

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк
Олег Володимирович Величко

НЕЕРГОДИЧНІСТЬ ТА БОЗЕ-КОНДЕНСАЦІЯ У ДВОСТАНОВІЙ МОДЕЛІ
БОЗЕ-ХАББАРДА В ГРАНИЦІ ЖОРСТКИХ БОЗОНІВ

Роботу отримано 19 листопада 2011 р.

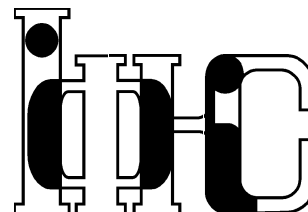
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-11-07U

І.В.Стасюк, О.В.Величко

НЕЕРГОДИЧНІСТЬ ТА БОЗЕ-КОНДЕНСАЦІЯ
У ДВОСТАНОВІЙ МОДЕЛІ БОЗЕ-ХАББАРДА
В ГРАНИЦІ ЖОРСТКИХ БОЗОНІВ

ЛЬВІВ

УДК: 536.763, 536.764, 537.9

PACS: 03.75.Nh, 03.75.Lm, 64.70.Tg, 71.35.Lk, 37.10.Jk, 67.85.-d

Неергодичність та бозе-конденсація у двостановій моделі Бозе-Хаббарда в границі жорстких бозонів

I.V.Стасюк, O.B.Величко

Анотація. Досліджується бозе-конденсація в моделі Бозе-Хаббарда з двома локальними станами при переносі бозонів лише у збудженій зоні. З метою врахування неергодичності одночастинкову спектральну густину отримано в наближенні хаотичних фаз за допомогою температурних бозонних функцій Гріна. Неергодичний внесок до функції розподілу частинок за імпульсом (пов'язаний зі статичними флуктуаціями густини) суттєво наростає і стає співмірним з ергодичною частиною в надплинній фазі біля трікритичної точки.

Non-ergodicity and the Bose-Einstein condensation in the two-state Bose-Hubbard model in the hard-core boson limit

I.V.Stasyuk, O.V.Velychko

Abstract. The Bose-Einstein condensation in the Bose-Hubbard model with two local states and the particle hopping in the excited band only is investigated. For the purpose of a consideration of the non-ergodicity the single-particle spectral density is calculated in the random phase approximation by means of the temperature boson Green functions. The non-ergodic contribution to the momentum distribution function of particles (connected with the static density fluctuations) increases significantly and becomes comparable with the ergodic one in the superfluid phase near the tricritical point.

Подається в Journal of Physics: Condensed Matter

Submitted to Journal of Physics: Condensed Matter

1. Вступ

Модель Бозе-Хаббарда (БХ) [1] широко застосовується для опису термодинаміки та динаміки бозе-атомів у оптичних ґратках [2, 3]. Важливою особливістю таких систем є фазовий перехід у фазу з бозе-конденсатом при дуже низьких температурах. В результаті система може перебувати або в нормальній (NO) фазі (при $T = 0$ – стан т.зв. мотівського діелектрика, MI), або в фазі, де є бозе-конденсат (надплинний стан, SF). Модель БХ використовується й у інших областях, де такий підхід є адекватним: в теорії явищ, пов'язаних з квантовою делокалізацією атомів H , адсорбованих на поверхні переходних металів [4]; при описі квантової поверхні чи об'ємної дифузії легких частинок [5]; при дослідженні термодинаміки інтеркаляції домішкових атомів у кристалічних системах [6].

Вивченню моделі БХ присвячено значне число робіт. Серед перших слід згадати роботу [7], де розглянуто термодинаміку моделі в наближенні середнього поля (НСП) за переносом частинок (при точному врахуванні хаббардівського відштовхування). Описано фазовий NO-SF перехід у випадку, коли частинки в локальних позиціях перебувають в основному коливному стані, і показано, що він є переходом другого роду. Одним з напрямків узагальнення і розвитку моделі БХ є врахування збуджених коливних станів бозонів у потенціальних мінімумах у вузлах ґратки. В задачах квантової делокалізації або дифузії міжвузлові перескоки по збуджених станах є значно імовірніші [8, 9]; це ж стосується і оптичних ґраток [10]. Однак, можливість участі збуджених станів у бозе-конденсації розглядалась здебільшого в плані можливості створення їх достатньої заселеності шляхом оптичної накачки і утворення бозе-конденсату в збудженій зоні [11]. Орбітальне виродження збудженого p -стану може при цьому приводити до появи конденсату особливого типу.

Детальний аналіз переходу в фазу з бозе-конденсатом в моделі БХ з двома локальними станами при переносі бозонів лише в збудженій зоні виконано у роботах [12, 13]. В основу розгляду покладено НСП і в границі жорстких бозонів вивчено нестійкість, пов'язану з NO-SF переходом, який відбувається при енергіях збуджень, менших ніж значення модуля параметра перескоку частинок. Досліджено умови, за яких рід фазового переходу змінюється з другого на перший; наведено відповідні фазові діаграми (Θ, μ) і $(|t'_0|, \mu)$. Продемонстровано можливість розшарування на NO і SF фази при фіксованій середній концентрації бозонів. В наближенні хаотичних фаз (НХФ) проведено розрахунок двочасової бозонної функції Гріна (ФГ) і одночастинкової спектральної густини. Проаналізовано зміни в спектрі збуджень типу «частинка» або «дірка» в області NO-SF переходу.

