

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
ННІ "Фізико-технічний факультет"  
Кафедра фізики ядра та високих енергій імені О.І. Ахієзера

**Пояснювальна записка**

до дипломного проекту (роботи)

БАКАЛАВРА

на тему

укр. Квантовий контроль і підсилення надпровідного спарювання  
в одновимірних ланцюгах Фермі–Габбарда  
англ. Quantum control and enhancement of superconducting pairing  
in one-dimensional Fermi–Hubbard chains

Виконав: студент 4-го курсу, групи ТЯ-41  
спеціальності 105 прикладна фізика та  
наноматеріали

освітня програма: Прикладна фізика

Повітчан О.В. \_\_\_\_\_  
(особистий підпис)

Керівник д.ф.-м.н., проф.

Сотніков А.Г. \_\_\_\_\_  
(особистий підпис)

Рецензент к.ф.-м.н., с.н.с.

Пелетминський О.С. \_\_\_\_\_  
(особистий підпис)

## АНОТАЦІЯ

Система під дією зовнішнього періодичного збурення може переходити у нетривіальні надпровідні стани. Малі відхилення від оптимальних параметрів зовнішнього імпульсу зазвичай призводять до суттєво слабших збуджень. Крім цього, переходи в стани з найсильнішими надпровідними кореляціями не спостерігаються. Ми покажемо, як підсилити надпровідне спарювання за неоптимальних параметрів збуджувального поля лазера та як досягти ідентичних відгуків (ідентичних струмових характеристик) від двох систем у двох різних станах. Останній метод зокрема дає змогу отримати такий відгук від системи в нормальному стані, ніби вона перебуває у стані з максимально можливим рівнем надпровідних кореляцій.

## ABSTRACT

The system under external periodic driving can host non-trivial superconducting states. Slight deviations from the optimal parameters of the external pulse typically lead to a significant decrease in the level of excitation. Additionally, transitions to the states with the highest-possible pairing values are not observed. We will show how to enhance the superconducting pairing when the parameters of the laser pulse are not optimal and how to achieve identical responses (identical current characteristics) from two systems in two different states. The latter method, in particular, enables obtaining a response from a system in the normal state as if the system were in a state with the maximal possible value of the superconducting pairing.

## ЗМІСТ

ВСТУП . . . . .	5
РОЗДІЛ 1 Огляд літератури . . . . .	6
РОЗДІЛ 2 Надпровідне $\eta$ -спарювання . . . . .	9
РОЗДІЛ 3 Статичні характеристики системи . . . . .	12
РОЗДІЛ 4 Збудження системи імпульсом зовнішнього поля . . . . .	18
РОЗДІЛ 5 Засади контролю за Ляпуновим . . . . .	23
РОЗДІЛ 6 Підсилення надпровідного спарювання . . . . .	27
РОЗДІЛ 7 Пригнічення надпровідного спарювання . . . . .	30
РОЗДІЛ 8 Теоретичні засади трекінгового контролю . . . . .	33
РОЗДІЛ 9 Застосування трекінгового контролю . . . . .	37
ВИСНОВКИ . . . . .	39
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ . . . . .	41

## ВСТУП

Хоча людство з давніх-давен працювало з твердими тілами, і ще у IV ст. до н.е. давньогрецьким філософом-матеріалістом Демокрітом, який обстоював модель твердого тіла, що складається зі зчеплених між собою найдрібніших неділимих частинок Всесвіту, було розвинуте вчення про атом, формування фізики твердого тіла почалося лише на початку 20 століття після відкриття електрона та паралельно зі швидким розвитком квантової механіки.

