перескока частиц. Обсуждаются условия, при которых род фазового перехода изменяется со второго на первый; приведены соответствующие фазовые диаграммы  $(\Theta, \mu)$  и  $(|t'_0|, \mu)$ , где  $\Theta$  – температура,  $\mu$  – химический потенциал. Продемонстрирована возможность расслоения на нормальную фазу и фазу с бозе-конденсатом при фиксированной средней концентрации бозонов. В приближении хаотических фаз проведен расчет бозонной функции Грина и одночастичной спектральной плотности. Проанализированы изменения в спектре возбуждений типа “частица” или “дырка” в области перехода из нормальной фазы в фазу с бозе-конденсатом.

**Ключевые слова:** модель Бозе–Хаббарда, жесткие бозоны, бозе-конденсация, энергетический спектр.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Бозе–Хаббарда (БХ) [1] в теории сильнокоррелированных систем бозе-частиц на протяжении последних лет является предметом интенсивных исследований. Ее наиболее широкое применение связано с описанием термодинамики и динамики бозе-атомов в оптических решетках. Важной особенностью таких систем является наличие фазового перехода в фазу с бозе-конденсатом при чрезвычайно низких температурах. Механизм перехода связан с конкуренцией между трансляционным движением атомов (перескоки между соседними положениями в решетке) и их короткодействующим отталкиванием хаббардовского типа. В результате система может пребывать либо в нормальной (NO) фазе (при  $T = 0$  это отвечает состоянию так называемого моттовского диэлектрика), либо в фазе, где присутствует бозе-конденсат

---

\*Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Львов, Украина.  
E-mail: olve@icmp.lviv.ua

(сверхтекучее состояние, SF). Бозе-конденсация в оптической решетке (атомы  $\text{Rb}^{67}$  в трехмерной решетке, созданной интерференцией лазерных пучков) наблюдалась впервые в работах [2], [3]; экспериментальные исследования в этой области продолжают до последнего времени.

Будучи квантовой решеточной моделью, модель БХ используется и в других областях, где такой подход является физически адекватным: в теории явлений, связанных с квантовой делокализацией атомов водорода, адсорбированных на поверхности переходных металлов [4]; при описании квантовой поверхностной или объемной диффузии легких частиц [5]; при исследовании термодинамики интеркаляции примесных атомов в кристаллических системах [6].

Изучению модели БХ посвящено значительное число работ. В числе первых можно отметить работу [7], где была рассмотрена термодинамика модели в приближении среднего поля по переносу частиц (при точном учете хаббардовского отталкивания). Был описан фазовый NO–SF переход в случае, когда частицы в локальных позициях пребывают в основном колебательном состоянии, и показано, что он является переходом второго рода. Последующие теоретические исследования в данном направлении, посвященные как термодинамике, так и энергетическому спектру и динамике бозонов, проводились с применением различных техник, в том числе приближения хаотических фаз (ПХФ) в методе функций Грина [8], [9], подхода сильной связи [10], расчетов с помощью квантового метода Монте-Карло [11] и других численных методов, теории динамического среднего поля [12].

Одним из направлений дальнейшего обобщения и развития модели БХ является учет возбужденных колебательных состояний бозонов в потенциальных минимумах в узлах решетки. В задачах квантовой делокализации или диффузии межузельные перескоки по возбужденным состояниям являются значительно более вероятными [13], [14]; это же относится и к оптическим решеткам [15]. Однако вопрос об участии возбужденных состояний в бозе-конденсации ставился преимущественно в плане возможности создания их достаточной заселенности путем оптической накачки и образования бозе-конденсата в возбужденной зоне [16]. Орбитальное вырождение возбужденного  $p$ -состояния может при этом приводить к появлению конденсата особого типа.

Целью настоящей работы является исследование равновесных термодинамических свойств и энергетического спектра модели БХ при учете, кроме основного, одного невырожденного возбужденного состояния в узле решетки. Мы ограничимся пределом жестких бозонов (не более одной частицы в отдельной позиции). Одноузельная задача является трехуровневой, и в связи с этим используется аппарат операторов Хаббарда. В приближении среднего поля, а также с помощью двухвременных функций Грина рассмотрены условия, при которых нормальное состояние бозе-системы неустойчиво относительно образования бозе-конденсата. Мы рассматриваем NO–SF переход и строим соответствующие фазовые диаграммы, обращая внимание на изменение рода фазового перехода и появление трикритических точек. Дано описание фазового расслоения на NO- и SF-фазы при фиксированной концентрации бозонов. В приближении хаотических фаз рассчитана спектральная плотность (одночастичная “плотность состояний”) бозонов и рассмотрены особенности ее поведения при NO–SF переходах первого или второго рода, связанные с изменением характера возбуждений.

## 2. ГАМИЛЬТониАН МОДЕЛИ В ПРЕДЕЛЕ ЖЕСТКИХ БОЗОНОВ

Гамильтониан квантового решеточного бозе-газа в модели БХ учитывает, с одной стороны, туннельные перескоки частиц между ближайшими позициями в решетке, с другой, – взаимное отталкивание частиц, находящихся в одной потенциальной яме [1]:

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

Здесь  $t_{ij}$  – параметр перескока,  $U$  – энергия парного хаббардовского одноузельного взаимодействия ( $U > 0$ ),  $\mu$  – химический потенциал,  $b_i^+, b_j$  – бозе-операторы рождения и уничтожения частиц на  $i$ -м узле в основном колебательном состоянии. При учете, кроме основного, первого возбужденного состояния и в случае, когда принимаются во внимание лишь перескоки между возбужденными состояниями в ближайших позициях, гамильтониан (1) принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{H} = & (\varepsilon - \mu) \sum_i b_i^+ b_i + (\varepsilon' - \mu) \sum_i c_i^+ c_i + \frac{U_b}{2} \sum_i n_i^b(n_i^b - 1) + \\ & + \frac{U_c}{2} \sum_i n_i^c(n_i^c - 1) + U_{bc} \sum_i n_i^b n_i^c + \sum_{ij} t'_{ij} c_i^+ c_j, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $c_i^+, c_i$  – бозе-операторы частиц в возбужденном состоянии,  $\varepsilon$  ( $\varepsilon'$ ) – энергия частицы в основном (возбужденном) состоянии,  $U_b, U_c, U_{bc}$  – параметры хаббардовского отталкивания.