Не всі фізичні багаточастинкові системи задовольняють припущення про ергодичність, зокрема, воно може не виконуватися при спонтанно-му порушенні симетрії. Це означає, що у фазовому просторі такої системи існують області, куди не заходить траєкторія точки, яка описує еволюцію багаточастинкової системи. На практиці неергодичність веде до відмінності між ізотермічним та ізольованим відгуками (сприйнятливостями) системи, що пов'язана з наявністю у першому з них вкладу на нульовій частоті. У даній ситуації використання ізольованого відгуку Кубо веде до неправильних значень таких вимірюваних величин як стигтивіть, теплоємність та сприйнятливість для систем, що описуються моделлю Ізінга [14, 15] (нульовий відгук Кубо), псевдоспін-електронною моделлю [16] та моделлю Фалікова-Кімбала (саме неергодичний вклад дає розбіжність, яка веде до фазового переходу [17, 18]). Модель БХ у границі жорстких бозонів теж належить до класу неергодичних. Однак, всі згадані проблеми легко вирішуються при використанні у розрахунках температурних (мацубарівських) ФГ [19] замість їх двочасових (зубарівських) аналогів (див., наприклад, методику розрахунку багаточасових кореляційних функцій [20]).

У другому розділі цього препринту представлено гамільтоніан моделі, вмотивовано відповідні наближення, спрощення, перехід до псевдоспінового представлення та рівняння для параметрів самоузгодження в наближенні середнього поля (НСП) (ми повторимо частину викладу робіт [12, 13], оскільки це необхідно для виводу отриманих тут результатів). Третій розділ присвячений розрахунку температурних ФГ для даної моделі в НХФ за допомогою рівняння Ларкіна. Отриманий на їх основі вираз для розподілу за імпульсами для частинок в збудженому стані окрім вкладів, що повністю відповідають попереднім результатам [13] на базі двочасових ФГ, містить неергодичний внесок. Досліджено його роль і поведінку в залежності від значень параметрів моделі.

2. Термодинаміка моделі в границі жорстких бозонів

Гамільтоніан квантового граткового бозе-газу в моделі Бозе-Хаббарда враховує тунельні перескоки частинок між найближчими позиціями в гратці та взаємне відштовхування частинок, які знаходяться в одній потенціальній ямі, [1]:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} b_i^+ b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i. \quad (2.1)$$

Тут t_{ij} – параметр перескоку, U – енергія парного хаббардівської одноузлової взаємодії ($U > 0$), μ – хімічний потенціал, b_i^+, b_j – бозе-оператори народження та знищення частинок на i -му вузлі в основному коливному стані. При врахуванні, крім основного, першого збудженого стану і у випадку, коли беруться до уваги лише перескоки між збудженими станами в найближчих позиціях, гамільтоніан (2.1) узагальнюється у вигляді

$$\hat{H} = (\varepsilon - \mu) \sum_i b_i^+ b_i + (\varepsilon' - \mu) \sum_i c_i^+ c_i + \frac{U_b}{2} \sum_i n_i^b (n_i^b - 1) + \frac{U_c}{2} \sum_i n_i^c (n_i^c - 1) + U_{bc} \sum_i n_i^b n_i^c + \sum_{ij} t'_{ij} c_i^+ c_j, \quad (2.2)$$

де c_i^+, c_i – бозе-оператори частинок у збудженому стані, ε (ε') – енергія частинки в основному (збудженому) стані, U_b, U_c, U_{bc} – параметри хаббардівського відштовхування.

Використовуючи базис одноузлових станів $|i; n_i^b, n_i^c\rangle$, який формується числами заповнення частинок (власними значеннями операторів $n_i^b = b_i^+ b_i$ і $n_i^c = c_i^+ c_i$), можна ввести оператори Хаббарда [21]

$$X_i^{n, m; n', m'} \equiv |i; n, m\rangle \langle i; n', m'|. \quad (2.3)$$

Обмежимося надалі розглядом частинного випадку жорстких бозонів, коли виконується умова $n + m \leq 1$. В моделі це досягається шляхом переходу $U_b, U_c, U_{bc} \rightarrow \infty$. В даній границі одноузлова задача стає тривірневою з енергіями $\lambda_0 = 0, \lambda_1 = -\mu, \lambda_2 = \delta - \mu$. (використано такі скорочення для одноузлових станів: $|0\rangle \equiv |00\rangle, |1\rangle \equiv |10\rangle, |2\rangle \equiv |01\rangle$). Тут $\delta = \varepsilon' - \varepsilon$ – енергія переходу в збуджений локальний стан. Відповідно,

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

В результаті, гамільтоніан (2.2) в X -представленні набуває вигляду

$$\hat{H} = \sum_{ip} \lambda_p X_i^{pp} + \sum_{ij} t'_{ij} X_i^{20} X_j^{02}. \quad (2.4)$$

Оскільки бозе-конденсація відбувається в зоні, породженій перескоками частинок між збудженими станами в сусідніх позиціях (див. нижче), то параметром порядку в цьому випадку є середнє $\xi = \langle X_i^{20} \rangle = \langle X_i^{02} \rangle$ ($\xi = \langle c_i^+ \rangle = \langle c_i \rangle$) від операторів народження чи знищення бозонів.