Одним з найбільш вагомих досягень перших тридцяти років стала зонна теорія твердого тіла. Але, як невдовзі з'ясувалося, вона через нехтування електронними кореляціями нездатна описувати, зокрема, моттівські діелектричні стани. Відносно простою і водночас дуже ефективною моделлю, що враховує електронну взаємодію є побудована у 1963 році модель Габбарда. Після відкриття у 1986–1987 рр. високотемпературної надпровідності у моделі Габбарда були знайдені стани з нетривіальними надпровідними кореляціями. Після нещодавніх експериментів зі збудження надпровідності за допомогою імпульсів електромагнітного поля за температур, що перевищують критичні, було показано, що фотоіндуковану надпровідність також можна спостерігати в ланцюгах Фермі–Габбарда [1, 2].

Модель Фермі–Габбарда знаходить застосування і при вивченні впливу квантових контролів на еволюцію системи [3, 4]. У данній роботі ми зосередимося на оптимізації еволюції надпровідних кореляцій під дією зовнішнього поля за допомогою квантового контролю за Ляпуновим та покажемо можливе застосування трекінгового контролю для отримання в основному стані системи струмового відгуку за звичайних умов недосяжного стану з максимальним збудженням надпровідних кореляцій.

Для того, щоб краще описати фізику, закладену в систему, в роботі буде приділено увагу її статичним характеристикам та детально розглянуто залежність розвитку надпровідних кореляцій від вибору збуджувального імпульсу. Ми обговоримо обмеження і недоліки використаних методів квантового контролю, а також – можливі напрямки подальших досліджень.

## РОЗДІЛ 1

### Огляд літератури

У 1897 році за результатами вивчення “катодних променів” англійським фізиком Дж. Дж. Томсоном, лауреатом Нобелівської премії 1906 року, було відкрито субатомну частинку з негативним зарядом – електрон. Ця подія та стрімкий розвиток квантової механіки у першій половині 20 століття визначили становлення фізики твердого тіла. За три десятиліття від вперше запропонованої Паулем Друде та Гендріком Антоном Лоренцом вільно-електронної теорії металів до публікації монументальної праці Арнольда Зоммерфельда й Ганса Бете у 1933 році [5] фізика твердого тіла пройшла шлях від грубих класичних концепцій до етапу, на якому могли проводитися серйозні розрахунки характеристик конкретних металів.

Початком прориву стало напівкласичне застосування Вольфгангом Паулі у 1926 р. [6] та Арнольдом Зоммерфельдом у 1927 р. [7] квантової статистики Фермі–Дірака до газу вільних електронів і фундаментальне формулювання квантової механіки електронів у потенціалі кристалічної ґратки Феліксом Блохом у 1928 році [8]. Нова фізика твердого тіла стала наслідком успішного застосування квантової механіки до макроскопічних систем з метою пояснення багатократно спостережуваних явищ.

Зонна теорія, яка ґрунтується на розв’язанні рівняння Шредінгера у періодичному потенціалі, наведеному в роботі Фелікса Блоха, стала ключем до розуміння електронного транспорту та оптичних властивостей твердих тіл. За допомогою цієї концепції вдалося пояснити як базові речі на кшталт природи напівпровідників та різниці між металами й діелектриками, так і конкретні давно відомі фізичні явища: ефект Холла, магнітоопір тощо.

Найбільшим тріумфом зонної теорії було успішне розділення величезної кількості кристалічних твердих тіл на метали та діелектрики. Але невдовзі виявилось, що найбільша проблема теорії лежить зовсім поруч з найбільшим її досягненням: вона передбачала, що деякі діелектрики мають бути провідниками. У випадку кристалічних тіл зонна теорія – апроксимація реальної фізики у наближенні вільних електронів, яка не може врахувати кореляційні ефекти, наслідком яких є, зокрема, існування моттівських діелектричних станів.