Используя базис одноузельных состояний  $|i; n_i^b, n_i^c\rangle$ , который формируется числами заполнения частиц (собственными значениями операторов  $n_i^b = b_i^+ b_i$  и  $n_i^c = c_i^+ c_i$ ), можно ввести операторы Хаббарда [17]

$$X_i^{n,m;n',m'} \equiv |i; n, m\rangle \langle i; n', m'|.$$

Ограничимся в дальнейшем рассмотрением частного случая жестких бозонов, когда выполняется условие  $n + m \leq 1$ . В модели это достигается путем предельного перехода  $U_b, U_c, U_{bc} \rightarrow \infty$ . В данном пределе одноузельная задача становится трехуровневой с энергиями  $\lambda_0 = 0, \lambda_1 = -\mu, \lambda_2 = \delta - \mu$  (мы используем сокращенные обозначения для одноузельных состояний:  $|0\rangle \equiv |00\rangle, |1\rangle \equiv |10\rangle, |2\rangle \equiv |01\rangle$ ). Здесь  $\delta = \varepsilon' - \varepsilon$  – энергия перехода в возбужденное локальное состояние. Соответственно,

$$\begin{aligned} b_i &= X_i^{00,10} \equiv X_i^{01}, & c_i &= X_i^{00,01} \equiv X_i^{02}; \\ n_i^b &= X_i^{10,10} \equiv X_i^{11}, & n_i^c &= X_i^{01,01} \equiv X_i^{22}. \end{aligned}$$

В итоге гамильтониан (2) в представлении операторов Хаббарда принимает вид

$$\hat{H} = \sum_{i,p} \lambda_p X_i^{pp} + \sum_{i,j} t'_{ij} X_i^{20} X_j^{02}. \quad (3)$$

Нашей задачей является расчет двухвременной температурной функции Грина бозонов  $\langle\langle c|c^+ \rangle\rangle$ . Она определяет спектр возбуждений и дает возможность исследовать условия, при которых в системе возникает неустойчивость по отношению

к спонтанному нарушению симметрии и появлению бозе-конденсата. При этом бозе-конденсация происходит в зоне, возникающей благодаря перескокам частиц между возбужденными состояниями в соседних позициях (см. ниже). Параметром порядка является в этом случае среднее от операторов рождения или уничтожения бозонов:  $\xi = \langle X_i^{20} \rangle = \langle X_i^{02} \rangle$ , т. е.  $\xi = \langle c_i^+ \rangle = \langle c_i \rangle$ . Выделим часть гамильтониана (3), соответствующую приближению среднего поля:

$$\hat{H}_{\text{MF}} = -Nt'_0\xi^2 + \sum_{i,p} \lambda_p X_i^{pp} + t'_0\xi \sum_i (X_i^{20} + X_i^{02}),$$

где  $t'_0$  – фурье-образ параметра перескока  $t'_{ij}$  при  $\vec{q} = 0$  (мы рассматриваем в дальнейшем случай  $t'_0 < 0$ , относящийся к симметричным возбужденным состояниям; для антисимметричных  $t'_0 > 0$  [18]). Параметр  $\xi$  определяется из условия самосогласования  $\xi = Z^{-1} \text{Sp}(X_i^{20} e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}})$ , причем  $Z = \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}}$ . Заметим, что данное приближение соответствует точному решению задачи в случае, когда параметр перескока характеризуется бесконечным радиусом действия. Строгое доказательство данного утверждения для стандартной модели БХ было дано в работе [19] (см. также [20]) на основе подхода, сформулированного в духе вариационного метода Боголюбова–Тябликова. Полный гамильтониан в результате записывается как

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{MF}} + \sum_{i,j} t'_{ij} (X_i^{20} - \xi)(X_j^{02} - \xi). \quad (4)$$

Гамильтониан среднего поля  $\hat{H}_{\text{MF}}$  можно привести к диагональной форме, осуществив преобразование поворота

$$\begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & 0 & -\sin \vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \vartheta & 0 & \cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\tilde{0}\rangle \\ |\tilde{1}\rangle \\ |\tilde{2}\rangle \end{pmatrix},$$

где

$$\cos 2\vartheta = \frac{\delta - \mu}{E}, \quad \sin 2\vartheta = 2 \frac{|t'_0| \xi}{E}; \quad E = \sqrt{(\delta - \mu)^2 + 4(t'_0 \xi)^2}.$$

В терминах операторов  $\tilde{X}^{\mu\nu} = |\tilde{\mu}\rangle \langle \tilde{\nu}|$  гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_{\text{MF}} = -Nt'_0\xi^2 + \sum_{i,\mu} \tilde{\lambda}_\mu \tilde{X}_i^{\mu\mu}. \quad (5)$$

Энергии одноузельных состояний  $\tilde{\lambda}_\mu$  в фазе с нарушенной симметрией (когда  $\xi \neq 0$ ) равны  $\tilde{\lambda}_{0,2} = (\delta - \mu \mp E)/2$ ,  $\tilde{\lambda}_1 = -\mu$ .