Виділимо частину гамільтоніана (2.4), яка відповідає НСП

$$\hat{H}_{MF} = -N t'_0 \xi^2 + \sum_{ip} \lambda_p X_i^{pp} + t'_0 \xi \sum_i (X_i^{20} + X_i^{02}), \quad (2.5)$$

де t'_0 – фур'є-образ параметра перескоку t'_{ij} при $\bar{q} = 0$ (надалі розглядаємо $t'_0 < 0$, що стосується симетричних збуджених станів; для антисиметричних $t'_0 > 0$ [22]). Параметр ξ визначається з умови самоузгодження $\xi = Z^{-1} \text{Sp}[X_i^{20} \exp(-\beta \hat{H}_{\text{MF}})]$, де $Z = \text{Sp} \exp(-\beta \hat{H}_{\text{MF}})$.

Дане наближення відповідає точному розв'язку для випадку перескоків з безмежним радіусом дії. Строгий вивід даного твердження для стандартної моделі Бозе-Хаббарда подано в [23] (див. також [24]), базуючись на підході в дусі варіаційного метода Боголюбова-Тяблікова.

Повний гамільтоніан в результаті матиме вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{MF}} + \sum_{ij} t'_{ij} (X_i^{20} - \xi)(X_j^{02} - \xi). \quad (2.6)$$

Гамільтоніан середнього поля \hat{H}_{MF} можна привести до діагональної форми, здійснивши перетворення

$$\begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & 0 & -\sin \vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \vartheta & 0 & \cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\bar{0}\rangle \\ |\bar{1}\rangle \\ |\bar{2}\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

де

$$\cos 2\vartheta = (\delta - \mu)/E, \quad \sin 2\vartheta = 2|t'_0|\xi/E; \quad E = \sqrt{(\delta - \mu)^2 + 4(t'_0\xi)^2}. \quad (2.8)$$

В термінах операторів $\tilde{X}^{\mu\nu} = |\tilde{\mu}\rangle\langle\tilde{\nu}|$

$$\hat{H}_{\text{MF}} = -Nt'_0\xi^2 + \sum_{i\mu} \tilde{\lambda}_\mu \tilde{X}_i^{\mu\mu}. \quad (2.9)$$

Енергії одновузлових станів $\tilde{\lambda}_\mu$ у фазі з порушеною симетрією (коли $\xi \neq 0$), рівні $\tilde{\lambda}_{0,2} = \frac{1}{2}(\delta - \mu \mp E)$, $\tilde{\lambda}_1 = -\mu$.

Зручно ввести додаткові лінійні комбінації

$$\sigma_i^z = \frac{1}{2}(\tilde{X}_i^{00} - \tilde{X}_i^{22}), \quad \sigma_i^+ \equiv \sigma_i^x + i\sigma_i^y = \tilde{X}_i^{02}, \quad \sigma_i^- \equiv \sigma_i^x - i\sigma_i^y = \tilde{X}_i^{20}. \quad (2.10)$$

Оператори σ_i^α мають такі ж властивості, як і спінові оператори для $S = 1/2$ і аналогічні комутаційні співвідношення (з тою відмінністю, що антикомутатор операторів σ_i^+ і σ_i^- рівний $\tilde{X}_i^{00} + \tilde{X}_i^{22}$, а не одиниці, як у звичайному випадку).

У результаті, при переході до нового базису

$$X_i^{20} = \sin 2\vartheta \sigma_i^z + \cos 2\vartheta \sigma_i^x - i\sigma_i^y, \quad X_i^{02} = (X_i^{20})^\dagger, \quad (2.11)$$

а гамільтоніан середнього поля представиться як

$$\hat{H}_{\text{MF}} = N \left(\frac{\delta - \mu}{2} - t'_0 \xi^2 \right) - \frac{\delta + \mu}{2} \sum_i \tilde{X}_i^{11} - E \sum_i \sigma_i^z. \quad (2.12)$$

Гамільтоніан (2.6), записаний через оператори (2.10), можна розглядати як узагальнення гамільтоніана стандартної моделі жорстких бозонів [25] на трирівневий випадок. Присутність третього рівня $|\bar{1}\rangle$ не проявляється в динаміці псевдоспінів, але впливає на заселеності рівнів $|\bar{0}\rangle$ і $|\bar{2}\rangle$, визначаючи таким чином відмінність в термодинаміці моделі. Разом з тим, використання формалізму псевдоспінних операторів дозволяє застосувати традиційну схему розрахунку в ПХФ ФГ для спінових моделей, яка походить від відомого розщеплення Тяблікова [26], запропонованого для моделі Гайзенберга.