Серед підходів, які враховують взаємодію електронів, в межах даної роботи нас буде цікавити модель Габбарда. Відповідний вираз для гамільтоніана (1.1), що описує електрони в потенціалі ґратки, з'являється в літературі вперше у 1963 році у двох статтях за авторством Мартіна Гутцвіллера [9] та Джона Габбарда [10], які працювали над побудовою простої теорії для опису кореляцій електронів на d-орбіталях атомів перехідних металів. Джульєро Канаморі одержує подібні вирази у своїй роботі [11], датованій тим же 1963 роком. Модельний гамільтоніан складається з двох доданків:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{i,j} \left( \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (1.1)$$

Перший, кінетичний доданок, описує тунелювання електронів між вузлами ґратки (у найпростішому випадку амплітуда  $t_{i,j}$  однакова для переходів між будь-якими сусідніми вузлами і дорівнює  $-t_h$ ,  $t_h > 0$ ). Другий доданок апроксимує взаємодію між електронами на вузлі ( $U > 0$  відповідає кулонівському відштовхуванню). У гамільтоніані (1.1) індекси  $i$  та  $j$  нумерують вузли ґратки,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  позначає проєкцію спіну,  $\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}$ ,  $\hat{c}_{i,\sigma}$  – оператори народження та знищення, що задовольняють звичайним антикомутаційним співвідношенням:

$$\left\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\chi}^{\dagger} \right\} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\chi}, \quad \left\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\chi} \right\} = \left\{ \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{j,\chi}^{\dagger} \right\} = 0, \quad (1.2)$$

де  $h.c.$  означає ермітове спряження (у нашому випадку – це зворотній процес тунелювання, що відповідає добутку  $\hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma}$ ),  $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma}$  – оператор кількості частинок з проєкцією спіну  $\sigma$  на вузлі  $i$ , його власні значення  $n_{i,\sigma} = 0, 1$ .

Ця модель вбирає в себе ідеї зонної теорії (завдяки тунелюванню) і наближення невзаємодійних атомів (завдяки відштовхуванню на вузлах ґратки) та при збільшенні співвідношення  $U/t_h$  в основному стані напівзаповненої системи дає змогу спостерігати перехід від металу до діелектричного стану Мотта.

Незважаючи на зовнішню простоту гамільтоніана (1.1), точний аналітичний розв'язок існує лише для основного стану в строго одновимірній геометрії [12]. Інші результати отримують або чисельними методами, або

за певних наближень.

У 1986–1987 рр. відбулося відкриття високотемпературних надпровідників [13, 14], що породило нову хвилю зацікавленості моделлю Габбарда, пов'язану з початком пошуку в ній надпровідного спарювання. У 1989 році китайським фізиком Янгом Чженьніном було показано, що багато власних станів гамільтоніана Габбарда в тривимірній (а також у дво- та одновимірній) геометрії мають недіагональний далекий порядок зведеної матриці густини [15] – властивість, необхідну для існування явищ надпровідності та надплинності [16]. На відміну від неперервних систем, у яких далекий порядок для хвильових функцій Бардіна–Купера–Шріффера реалізується через механізм куперівських пар, тут за надпровідні кореляції відповідає не так зване  $\eta$ -спарювання, властиве саме для ґраткових систем.

Після нещодавнього експериментального спостереження фотоіндукованої надпровідності в купратах [17–19] та фулеренах [20, 21] за температур, що перевищують критичні, низка авторів зосередилася на теоретичному описі спостережуваних явищ в межах моделей цих матеріалів [22–25]. Окрему увагу ми приділимо двом роботам 2019-2020 років [1, 2], у яких фотоіндукована надпровідність розглядається без прив'язки до конкретних речовин у рамках одновимірної моделі Фермі–Габбарда. Так, було показано, що за допомогою нелінійного імпульсу зовнішнього електромагнітного поля можна перевести систему з основного нормального стану моттівського діелектрика в стан зі збудженими надпровідними кореляціями.