Удобно ввести линейные комбинации

$$\sigma_i^z = \frac{\tilde{X}_i^{00} - \tilde{X}_i^{22}}{2}, \quad \sigma_i^+ \equiv \sigma_i^x + i\sigma_i^y = \tilde{X}_i^{02}, \quad \sigma_i^- \equiv \sigma_i^x - i\sigma_i^y = \tilde{X}_i^{20}. \quad (6)$$

Легко видеть, что операторы  $\sigma_i^\alpha$  обладают такими же свойствами, как и спиновые операторы для  $S = 1/2$ , и удовлетворяют аналогичным перестановочным соотношениям (с тем отличием, что антикоммутатор операторов  $\sigma_i^+$  и  $\sigma_i^-$  равен  $\tilde{X}_i^{00} + \tilde{X}_i^{22}$ ,

а не единице, как в обычном случае). В результате при переходе к новому базису получаем

$$X_i^{20} = \sigma_i^z \sin 2\vartheta + \sigma_i^x \cos 2\vartheta - i\sigma_i^y, \quad X_i^{02} = (X_i^{20})^+, \quad (7)$$

при этом гамильтониан среднего поля представляется как

$$\hat{H}_{\text{MF}} = N \left( \frac{\delta - \mu}{2} - t'_0 \xi^2 \right) - \frac{\delta + \mu}{2} \sum_i \tilde{X}_i^{11} - E \sum_i \sigma_i^z.$$

Гамильтониан (4), записанный через операторы (6), можно рассматривать как обобщение гамильтониана стандартной модели жестких бозонов [21] на трехуровневый случай. Присутствие третьего уровня  $|\hat{1}\rangle$  не проявляется в динамике псевдоспинов, но влияет на заселенности уровней  $|\hat{0}\rangle$  и  $|\hat{2}\rangle$ , определяя тем самым отличие в термодинамике модели. Вместе с тем использование формализма операторов “псевдоспина” позволяет применить традиционную схему расчета в ПХФ функций Грина для спиновых моделей, которая берет свое начало от известного расщепления Тябликова [22], предложенного для модели Гейзенберга.

### 3. ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ В ПРИБЛИЖЕНИИ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Прежде чем заняться непосредственно расчетом бозонной функции Грина, остановимся на термодинамике трехуровневой модели, основываясь на приближении среднего поля. Усредняя по распределению Гиббса с гамильтонианом (5) и учитывая, что средние от поперечных компонент псевдоспина равны нулю, получим уравнение для параметра порядка  $\xi = \langle X_i^{02} \rangle$ :

$$\xi = Z^{-1} E^{-1} |t'_0| \xi (e^{-\beta \tilde{\lambda}_0} - e^{-\beta \tilde{\lambda}_2}). \quad (8)$$

Решение  $\xi = 0$  соответствует нормальной фазе. Ненулевое решение, существование которого свидетельствует о появлении бозе-конденсата, может быть получено из уравнения

$$Z^{-1} E^{-1} |t'_0| (e^{-\beta \tilde{\lambda}_0} - e^{-\beta \tilde{\lambda}_2}) = 1. \quad (9)$$

Переходя к пределу  $\xi \rightarrow 0$ , приходим к уравнению кривой (на плоскости  $(\Theta, \mu)$ ), на которой параметр порядка для SF-фазы (фазы с бозе-конденсатом) обращается в ноль:

$$\frac{|t'_0|}{\delta - \mu} \frac{1 - e^{\beta(\mu - \delta)}}{1 + e^{\beta\mu} + e^{\beta(\mu - \delta)}} = 1. \quad (10)$$

Данное уравнение совпадает с уравнением спинодали (см. ниже); оно определяет линию переходов второго рода из NO- в SF-фазу при условии, однако, что реализуется именно такой переход.

Спинодали на плоскости  $(\Theta, \mu)$ , полученные путем численного решения уравнения (10), приведены в работе [23]. Неустойчивость по отношению к образованию бозе-конденсата возникает при  $\delta < |t'_0|$ . При  $\delta < |t'_0|/2$  и  $\mu > 0$  с понижением температуры наблюдается обратный ход спинодали. Возвращение в NO-фазу при этом, однако, не происходит. Об этом свидетельствует поведение параметра порядка  $\xi$ , определяемого уравнением (9). Как показано в работе [23], в области  $\mu < 0$  ненулевые значения  $\xi$  возникают плавно путем перехода второго рода, в то время как

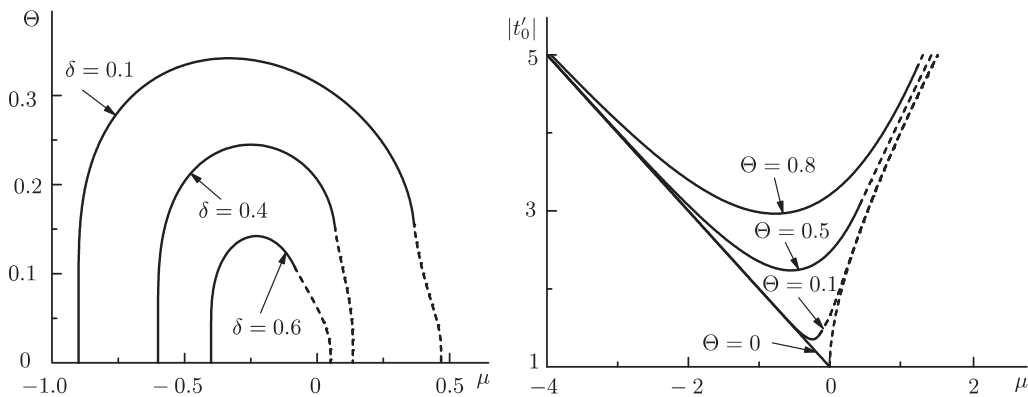


Рис. 1. Фазовые диаграммы  $(\Theta, \mu)$  (где  $|t'_0| = 1$ ) при различных значениях  $\delta$  и фазовые диаграммы  $(|t'_0|, \mu)$  (где энергетические величины даны в единицах  $\delta$ ) при различных температурах. Сплошная линия соответствует фазовым переходам второго рода, а штриховая – переходам первого рода.

в области  $\mu > 0$  и при достаточно низких температурах на кривой  $\xi(\mu)$  имеется S-образный изгиб, что указывает на переход первого рода. Линия такого перехода определяется из условия равенства термодинамических потенциалов  $\Omega = -\Theta \ln Z$  для NO- и SF-фаз. Изменение рода перехода и расположение соответствующих трикритических точек проиллюстрировано на рис. 1, где изображены фазовые диаграммы  $(\Theta, \mu)$  при различных значениях  $\delta$  и фазовые диаграммы  $(|t'_0|, \mu)$  при различных значениях  $\Theta$ .