Коротко зупинимося на термодинаміці трирівневої моделі в НСП. Усереднюючи за розподілом Гіббса з гамільтоніаном (2.9) і враховуючи, що середні від поперечних компонент псевдоспіна рівні нулю, отримуємо рівняння для параметра порядку $\xi = \langle X_i^{02} \rangle$:

$$\xi = Z^{-1} E^{-1} |t'_0| \xi \left(e^{-\beta \tilde{\lambda}_0} - e^{-\beta \tilde{\lambda}_2} \right). \quad (2.13)$$

Розв'язок $\xi = 0$ відповідає нормальній фазі. Ненульове рішення, існування якого свідчить про появу бозе-кондесату, можна отримати з рівняння

$$Z^{-1} E^{-1} |t'_0| \left(e^{-\beta \tilde{\lambda}_0} - e^{-\beta \tilde{\lambda}_2} \right) = 1. \quad (2.14)$$

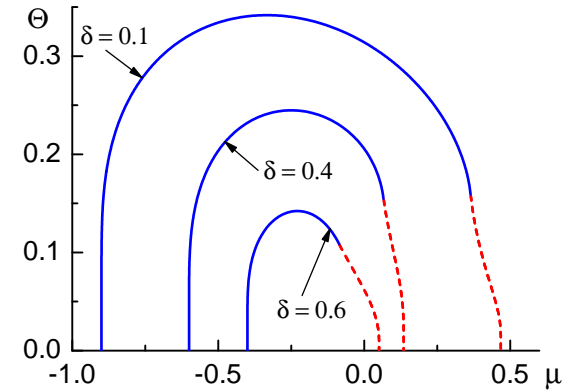


Рис. 1. Фазові діаграми (Θ, μ) при різних значеннях δ ($|t'_0| = 1$). Суцільна лінія відповідає фазовим переходам другого роду, а штрихова – переходам першого роду.

Як показано в [12], в області $\mu < 0$ ненульові значення ξ виникають плавно при переході другого роду, тоді як в області $\mu > 0$ і при достатньо низьких температурах на кривій $\xi(\mu)$ існує S-подібний вигин, що вказує на перехід першого роду. Лінія такого переходу визначалась з умови рівності термодинамічних потенціалів $\Omega = -\Theta \ln Z$ NO і SF фаз. Зміна роду переходу і розташування відповідних трикритичних точок проілюстровано на рис. 1.

На відміну від стандартної, тобто дворівневої моделі жорстких бозонів (де перенос бозе-частинок відбувається в основній зоні, збуджені локальні стани частинок не враховуються, а фазові переходи в SF фазу завжди є переходами другого роду), фазові діаграми, представлені на рис. 1, є асиметричними.

3. Розрахунок температурних функцій Гріна та виділення неергодичного внеску

Бозонний спектр та одноузлову спектральну густину для даної моделі розраховано в НХФ методом двочасових ФГ у роботі [13]. Нижче ми проведемо подібні розрахунки у тому ж наближенні, але методом температурних ФГ.

Оскільки ми припустили, що перескок частинок можливий лише між збудженими станами, то в плані динаміки наша модель відповідає моделі жорстких бозонів і достатньо розглядати лише температурні ФГ для операторів переходу між станами $|0\rangle$ і $|2\rangle$

$$\begin{aligned} \langle T_\tau X_i^{20}(\tau) X_j^{02}(\tau') \rangle &= \xi^2 + \langle T_\tau (X_i^{20} - \xi)_\tau (X_j^{02} - \xi)_{\tau'} \rangle, \\ \langle T_\tau X^{20} X^{02} \rangle_{q, \omega_n} &= \beta \xi^2 \delta(q) \delta(\omega_n) + \langle T_\tau (X^{20} - \xi)(X^{02} - \xi) \rangle_{q, \omega_n}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Використавши введене раніше «псевдоспінове» представлення (2.10), можна виразити (3.1) у вигляді

$$\begin{aligned} \langle T_\tau (X^{20} - \xi)(X^{02} - \xi) \rangle_{q, \omega_n} &= \sin^2 2\vartheta \mathcal{G}^{zz} + \frac{1}{4}(\cos^2 2\vartheta - 1) \mathcal{G}^{++} \\ &+ \frac{1}{4}(\cos 2\vartheta + 1)^2 \mathcal{G}^{+-} + \frac{1}{4}(\cos 2\vartheta - 1)^2 \mathcal{G}^{-+} + \frac{1}{4}(\cos^2 2\vartheta - 1) \mathcal{G}^{--} \\ &- \frac{1}{2}(\cos 2\vartheta + 1) \sin 2\vartheta (\mathcal{G}^{+z} + \mathcal{G}^{z-}) \\ &- \frac{1}{2}(\cos 2\vartheta - 1) \sin 2\vartheta (\mathcal{G}^{-z} + \mathcal{G}^{z+}), \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\mathcal{G}^{\alpha\beta} = \langle T_\tau (\sigma^\alpha - \langle \sigma^\alpha \rangle)_\tau (\sigma^\beta - \langle \sigma^\beta \rangle)_{\tau'} \rangle. \quad (3.3)$$