Модель Габбарда вже більше 60 років поєднує елегантну просту ідею із багатою фізикою. За її допомогою вивчають не тільки нелінійну динаміку збудження надпровідності під дією зовнішнього поля. Окремим цікавим напрямком досліджень є застосування квантових контролів, що накладають певні умови на еволюцію системи. Наприклад, трекінговий контроль [3, 4] під впливом імпульсу зовнішнього поля дає змогу спрямувати еволюцію середнього значення оператора вздовж наперед заданої траєкторії. Зокрема, можна отримати ідентичні електричні відгуки від металу та моттівського діелектрика (або від системи у нормальному та надпровідному станах).

## РОЗДІЛ 2

### Надпровідне $\eta$ -спарювання

У цьому розділі та надалі ми будемо працювати з одновимірним напівзаповненим ланцюжком Фермі–Габбарда. Кількість вузлів обиратиметься парною, кількість електронів з проекцією спіну вгору обиратиметься рівною кількості електронів з проекцією спіну вниз. Граничні умови – періодичними (дозволятиметься тунелювання між першим та останнім вузлами). Гамільтоніан такої  $L$ -вузлової системи за відсутності зовнішнього впливу, записаний в атомних одиницях<sup>1</sup>, має вигляд (2.1)

$$\hat{\mathcal{H}} = -t_h \sum_i \sum_{\sigma} \left( \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i+1,\sigma} + \hat{c}_{i+1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma} \right) + U \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (2.1)$$

Порівняно з (1.1), у (2.1) покладено  $t_{i,j} = -t_h$  (трансляційна інваріантність) та записано  $i+1$  замість  $j$  (тунелювання між кожною парою вузлів в кожному напрямку враховується один раз). У кінетичному доданку додавання проводиться від  $i=1$  до  $L$  (значення індексу  $i+1$ , рівне  $L+1$ , необхідно замінити на 1)<sup>2</sup>. Для уніфікації процедури додавання можна зробити зсув індексів  $i \rightarrow i-1$  та замість  $i+1$  брати цілу частину від ділення  $(i+1)/L$ .

На наявність далекого надпровідного порядку в системі вказує відмінне від нуля спостережуване значення оператора  $\hat{\eta}^2$  (2.2) зі спектром  $\eta^2 = \eta(\eta+1)$ ,  $\eta = 0, 1, \dots, \frac{L}{2}$  [1],

$$\hat{\eta}^2 = \frac{1}{2} (\hat{\eta}^+ \hat{\eta}^- + \hat{\eta}^- \hat{\eta}^+) + \hat{\eta}_z^2. \quad (2.2)$$

Є безпосередня аналогія між родиною операторів  $\hat{s}^-$ ,  $\hat{s}^+$ ,  $\hat{s}_z$ , що описують спін  $s = 1/2$  та операторами  $\hat{\eta}^-$ ,  $\hat{\eta}^+$ ,  $\hat{\eta}_z$  (2.3).

$$\begin{aligned} \hat{\eta}^- &= \sum_j (-1)^j \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}, & \hat{\eta}^+ &= \sum_j (-1)^j \hat{c}_{j,\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\uparrow}^{\dagger}, \\ \hat{\eta}_z &= \frac{1}{2} \sum_j (\hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{j,\downarrow} - 1), & \eta_z &= -\eta, -\eta+1, \dots, \eta-1, \eta. \end{aligned} \quad (2.3)$$

<sup>1</sup>  $\hbar = 1$ ,  $e = 1$ ,  $m_e = 1$ ,  $4\pi\epsilon_0 = 1$ .

<sup>2</sup> Якщо  $L = 2$ , то  $i$  дорівнює 1. Інакше тунелювання між вузлами враховується двічі.