В отличие от стандартной, т. е. двухуровневой, модели жестких бозонов (где перенос бозе-частиц происходит в основной зоне, возбужденные локальные состояния частиц не учитываются, а фазовые переходы в SF-фазу являются всегда переходами второго рода), фазовые диаграммы, представленные на рис. 1, асимметричны. В пределе  $T \rightarrow 0$  (см. диаграмму  $(|t'_0|, \mu)$ ) переходы первого рода происходят при  $\mu = \mu^* = (\sqrt{\delta} - \sqrt{|t'_0|})^2$ , в то время как переходы второго рода – при  $\mu = \delta - |t'_0|$ .

Рассмотрим теперь картину NO–SF перехода, когда фиксируется средняя концентрация бозонов. Используем связь между концентрацией частиц и их химическим потенциалом, которую легко установить, исходя из определения  $n = \langle n_i^b + n_i^c \rangle$  и соотношения

$$\langle X_i^{11} + X_i^{22} \rangle = \langle \tilde{X}_i^{11} \rangle + \langle \tilde{X}_i^{00} \rangle \sin^2 \vartheta + \langle \tilde{X}_i^{22} \rangle \cos^2 \vartheta. \quad (11)$$

Поскольку при переходе первого рода параметр  $\xi$  изменяется скачкообразно, будет также иметь место скачок концентрации  $n$ . Если зафиксировать  $n$  в пределах скачка, то произойдет расслоение на фазы с разными концентрациями:  $n_{\text{NO}}$  для фазы с  $\xi = 0$  и  $n_{\text{SF}}$  для фазы с  $\xi \neq 0$ , причем  $n_{\text{NO}} > n_{\text{SF}}$ . Фазовые диаграммы в режиме  $n = \text{const}$  представлены на рис. 2. Как видно из диаграммы  $(\Theta, n)$ , расслоение на NO- и SF-фазы происходит при температурах ниже трикритической и в случае достаточно высоких концентраций бозонов. На диаграмме  $(|t'_0|, n)$  при разных температурах показаны области существования NO- и SF-фаз, а также фазового расслоения.

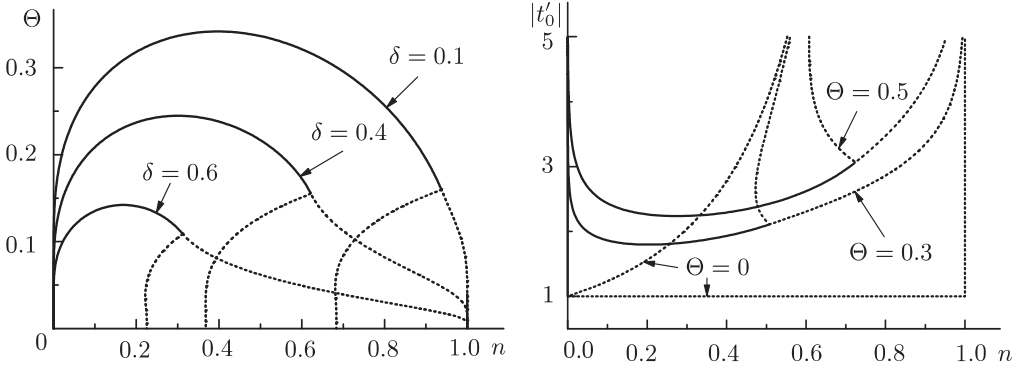


Рис. 2. Фазовые диаграммы  $(\Theta, n)$  (где  $|t'_0| = 1$ ) и фазовые диаграммы  $(|t'_0|, n)$  (где энергетические величины даны в единицах  $\delta$ ) в режиме  $n = \text{const}$ . Сплошная линия соответствует фазовым переходам второго рода, а пунктирная – границам области расслоения фаз.

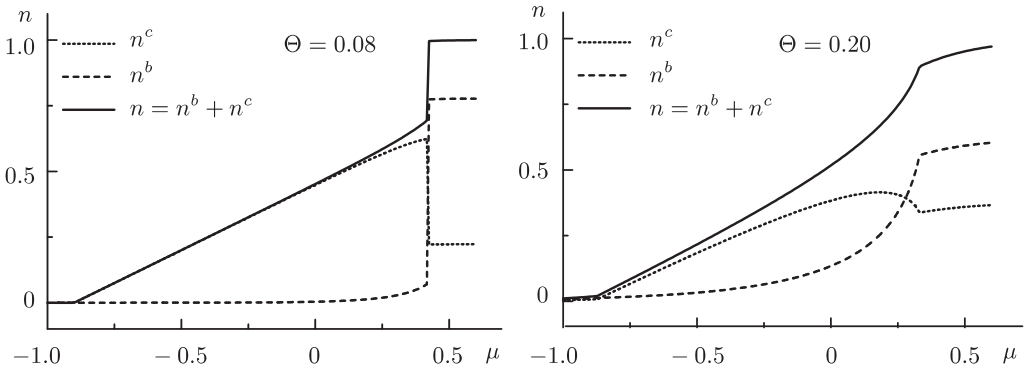


Рис. 3. Графики зависимостей  $\langle n^b \rangle$  и  $\langle n^c \rangle$  от  $\mu$  при температурах ниже и выше трикритической ( $\delta = 0.1, |t'_0| = 1$ ).

Формула (11) совместно с тривиальным соотношением  $\langle X_i^{11} \rangle = \langle \tilde{X}_i^{11} \rangle$  позволяет также рассчитать отдельно концентрации бозе-частиц в основном и возбужденном состояниях:  $\langle n^b \rangle = \langle X^{11} \rangle, \langle n^c \rangle = \langle X^{22} \rangle$ . Графики зависимостей  $\langle n^b \rangle$  и  $\langle n^c \rangle$  от  $\mu$  при разных температурах приведены на рис. 3. Квантовое перемешивание состояний в SF-фазе, сопровождающее бозе-конденсацию, приводит к тому, что заселенность возбужденного уровня превышает заселенность основного. При  $T = 0$  эффект максимален,  $\langle n^b \rangle = 0$  и  $n = \langle n^c \rangle$ . В свою очередь наличие бозонов в возбужденном состоянии, где возможно их движение по решетке, является необходимым условием того, что произошла бозе-конденсация.