Температурні ФГ в НХФ можна отримати, скориставшись рівнянням Ларкіна

$$\mathcal{G}^{\alpha\beta} = \mathcal{G}_0^{\alpha\beta} + \sum_{\gamma\delta} \mathcal{G}_0^{\alpha\gamma} j^{\gamma\delta} \mathcal{G}^{\delta\beta}; \quad (3.4)$$

де незбурені ФГ виражаються через одноузлові ФГ та середні значення оператора псевдоспіну

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0^{+-} &= -2g^0(\omega_n) \langle \sigma_z \rangle_0, & \mathcal{G}_0^{zz} &= \beta b' \delta(\omega_n), \\ \mathcal{G}_0^{-+} &= -2g^0(-\omega_n) \langle \sigma_z \rangle_0, & g^0(\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n + E}; \\ b(\beta E) &\equiv \langle \sigma_z \rangle_0 = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta E}{2}, & b' &\equiv \frac{\partial b}{\partial(\beta E)} = \langle \sigma_z^2 \rangle_0 - \langle \sigma_z \rangle_0^2; \end{aligned} \quad (3.5)$$

а параметри ефективної взаємодії мають такий вигляд

$$\begin{aligned} j^{++}(q) &= j^{--}(q) = \frac{1}{2}(\cos^2 2\vartheta - 1)t'_q, \\ j^{+-}(q) &= j^{-+}(q) = \frac{1}{2}(\cos^2 2\vartheta + 1)t'_q, \\ j^{zz}(q) &= 2 \sin^2 2\vartheta t'_q, \\ j^{+z}(q) &= j^{z+}(q) = j^{-z}(q) = j^{z-}(q) = -\sin 2\vartheta \cos 2\vartheta t'_q. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Рівняння типу (3.4) для звичайної моделі жорстких бозонів було знайдено в роботі [27].

Розподіл частинок за імпульсами у збудженому стані можна отримати як суму по мацубарівських частотах

$$\bar{n}_q - \xi^2 \delta(q) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^-} \langle T_\tau (X^{20} - \xi)(X^{02} - \xi) \rangle_{q, \omega_n} \quad (3.7)$$

від температурної ФГ

$$\begin{aligned} \langle T_\tau (X^{20} - \xi)(X^{02} - \xi) \rangle_{q, \omega_n} &= \langle \sigma^z \rangle_0 \left(\frac{\cos 2\vartheta - \Phi_q}{i\omega_n - \varepsilon_q} + \frac{\cos 2\vartheta + \Phi_q}{i\omega_n + \varepsilon_q} \right) \\ &+ \mathcal{G}_I(q) \cdot \delta(\omega_n), \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\Phi_q = \frac{1}{2\varepsilon_q} \left[E(\cos^2 2\vartheta + 1) + 4 \cos^2 2\vartheta \langle \sigma^z \rangle t'_q \right], \quad (3.9)$$

$$\varepsilon_q = \left[(E + 2\langle \sigma^z \rangle t'_q)(E + 2\langle \sigma^z \rangle t'_q \cos^2 2\vartheta) \right]^{1/2}. \quad (3.10)$$

Явний вигляд спектру одночастинкових збуджень залежить від того, у якій фазі перебуває система. Так, для NO фази

$$\varepsilon_q^{(\text{NO})} = \delta - \mu + 2\langle \sigma^z \rangle t'_q, \quad E = \delta - \mu, \quad (3.11)$$

а для SF фази він складається з двох гілок $\pm \varepsilon_q^{(\text{SF})}$

$$\varepsilon_q^{(\text{SF})} = 2|\langle \sigma^z \rangle| \left[(|t'_0| + t'_q) \left(|t'_0| + t'_q \frac{(\delta - \mu)^2}{4|t'_0|^2 \langle \sigma^z \rangle^2} \right) \right]^{1/2}, \quad E = 2|t'_0| \langle \sigma^z \rangle. \quad (3.12)$$

Даний результат співпадає за зовнішнім виглядом зі своїм аналогом для звичайної (дворівневої) моделі жорстких бозонів (перехід до дворівневого випадку можна формально виконати, спрямувавши $\delta \rightarrow -\infty$). Однак, відмінність полягає у тому, що середнє σ^z і кут ϑ тут визначаються з тривірневої задачі (2.12).