$\hat{\eta}^-$ ,  $\hat{\eta}^+$ ,  $\hat{\eta}_z$  задовольняють комутаційним співвідношенням групи SU(2):

$$[\hat{\eta}^-, \hat{\eta}^+] = -2\hat{\eta}_z, \quad [\hat{\eta}^-, \hat{\eta}_z] = \hat{\eta}^-, \quad [\hat{\eta}^+, \hat{\eta}_z] = -\hat{\eta}^+, \quad (2.4)$$

та змінюються під дією ермітового спряження таким чином:

$$(\hat{\eta}^-)^\dagger = \hat{\eta}^+, \quad (\hat{\eta}^+)^\dagger = \hat{\eta}^-, \quad (\hat{\eta}_z)^\dagger = \hat{\eta}_z, \quad (\hat{\eta}^2)^\dagger = \hat{\eta}^2. \quad (2.5)$$

Для перевірки (2.4) корисно помітити, що оператори  $\hat{\eta}_j^-$ ,  $\hat{\eta}_j^+$ ,  $\hat{n}_{j,\sigma}$ , згідно з (1.2), комутують, коли діють на різні вузли  $j \neq i$ :

$$[\hat{\eta}_i^-, \hat{\eta}_j^+] = 0, \quad [\hat{\eta}_i^-, \hat{n}_{j,\sigma}] = 0, \quad [\hat{\eta}_i^+, \hat{n}_{j,\sigma}] = 0. \quad (2.6)$$

Тоді в справедливості виразу  $[\hat{\eta}^-, \hat{\eta}^+] = -2\hat{\eta}_z$  можна переконатися, враховуючи (1.2) і виконуючи перетворення на кшталт запропонованих нижче:

$$\begin{aligned} [\hat{\eta}^-, \hat{\eta}^+] &= \sum_j \left( \hat{c}_{j,\uparrow} \left( 1 - \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \right) \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger - \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \right) = \\ &= \sum_j \left( \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger + (-1)^3 \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \left( 1 - \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} \right) \hat{c}_{j,\downarrow} - \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \right) = \\ &= \sum_j (1 - \hat{n}_{j,\uparrow} - \hat{n}_{j,\downarrow}) = -2\hat{\eta}_z. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Значення другого й третього комутаторів (2.4) стають очевидними після доведення таких тотожностей:

$$[\hat{\eta}^-, \hat{n}_\sigma] = \hat{\eta}^-, \quad [\hat{\eta}^+, \hat{n}_\sigma] = -\hat{\eta}^+. \quad (2.8)$$

Можна показати, що  $\eta^2$  та  $\eta_z$  комутують з гамільтоніаном (2.1) та зберігаються в системі з визначеною енергією. Буде зручно ввести такі позначення:

$$\hat{K} = -t_h \sum_i \sum_\sigma \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma}, \quad \hat{\mathcal{K}} = \hat{K} + \hat{K}^\dagger, \quad \hat{U} = U \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (2.9)$$

де  $\hat{K}$  відповідає тунелюванню ліворуч,  $\hat{\mathcal{K}}$  – кінетичному доданку, а  $\hat{U}$  – взаємодії електронів у вузлах. Крім цього, варто пригадати, що для ферміонів

квадрати операторів народження або знищення при дії на будь-який стан дають нуль:

$$\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger = 0, \quad \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} = 0. \quad (2.10)$$

Враховуючи співвідношення (1.2), (2.6), (2.8) та (2.10) і розкриваючи комутатори вигляду  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$  за відомим правилом  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ , легко побачити, що

$$[\hat{\eta}^-, \hat{\mathcal{U}}] = U\hat{\eta}^-, \quad [\hat{\eta}^+, \hat{\mathcal{U}}] = -U\hat{\eta}^+. \quad (2.11)$$

Наступне співвідношення,

$$[\hat{\eta}_z, \hat{\mathcal{U}}] = 0, \quad (2.12)$$

пояснюється тим, що оператори  $\hat{n}_{i,\sigma}$  та  $\hat{n}_{j,\chi}$  комутують за будь-яких значень  $i, j, \sigma, \chi$ .