Заметим, что в случае  $t'_0 > 0$  при переходе в SF-фазу возникает “модулированный” конденсат с параметром порядка  $\langle c_Q \rangle \neq 0$ , где  $\vec{Q}$  – волновой вектор на границе зоны Бриллюэна. Термодинамика фазового перехода остается при этом такой же, как и для  $t'_0 < 0$  (с заменой  $|t'_0| \rightarrow |t'_Q|$  в полученных выражениях).

#### 4. ФУНКЦИИ ГРИНА И БОЗОННЫЙ СПЕКТР В ПХФ

Определим одночастичную функцию Грина  $\langle\langle c|c^+ \rangle\rangle \equiv \langle\langle X^{02}|X^{20} \rangle\rangle$ , воспользовавшись псевдоспиновым представлением (7) для  $X$ -операторов и записав уравнения движения с гамильтонианом (4) для компонент псевдоспина. После линеаризации данных уравнений в духе ПХФ (что соответствует расщеплению функции Грина высших порядков, аналогичному расщеплению Тябликова) получим

$$\begin{aligned} [\sigma_i^x, \hat{H}] &= iE\sigma_i^y + 2i\langle\sigma^z\rangle \sum_j t'_{ij}\sigma_j^y, \\ [\sigma_i^y, \hat{H}] &= -iE\sigma_i^x - 2i\langle\sigma^z\rangle \cos 2\vartheta \sum_j t'_{ij}(\sigma_j^x \cos 2\vartheta - \sigma_j^z \sin 2\vartheta), \\ [\sigma_i^z, \hat{H}] &= 0. \end{aligned}$$

Здесь коммутаторы рассчитываются с полным гамильтонианом (4). Мы учли, что  $\langle\sigma^x\rangle = \langle\sigma^y\rangle = 0$ ,  $\langle\sigma^z\rangle \neq 0$ , причем  $\xi = \langle\sigma^z\rangle \sin 2\vartheta$ . В приближении среднего поля  $\langle\sigma^z\rangle = (2Z)^{-1}(e^{-\beta\lambda_0} - e^{-\beta\lambda_2})$ .

Поскольку в принятом приближении оператор  $\sigma_i^z$  коммутирует с гамильтонианом, двухвременные функции Грина  $\langle\langle \sigma_i^z | \sigma_{i'}^\alpha \rangle\rangle$  и  $\langle\langle \sigma_i^\alpha | \sigma_{i'}^z \rangle\rangle$ , где  $\alpha = x, y, z$ , равны нулю. Уравнения для функций Грина на операторах  $\sigma^x$  и  $\sigma^y$  разбиваются на две пары:

$$\begin{aligned} \hbar\omega \langle\langle \sigma_i^x | \sigma_{i'}^x \rangle\rangle_\omega &= iE \langle\langle \sigma_i^y | \sigma_{i'}^y \rangle\rangle_\omega + 2i\langle\sigma^z\rangle \sum_j t'_{ij} \langle\langle \sigma_j^y | \sigma_{i'}^x \rangle\rangle_\omega, \\ \hbar\omega \langle\langle \sigma_i^y | \sigma_{i'}^x \rangle\rangle_\omega &= -i\frac{\hbar}{2\pi} \delta_{ii'} - iE \langle\langle \sigma_i^x | \sigma_{i'}^x \rangle\rangle_\omega - 2i\langle\sigma^z\rangle \cos^2 2\vartheta \sum_j t'_{ij} \langle\langle \sigma_j^x | \sigma_{i'}^x \rangle\rangle_\omega, \end{aligned}$$

и аналогично для  $\langle\langle \sigma_i^x | \sigma_{i'}^y \rangle\rangle_\omega$ ,  $\langle\langle \sigma_i^y | \sigma_{i'}^y \rangle\rangle_\omega$ . После фурье-перехода к волновым векторам данные уравнения легко решаются. В результате, учитывая соотношения (7), приходим к выражению для бозонной функции Грина, которое удобно представить в виде разложения на простые дроби:

$$\langle\langle c|c^+ \rangle\rangle_{q,\omega} = \frac{\hbar}{2\pi} \langle\sigma^z\rangle \left[ \frac{\cos 2\vartheta + \Phi_q}{\hbar\omega - \varepsilon_q} + \frac{\cos 2\vartheta - \Phi_q}{\hbar\omega + \varepsilon_q} \right], \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_q &= \frac{1}{2\varepsilon_q} [E(\cos^2 2\vartheta + 1) + 4\langle\sigma^z\rangle t'_q \cos^2 2\vartheta], \\ \varepsilon_q &= [(E + 2\langle\sigma^z\rangle t'_q)(E + 2\langle\sigma^z\rangle t'_q \cos^2 2\vartheta)]^{1/2}. \end{aligned}$$

Формально данный результат совпадает с выражением для аналогичной функции Грина в обычной модели жестких бозонов (см., например, статью [21]). Отличие, однако, состоит в том, что среднее  $\sigma^z$  и угол  $\vartheta$  определяются в нашем случае из трехуровневой (а не двухуровневой) задачи.