Таким чином, у розподілі за імпульсами можна виділити три вклади:

$$\bar{n}_q = \underbrace{\xi^2 \delta(q)}_{\text{бозе-конденсат}} + \underbrace{\langle \sigma^z \rangle_0 \left(\Phi_q \coth \frac{\beta \varepsilon_q}{2} - \cos 2\vartheta \right)}_{\text{одночастинкові збудження}} + \underbrace{\frac{1}{\beta} \mathcal{G}_I(q)}_{\text{неергодичний внесок}}. \quad (3.13)$$

Перші два повністю відповідають отриманим у роботі [13] результатам, тоді як неергодичний внесок (для даного випадку викликаний статичними флуктуаціями густини) можна отримати тільки за допомогою температурних ФГ; він має таку структуру:

$$\frac{1}{\beta} \mathcal{G}_I(q) = \frac{b' \sin^2 2\vartheta}{\left(1 + 2 \frac{\langle \sigma^z \rangle_0}{E} \cos^2 2\vartheta t'_q\right) \left(1 + 2 \frac{\langle \sigma^z \rangle_0}{E} \cos^2 2\vartheta t'_q + 2\beta b' \sin^2 2\vartheta t'_q\right)},$$

$$b' = \frac{1}{4} \langle \tilde{X}^{00} + \tilde{X}^{22} \rangle - \langle \sigma^z \rangle_0^2. \quad (3.14)$$

Оскільки $\sin 2\vartheta$ відмінний від нуля лише в SF фазі, то неергодичний внесок теж існує тільки в ній:

$$\mathcal{G}_I(q) = \begin{cases} = 0, & \text{NO-фаза} \\ \neq 0, & \text{SF-фаза} \end{cases}$$

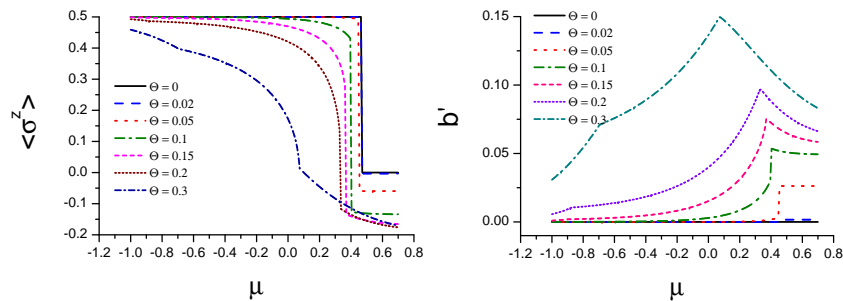


Рис. 2. Залежності $\langle \sigma^z \rangle_0$ і b' від хімпотенціалу при різних температурах – спостерігається ефект «вимороження» b' через те, що перескоки частинок можливі лише між збудженими станами ($\delta = 0.1, |t_0| = 1$).

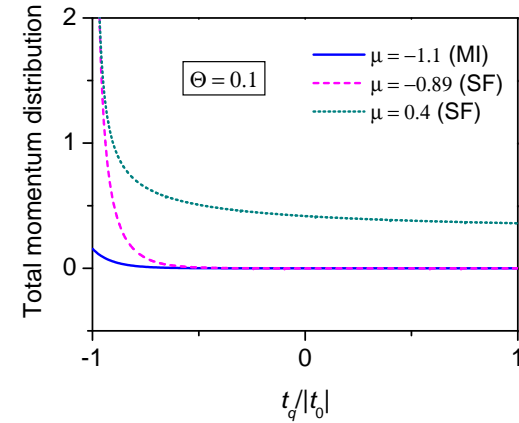


Рис. 3. Розподіл за імпульсами в NO та SF фазах ($\Theta = 0.1, \delta = 0.1, |t_0| = 1$).

Через складну структуру неергодичного внеску загальний аналіз його поведінки досить складний. На рис. 2 зображено залежності середніх, що входять до формули (3.14), від хімпотенціалу та температури. Видно, що низькі температури «виморожують» неергодичність (оскільки перескоки частинок можливі лише між збудженими станами різних вузлів).

Як видно з рис. 3, в цілому розподіл за імпульсами в SF фазі сильно зростає при наближенні до центра зони Бріллюена (бозе-конденсація). Якщо розглядати роль неергодичного внеску у розподіл за імпульсами, то, оскільки в SF-фазі $E = 2|t_0|\langle \sigma^z \rangle_0$, маємо

$$\left(1 + 2 \frac{\langle \sigma^z \rangle_0}{E} \cos^2 2\vartheta t'_q\right) \Big|_{q \rightarrow 0} \rightarrow 0, \quad \frac{1}{\beta} \mathcal{G}_I(q) \rightarrow \infty$$

при наближенні до лінії ФП другого роду SF-NO, що демонструють рис. 4 і рис. 5.

Оскільки сумарну заселеність збудженого стану легко отримати, підсумувавши імпульсний розподіл за хвильовим вектором (що у даній роботі замінено на інтегрування з модельною густиною станів аналогічно до [13])

$$n_{\text{RPA}}^c \equiv \bar{n} = \frac{1}{N} \sum_q \bar{n}_q = \int \bar{n}_z g_0(z) dz, \quad (3.15)$$

то можна спостерігати певну розбіжність між результатом, отриманим в НХФ, та його аналогом в НСП (див. рис. 6).