Спираючись на (1.2) та (2.6), легко показати, що

$$\begin{aligned} [\hat{\eta}^-, \hat{K}] &= -t_h \sum_i (-1)^i (\hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i+1,\downarrow} - \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i+1,\uparrow}), \\ [\hat{\eta}^+, \hat{K}] &= -t_h \sum_i (-1)^i (\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i+1,\uparrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i+1,\downarrow}^\dagger), \\ [\hat{n}_\sigma, \hat{K}] &= 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Зі співвідношень (2.5) і (2.13) з урахуванням виразу  $[\hat{A}, \hat{B}^\dagger] = -[\hat{A}^\dagger, \hat{B}]^\dagger$  впливає комутація операторів  $\hat{\eta}^-, \hat{\eta}^+, \hat{\eta}_z$  з кінетичним доданком гамільто-ніана:

$$[\hat{\eta}^-, \hat{\mathcal{K}}] = 0, \quad [\hat{\eta}^+, \hat{\mathcal{K}}] = 0, \quad [\hat{\eta}_z, \hat{\mathcal{K}}] = 0. \quad (2.14)$$

Збираючи разом (2.11), (2.12), (2.14), доходимо висновку:

$$[\hat{\eta}^2, \hat{\mathcal{H}}] = 0, \quad [\hat{\eta}_z, \hat{\mathcal{H}}] = 0, \quad (2.15)$$

що й було оголошено на початку розгляду.

## РОЗДІЛ 3

### Статичні характеристики системи

У цьому розділі ми розглянемо власні стани гамільтоніана системи. Їх надпровідні властивості характеризуватиме спостережуване значення оператора  $\hat{\eta}^2$ . Щоб отримати інформацію про магнітні характеристики системи, ми також розглянемо середні значення квадрата сумарного спіну  $\hat{\mathbf{S}}^2$  та спін-спінового корелятора між сусідніми вузлами  $\hat{\Delta}_s = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_{i+1}$ . Проведення відповідних розрахунків пов'язане з оперуванням матрицями та векторами в  $d$ -вимірному просторі, де  $d = \left(C_L^{L/2}\right)^2 = \left(\frac{L!}{(L/2)!(L/2)!}\right)^2$ . Для систем, що складаються з  $L = 2, 4, 6, 8$  вузлів (а також за умов  $N = L$  і  $N_\uparrow = N_\downarrow$ ),  $d = 4, 36, 400, 4900$ . Для того, щоб унаочнити розгляд, ми виконаємо деякі аналітичні розрахунки для двовимірної системи. Для систем більших розмірів користуватимемося чисельними методами.

Огляньмо оператори  $\hat{\mathbf{S}}^2$  та  $\hat{\Delta}_s$ :

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}^2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_i^- \hat{s}_j^+) + \sum_{i,j} \hat{s}_{z,i} \hat{s}_{z,j}, \\ \hat{\Delta}_s &= \frac{1}{2} \sum_i (\hat{s}_i^+ \hat{s}_{i+1}^- + \hat{s}_i^- \hat{s}_{i+1}^+) + \sum_i \hat{s}_{z,i} \hat{s}_{z,i+1}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Відмінне від нуля значення першого з них вказує на наявність нетривіального магнітного моменту системи. Якщо середнє значення другого оператора позитивне, у системі переважно феромагнітне упорядкування спінів. Якщо воно негативне, у системі переважно антиферомагнітне упорядкування. При записі (3.1) використовувалися стандартні (не залежні від порядку чисел заповнення:  $|n_\uparrow, n_\downarrow\rangle$  чи  $|n_\downarrow, n_\uparrow\rangle$ ) визначення одновузлових спінових операторів  $\hat{s}_i^+$ ,  $\hat{s}_i^-$ ,  $\hat{s}_{\alpha,i}$ , ( $\alpha = x, y, z$ ,  $\sigma_{\tau,\tau'}^\alpha$  – матриці Паулі):

$$\hat{s}_i^+ = \hat{c}_{\uparrow,i}^\dagger \hat{c}_{\downarrow,i}, \quad \hat{s}_i^- = \hat{c}_{\downarrow,i}^\dagger \hat{c}_{\uparrow,i}, \quad \hat{s}_{\alpha,i} = \frac{1}{2} \hat{c}_{\tau,i}^\dagger \sigma_{\tau,\tau'}^\alpha \hat{c}_{\tau',i}, \quad \tau, \tau' = \uparrow, \downarrow.\tag{3.2}$$