Для НО-фазы  $\xi = 0$ ,  $\vartheta = 0$ , и формула (12) упрощается:

$$\langle\langle c|c^+ \rangle\rangle_{q,\omega} = \frac{\hbar}{\pi} \frac{\langle\sigma^z\rangle}{\hbar\omega - E - 2\langle\sigma^z\rangle t'_q}, \quad (13)$$



причем здесь  $E = \delta - \mu$  и

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{1 - e^{\beta(\mu - \delta)}}{1 + e^{\beta\mu} + e^{\beta(\mu - \delta)}}.$$

Знаменатель выражения (13) при  $\omega = 0$  и  $\vec{q} = 0$  обращается в ноль, если выполняется условие  $\delta - \mu = 2\langle \sigma^z \rangle |t'_0|$ , определяющее неустойчивость нормальной фазы по отношению к спонтанному нарушению симметрии и появлению бозе-конденсата. Как известно [8], критерием такой неустойчивости является расходимость функции  $\langle\langle c|c^+ \rangle\rangle_{q=0, \omega=0}$  при нулевом значении волнового вектора и при нулевой частоте. Указанное выше условие задает линию спинодали и в точности совпадает с уравнением (10).

Полнос функции (13) характеризует одночастичный спектр NO-фазы:

$$\varepsilon_q^{(\text{NO})} = \delta - \mu + 2\langle \sigma^z \rangle t'_q.$$

Если  $t'_0 < 0$ , то минимальное значение энергии в зоне достигается при  $\langle \sigma^z \rangle > 0$  (назовем это случаем А) в точке  $\vec{q} = 0$ , а при  $\langle \sigma^z \rangle < 0$  (случай Б) энергия  $\varepsilon_q^{(\text{NO})}$  в этой же точке максимальна<sup>1</sup>). В первом из этих случаев химический потенциал расположен под дном зоны, и концентрация бозонов является незначительной ( $n \rightarrow 0$  при  $\Theta \rightarrow 0$ ); во втором химический потенциал лежит над верхним краем зоны, которая практически заполнена (см. ниже рис. 4). Можно говорить соответственно о “частицах” и “дырках”.

Параметр  $\Delta = |\delta - 2\langle \sigma^z \rangle |t'_0| - \mu|$  – так называемая щель в спектре – определяет расстояние от дна (в случае А) или от верха (в случае Б) зоны до уровня химического потенциала. Он стремится к нулю при переходе на линию спинодали (линию переходов второго рода). В случае NO-SF перехода первого рода, который наступает раньше, чем могла бы реализоваться неустойчивость (описываемая уравнением  $\delta - \mu = 2\langle \sigma^z \rangle |t'_0|$ ), щель  $\Delta$  остается конечной. При малых  $\vec{q}$  закон дисперсии  $\varepsilon_q^{(\text{NO})}$  для центросимметричных решеток является квадратичным.

В случае SF-фазы из формулы (8) и уравнения (9) вытекает соотношение  $E = 2|t'_0| \langle \sigma^z \rangle$ . С его помощью, исключая из (8) параметр  $\xi$ , приходим к уравнению

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{\text{sh}(\beta |t'_0| \langle \sigma^z \rangle)}{e^{\beta(\delta + \mu)/2} + 2 \text{ch}(\beta |t'_0| \langle \sigma^z \rangle)},$$

из которого находится среднее  $\langle \sigma^z \rangle$  в SF-фазе. Спектр возбуждений в данной фазе состоит из двух ветвей  $\pm \varepsilon_q^{(\text{SF})}$  и определяется выражением

$$\varepsilon_q^{(\text{SF})} = 2|\langle \sigma^z \rangle| \left[ (|t'_0| + t'_q) \left( |t'_0| + t'_q \frac{(\delta - \mu)^2}{4|t'_0|^2 \langle \sigma^z \rangle^2} \right) \right]^{1/2},$$

которое по внешнему виду является таким же, как и для обычной (двухуровневой) модели жестких бозонов [21] (переход к двухуровневому случаю можно осуществить, устремив формально  $\delta$  к  $-\infty$ ).

<sup>1</sup>) В случае  $t'_0 > 0$  при  $\langle \sigma^z \rangle > 0$  (при  $\langle \sigma^z \rangle < 0$ ) энергия  $\varepsilon_q^{(\text{NO})}$  минимальна (максимальна) в точке  $\vec{q} = \vec{Q}$ .

Энергия  $\varepsilon_q^{(\text{SF})}$  обращается в ноль при  $\vec{q} \rightarrow 0$  во всей области существования SF-фазы. При малых значениях  $q$  и квадратичном законе дисперсии для  $t'_q$  зависимость  $\varepsilon_q^{(\text{SF})}$  от  $q$  является линейной. Такое возбуждение акустического типа характерно для фазы с бозе-конденсатом. Оно проявляется в модели БХ как при сильной ( $U \gg t$ ), так и при слабой ( $U \ll t$ ) связи, переходя в последнем случае в боголюбовскую акустическую моду [24].

Статистические веса положительной и отрицательной ветвей различаются между собой и изменяются в зависимости от температуры и химического потенциала. Это проявляется в поведении одноузельной спектральной плотности (“плотности состояний”)  $\rho(\omega) = (1/N) \sum_q (-2 \text{Im} \langle \langle c^+ \rangle \rangle_{q, \omega + i\epsilon})$ , которую можно рассчитать, если ввести невозмущенную плотность состояний  $\rho_0(z) = (1/N) \sum_q \delta(z - \gamma_q)$ , где  $\gamma_q = -t'_q/|t'_0|$ . На рис. 4 приведены графики функции  $\tilde{\rho}(\hbar\omega) \equiv \hbar^{-1} \rho(\omega - \mu/\hbar)$ , рассчитанные с использованием табулированной функции  $\rho_0(z)$  для простой кубической решетки. Показано, как изменяется спектральная плотность  $\tilde{\rho}(\hbar\omega)$ , когда при фиксированной температуре химический потенциал проходит из одной области NO-фазы в другую, пересекая область SF-фазы. В левой области ( $\mu < \mu_1$ , случай А) спектральная плотность  $\tilde{\rho}$  положительна, в правой области ( $\mu > \mu_2$ , случай Б) отрицательна. Это согласуется с изменением характера возбуждений: мы имеем дело с “частицами” или с “дырками” соответственно. В области SF-фазы функция  $\tilde{\rho}(\hbar\omega)$  обращается в ноль при  $\hbar\omega = \mu$ , изменяя при этом свой знак. Такое ее поведение является характерным признаком наличия бозе-конденсата. Щель в спектре отсутствует, и пороговая энергия возбуждений, отсчитываемая от уровня химического потенциала, равна нулю.