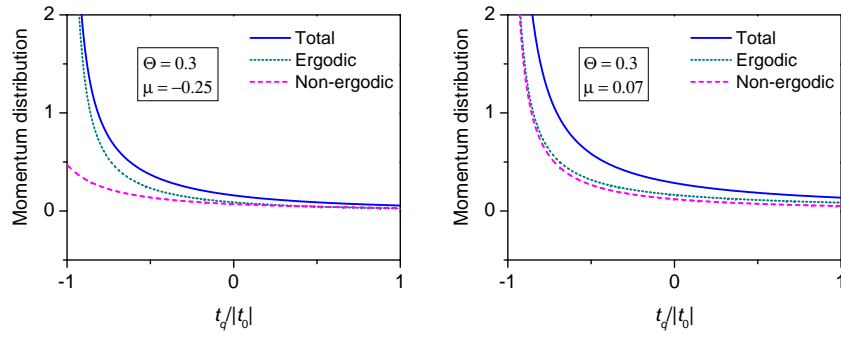


Рис. 4. Розподіл за імпульсами в SF-фазі біля ліній фазових переходів: порівняння ергодичного та неергодичного внесків ($\Theta = 0.3$, $\delta = 0.1$, $|t_0| = 1$).

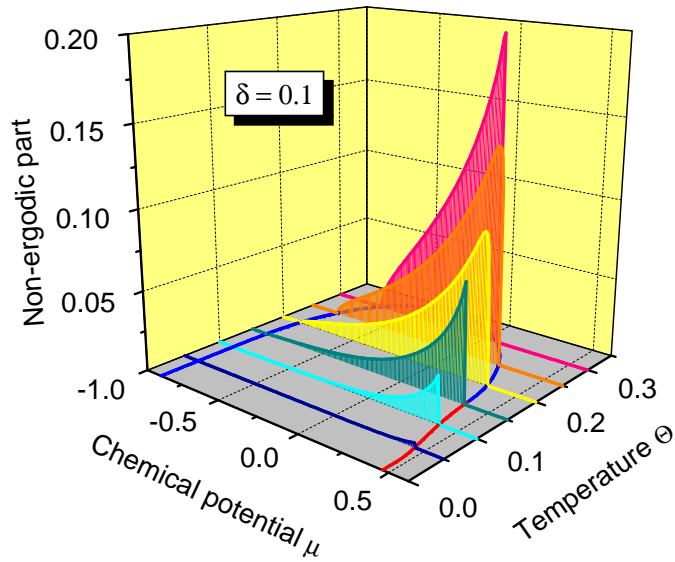


Рис. 5. Неергодична частина як функція μ і Θ ($\delta = 0.1$, $|t_0| = 1$).

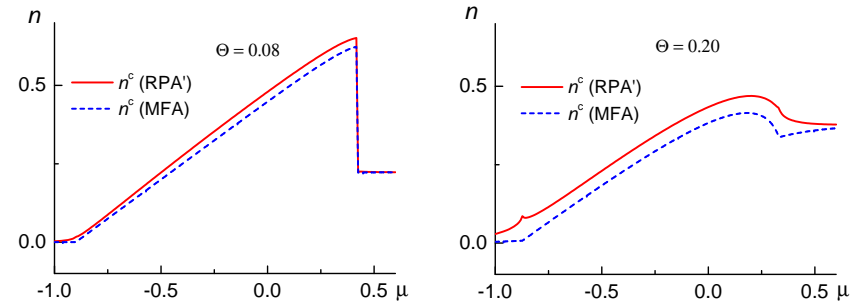


Рис. 6. Порівняння заселеностей збудженого стану отриманих у НСП і НХФ ($\delta = 0.1$, $|t_0| = 1$).

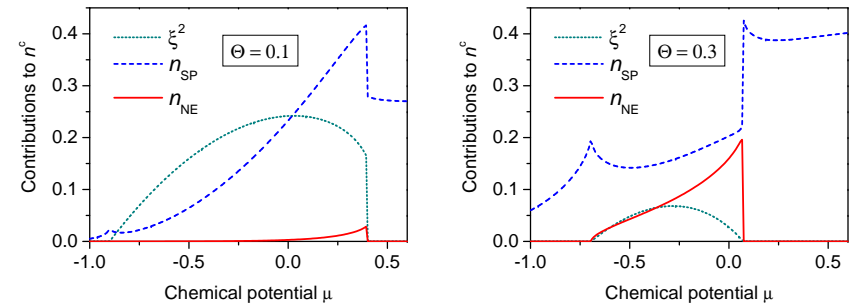


Рис. 7. Порівняння внесків у заселеність збудженого стану: бозеконденсат, одностинкові збудження, неергодична частина ($\delta = 0.1$, $|t_0| = 1$).