Для того, щоб отримати матриці  $\hat{\mathcal{H}}$ ,  $\hat{\eta}^2$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$ ,  $\hat{\Delta}_s$  перш за все треба узгодити порядок запису чисел заповнення у векторі багатовузлового стану системи – результаті тензорного добутку  $|n_\uparrow, n_\downarrow\rangle_1 \otimes |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_\uparrow, n_\downarrow\rangle_L$   $L$  векторів одновузлових станів. Ми будемо використовувати такий порядок

запису, як показано нижче:

$$|I\rangle = |n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow}, \dots, n_{L,\uparrow}, n_{1,\downarrow}, n_{2,\downarrow}, \dots, n_{L,\downarrow}\rangle, \quad I = 1, \dots, d. \quad (3.3)$$

Ідентичний застосовується в програмному пакеті QuSpin [26, 27], який буде використовуватися нами під час проведення подальших чисельних розрахунків. Тепер запишімо базисні стани системи, що складається з  $L = 2$  вузлів і  $N = 2$  частинок. Очевидно, що це

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1_{1,\uparrow}, 0_{2,\uparrow}, 1_{1,\downarrow}, 0_{2,\downarrow}\rangle, \\ |2\rangle &= |1_{1,\uparrow}, 0_{2,\uparrow}, 0_{1,\downarrow}, 1_{2,\downarrow}\rangle, \\ |3\rangle &= |0_{1,\uparrow}, 1_{2,\uparrow}, 1_{1,\downarrow}, 0_{2,\downarrow}\rangle, \\ |4\rangle &= |0_{1,\uparrow}, 1_{2,\uparrow}, 0_{1,\downarrow}, 1_{2,\downarrow}\rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Згідно з інваріантним визначенням дії операторів народження та знищення на вектори багаточастинкових (багатовузлових) станів (3.5) [28], починаємо отримувати матриці операторів.

$$\begin{aligned} \hat{c}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} \delta_{n_i, 0} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{c}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} \delta_{n_i, 1} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Почнімо з операторів “потенційної” енергії  $\hat{U} = U(\hat{n}_{1,\uparrow}\hat{n}_{1,\downarrow} + \hat{n}_{2,\uparrow}\hat{n}_{2,\downarrow})$  та “кінетичної” енергії  $\hat{K} = -t_h(\hat{c}_{1,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{2,\uparrow} + \hat{c}_{2,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{1,\uparrow} + \hat{c}_{1,\downarrow}^\dagger\hat{c}_{2,\downarrow} + \hat{c}_{2,\downarrow}^\dagger\hat{c}_{1,\downarrow})$ .

$$\left(\hat{U}\right)_{ij}^{\{I\}} = \langle i | \hat{U} | j \rangle = \begin{pmatrix} U & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Верхній індекс  $\{I\}$  вказує на те, що матриця записана у базисі  $|I\rangle$  (3.4). Враховуючи, що

$$\begin{aligned} \mathcal{K} |1\rangle &= -t_h |3\rangle - t_h |2\rangle, \\ \mathcal{K} |2\rangle &= -t_h |4\rangle - t_h |1\rangle, \\ \mathcal{K} |3\rangle &= -t_h |1\rangle - t_h |4\rangle, \\ \mathcal{K} |4\rangle &= -t_h |2\rangle - t_h |3\rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