Различие между формой спектральной плотности в NO- и SF-фазах было отмечено ранее для простой модели БХ (см. работу [9]), где NO-SF переход относится ко второму роду и функция  $\tilde{\rho}(\hbar\omega)$  изменяется плавно. В нашем случае, при переходе первого рода, общий вид спектральной плотности в точке такого перехода изменяется скачкообразно (рис. 4).

Ширина одночастичного спектра в областях  $\mu \leq \mu_1$  и  $\mu \geq \mu_2$  является различной. В NO-фазе она определяется соотношением  $\Delta\varepsilon = 4|t'_0| |\langle \sigma^z \rangle|$  и связана с заселенностями основного и возбужденного состояний, так как в этой фазе  $2\langle \sigma^z \rangle = 1 - \langle n^b \rangle - 2\langle n^c \rangle$ . Это подтверждается данными расчета функции  $\tilde{\rho}$  (см. рис. 4).

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненное исследование показывает, что в модели БХ при переносе частиц только по возбужденным локальным состояниям род фазового перехода NO-SF может изменяться со второго на первый. Сам переход реализуется, если энергия возбуждения не превышает параметр перескока  $|t'_0|$  частиц; область существования SF-фазы ограничена интервалом значений химического потенциала  $-|t'_0| < \mu < |t'_0|$ .

Рассмотрение проведено в предельном случае бесконечного хаббардовского отталкивания частиц, что исключает двух- и более кратное заполнение локальных позиций в решетке. Такое ограничение соответствует модели жестких бозонов, которая в данной ситуации является трехуровневой, а не двухуровневой как обычно. В результате нарушается симметрия “частица”–“дырка”, что проявляется в асимметрии фазовых диаграмм. Переходы первого рода возможны лишь в области  $\mu > 0$  и связаны с образованием конденсата “дырок” (именно последний участвует в фазовом расслоении при фиксированной концентрации бозонов). В то же время при

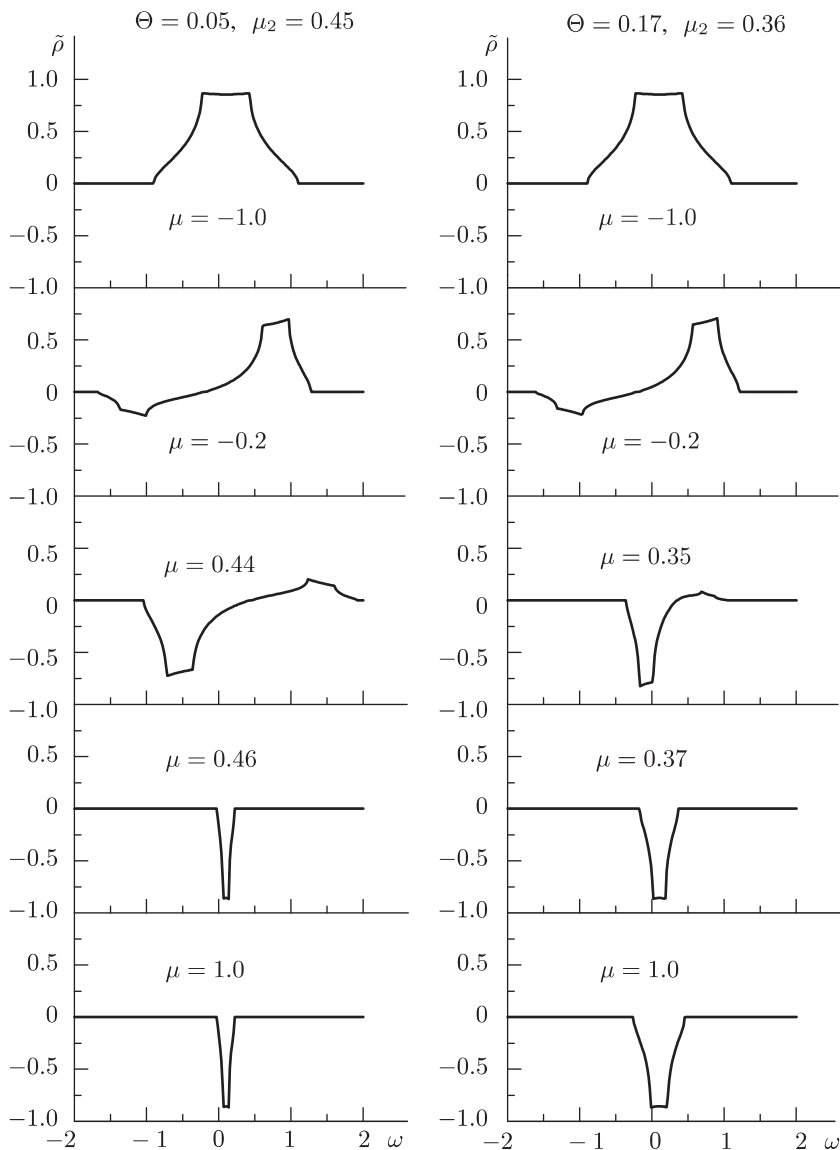


Рис. 4. Графики функции  $\tilde{\rho}(\hbar\omega)$  для простой кубической решетки при температурах выше и ниже трикритической и разных значениях химического потенциала; указаны его значения, при которых происходит фазовый переход первого (для  $\Theta = 0.05$ ) или второго (для  $\Theta = 0.17$ ) рода ( $\delta = 0.1, |t'_0| = 1$ ).

переходах второго рода, которые происходят при  $\mu < 0$ , возникает бозе-конденсат “частиц”. Асимметричным (в указанном выше смысле) является и поведение спектра возбуждений, а также соответствующей спектральной плотности.