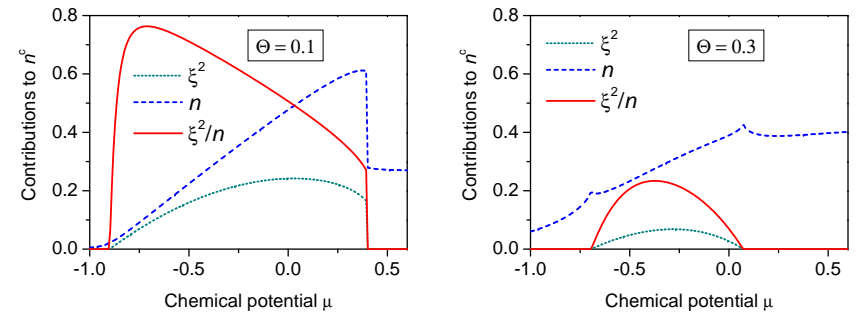


Рис. 8. Частка бозеконденсату в заселеності: бозеконденсат, заселеність збудженого стану та їх відношення ($\delta = 0.1$, $|t_0| = 1$).

Цікаво також порівняти внески у заселеність збудженого стану (бозе-конденсат, одночастинкові збудження, неергодична частина):

$$n_{\text{RPA}}^c \equiv \bar{n} = \xi^2 + n_{\text{SP}} + n_{\text{NE}}.$$

Як видно з рис. 7, особливо сильно неергодичний внесок проявляється при наближенні до лінії фазових переходів другого роду поблизу трикритичної точки. Можна також розрахувати частку бозе-конденсату в загальній заселеності збудженого стану (рис. 8).

4. Висновки

При використанні температурних ФГ для моделі Бозе-Хаббарда в границі жорстких бозонів у НХФ вдається отримати неергодичний внесок у розподіл частинок в збудженому стані за імпульсами. Цей вклад відмінний від нуля лише у SF фазі.

Неергодичний внесок (що формується статичними флуктуаціями густини) суттєво наростає і стає співмірним з ергодичною частиною в SF-фазі біля трикритичної точки (у якій $\partial n/\partial \mu \rightarrow \infty$).

Отримані в роботі [13] та даній роботі динамічні характеристики моделі базуються на використанні середніх, отриманих у НСП. Як видно з рис. 6, розраховані в НХФ середні дещо відрізняються від них. Самоузгоджений розрахунок за допомогою температурних функцій Гріна вимагає виразів для статсуми та термодинамічних потенціалів, що отримуються підсумовуванням діаграмних рядів, які містять замкнуті цикли. При цьому змін зазнають не лише динамічні (розподіл за імпульсами, густини станів), а і термодинамічні (значення середніх, вигляд фазових діаграм) характеристики системи. Це буде предметом наших подальших досліджень.

Література

1. M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, D. S. Fisher, *Phys. Rev. B*, **40** (1989), 546.
2. M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, I. Bloch, *Nature*, **415** (2002), 39.
3. M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hänsch, I. Bloch, *Nature*, **419** (2002), 51.
4. M. Nishijima, H. Okuyama, N. Takagi, T. Aruga, W. Brenig, *Surf. Sci. Rep.*, **57** (2005), 113.
5. P. D. Reilly, R. A. Harris, K. B. Whaley, *J. Chem. Phys.*, **95** (1991), 8599.
6. T. S. Mysakovich, V. O. Krasnov, I. V. Stasyuk, *Ukr. J. Phys.*, **55** (2010), 228.
7. K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, T. V. Ramakrishnan, *Europhys. Lett.*, **22** (1993), 257.

8. M. J. Puska, R. M. Nieminen, *Surf. Sci.*, **157** (1985), 413.
9. W. Brenig, *Surf. Sci.*, **291** (1993), 207.
10. T. Müller, S. Fölling, A. Widera, I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.*, **99** (2007), 200405.
11. A. Isacsson, S. M. Girvin, *Phys. Rev. A*, **72** (2005), 053604.
12. I.V. Stasyuk, O.V. Velychko, *Condens. Matter Phys.*, **14** (2011), 13004.
13. И.В. Стасюк, О.В. Величко, *ТМФ*, **168** (2011), 571.
14. В.Г. Баряхтар, В.В. Криворучко, Д.А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Київ, Наукова думка, 1984.
15. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Москва, Наука, 1987.
16. I.V. Stasyuk, A.M. Shvaika, *Condens. Matter Phys.*, **3** (1994), 134.
17. A.M. Shvaika, *Physica C*, **341-348** (2000), 177.
18. A.M. Shvaika, *J. Phys. Studies*, **5** (2001), 349.
19. T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.*, **14** (1955), 351.
20. A.M. Shvaika, *Condens. Matter Phys.*, **9** (2006), 447.
21. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **285** (1965), 542.
22. W. V. Liu, C. Wu, *Phys. Rev. A*, **74** (2006), 013607.
23. J.-B. Bru, T. C. Dorlas, *J. Stat. Phys.*, **113** (2003), 177.
24. T. Dorlas, L. Pastur, V. Zagrebnoy, *J. Stat. Phys.*, **124** (2006), 1137.
25. R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.*, **62** (1990), 113.
26. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, *ДАН СССР*, **126** (1959), 53.
27. I. Stasyuk, O. Menchyshyn, *J. Phys. Studies*, **13** (2009), 4707.