Спектр возбуждений типа “дырок” при концентрациях  $n \leq 1$  или “частиц” при  $n \geq 0$  имеет зонный характер. Перестройка спектра (исчезновение щели и изменение

закона дисперсии при  $\vec{q} \sim 0$  с квадратичного на линейный) в точке перехода первого рода является скачкообразной. В спектральной плотности возникает при этом отрицательная компонента. В эксперименте такие особенности бозонного спектра могут быть изучены при помощи радиочастотной токовой туннельной спектроскопии или путем исследования отклика на частотную модуляцию оптической решетки (см. работы [9], [25]).

Следует заметить, что фазовые диаграммы (см. рис. 1, 2) близки по своей форме к диаграммам, полученным в рамках модели БХ для бозе-атомов со спином  $S = 1$  в оптических решетках [26]. Роль возбужденных уровней является похожей; отличие, однако, состоит в иной природе одноузельного спектра. В нашем случае отсутствует спиновое расщепление, зато включен в рассмотрение возбужденный уровень. Влияние возбужденных зон на бозе-конденсацию в основной ( $s$ -) зоне (при учете переноса по  $s$ -состояниям) при конечном  $U$  рассматривалось также в работе [27].

Возможность реализации рассмотренных нами фазовых переходов первого рода и связанной с ними перестройки спектра в реальных квантовых решеточных бозе-системах связана с выполнением вышеупомянутых условий, которым должны удовлетворять параметры модели. Энергию возбуждения  $\delta$  в случае оптических решеток можно изменять эффективным образом, добавляя ферми-атомы [18]. Это создает благоприятные предпосылки, но при этом нужна достаточно анизотропная решетка, чтобы снять орбитальное вырождение. В случае адсорбированных атомов (например, когда атомы водорода расположены на поверхности Ni(110)) энергия  $\delta$  может иметь тот же порядок, что и ширина зоны туннельных перескоков [13], что делает возможной неустойчивость относительно возникновения бозе-конденсата. Следует вместе с тем заметить, что последовательное описание квантовой делокализации в таких объектах требует учета взаимодействия с фононами, а также нелокального (междуузельного) взаимодействия между частицами.

### Список литературы

- [1] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, D. S. Fisher, *Phys. Rev. B*, **40**:1 (1989), 546–570.
- [2] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, I. Bloch, *Nature*, **415**:6867 (2002), 39–44.
- [3] M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hänsch, I. Bloch, *Nature*, **419**:6902 (2002), 51–54, arXiv: cond-mat/0207196.
- [4] M. Nishijima, H. Okuyama, N. Takagi, T. Aruga, W. Brenig, *Surf. Sci. Rep.*, **57**:5–6 (2005), 113–156.
- [5] P. D. Reilly, R. A. Harris, K. B. Whaley, *J. Chem. Phys.*, **95**:11 (1991), 8599–8615.
- [6] T. S. Mysakovych, V. O. Krasnov, I. V. Stasyuk, *Ukr. J. Phys.*, **55**:2 (2010), 228–234.
- [7] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, T. V. Ramakrishnan, *Europhys. Lett.*, **22**:4 (1993), 257–264.
- [8] S. Konabe, T. Nikuni, M. Nakamura, *Phys. Rev. A*, **73**:3 (2006), 033621, 12 pp., arXiv: cond-mat/0407229.
- [9] Y. Ohashi, M. Kitaura, H. Matsumoto, *Phys. Rev. A*, **73**:3 (2006), 033617, 5 pp., arXiv: cond-mat/0510725.
- [10] M. Iskin, J. K. Freericks, *Phys. Rev. A*, **79**:5 (2009), 053634, 9 pp., arXiv:0903.0845.
- [11] B. Capogrosso-Sansone, Ş. G. Söyler, N. Prokof'ev, B. Svistunov, *Phys. Rev. A*, **77**:1 (2008), 015602, 4 pp., arXiv:0710.2703.

- [12] K. Byczuk, D. Vollhardt, *Phys. Rev. B*, **77**:23 (2008), 235106, 14 pp., arXiv:0706.0839.
- [13] M. J. Puska, R. M. Nieminen, *Surf. Sci.*, **157**:2–3 (1985), 413–435.
- [14] W. Brenig, *Surf. Sci.*, **291**:1–2 (1993), 207–214.
- [15] T. Müller, S. Fölling, A. Widera, I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.*, **99**:20 (2007), 200405, 4 pp., arXiv:0704.2856.
- [16] A. Isacsson, S. M. Girvin, *Phys. Rev. A*, **72**:5 (2005), 053604, 25 pp., arXiv:cond-mat/0506622.
- [17] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **285**:1403 (1965), 542–560.
- [18] W. V. Liu, C. Wu, *Phys. Rev. A*, **74**:1 (2006), 013607, 9 pp., arXiv:cond-mat/0601432.
- [19] J.-B. Bru, T. C. Dorlas, *J. Statist. Phys.*, **113**:1–2 (2003), 177–196.
- [20] T. Dorlas, L. Pastur, V. Zagrebnov, *J. Statist. Phys.*, **124**:5 (2006), 1137–1178, arXiv:math-ph/0603047.
- [21] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.*, **62**:1 (1990), 113–171.
- [22] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, *Докл. АН СССР*, **126**:1 (1959), 53–56.
- [23] I. V. Stasyuk, O. V. Velychko, *Condens. Matter Phys.*, **14**:1 (2011), 1–14, arXiv:1103.5662.
- [24] C. Menotti, N. Trivedi, *Phys. Rev. B*, **77**:23 (2008), 235120, 13 pp., arXiv:0801.4672.
- [25] R. Sensarma, K. Sengupta, S. Das Sarma, *Phys. Rev. B*, **84**:8 (2011), 081101(R), 4 pp., arXiv:1102.0780.
- [26] R. V. Pai, K. Sheshadri, R. Pandit, *Phys. Rev. B*, **77**:1 (2008), 014503, 10 pp., arXiv:0705.2080.
- [27] J. Larson, A. Collin, J.-P. Martikainen, *Phys. Rev. A*, **79**:3 (2009), 033603, 7 pp., arXiv:0811.1537.

Поступила в редакцию 24.02.2011