отримуємо матрицю кінетичного доданка:

$$\left(\hat{\mathcal{K}}\right)_{ij}^{\{I\}} = \langle i | \hat{\mathcal{K}} | j \rangle = \begin{pmatrix} 0 & -t_h & -t_h & 0 \\ -t_h & 0 & 0 & -t_h \\ -t_h & 0 & 0 & -t_h \\ 0 & -t_h & -t_h & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Матриця гамільтоніана матиме такий вигляд:

$$\left(\hat{\mathcal{H}}\right)_{ij}^{\{I\}} = \begin{pmatrix} U & -t_h & -t_h & 0 \\ -t_h & 0 & 0 & -t_h \\ -t_h & 0 & 0 & -t_h \\ 0 & -t_h & -t_h & U \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

На цьому етапі можемо поцікавитися власними векторами та значеннями оператора  $\hat{\mathcal{H}}$ . Характеристичне рівняння для пошуку енергетичних рівнів матиме вигляд  $(E^2 - UE - 4t_h^2)(E - U)E = 0$ . Якщо ввести позначення  $\chi = \sqrt{U^2 + 16t_h^2}$ , його розв'язки із відповідними нормованими векторами набувають такого вигляду:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{U - \chi}{2}, & |\varphi_1\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{U}{\chi}} \left( 1, \frac{U + \chi}{4t_h}, \frac{U + \chi}{4t_h}, 1 \right)^T, \\ E_2 &= 0, & |\varphi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (0, -1, 1, 0)^T, \\ E_3 &= U, & |\varphi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-1, 0, 0, 1)^T, \\ E_4 &= \frac{U + \chi}{2}, & |\varphi_4\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{U}{\chi}} \left( 1, \frac{U - \chi}{4t_h}, \frac{U - \chi}{4t_h}, 1 \right)^T. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Серед рівнів енергії (3.10) нема вироджених. Тож, власний базис гамільтоніана також буде власним базисом операторів  $\hat{\eta}^2$  і  $\hat{\mathbf{S}}^2$  [29] (у попередньому розділі було показано, що  $\hat{\mathcal{H}}$  комутує з  $\hat{\eta}^2$  (3.10), так само можна показати, що  $\hat{\mathcal{H}}$  комутує з  $\hat{\mathbf{S}}^2$ ). Відповідно, за допомогою матриці переходу  $P = (|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle, |\varphi_4\rangle)$  можна діагоналізувати  $(\hat{\eta}^2)_{ij}^{\{I\}}$  та  $(\hat{\mathbf{S}}^2)_{ij}^{\{I\}}$ , як це

показано нижче:

$$\begin{aligned}
 (\hat{\eta}^2)_{ij}^{\{I\}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & (\hat{\eta}^2)_{ij}^{\{\varphi_I\}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 (\hat{\mathbf{S}}^2)_{ij}^{\{I\}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & (\hat{\mathbf{S}}^2)_{ij}^{\{\varphi_I\}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

У матриці  $(\hat{\eta}^2)_{ij}^{\{I\}}$  та  $(\hat{\mathbf{S}}^2)_{ij}^{\{I\}}$  роблять внесок лише оператори  $\hat{\eta}^+$  і  $\hat{\eta}^-$  та  $\hat{S}^+ = \sum_i \hat{s}_i^+$  і  $\hat{S}^- = \sum_i \hat{s}_i^-$ , відповідно. Єдине відмінне від нуля значення  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle = 2$  спостерігається у стані системи з енергією  $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = U$ . Єдине відмінне від нуля значення  $\langle \hat{\mathbf{S}}^2 \rangle = 2$  спостерігається у стані  $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = 0$  (спін-триплетний стан  $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\downarrow_1, \uparrow_2 - \uparrow_1, \downarrow_2)$  з  $S = 1$  і  $S_z = 0$ ).

Оскільки оператор  $\hat{\Delta}_s$  не комутує з гамільтоніаном, його матриця не набуватиме діагонального вигляду в базисі  $\{\varphi_I\}$ . У базисі  $\{I\}$  вона записується так:

$$(\hat{\Delta}_s)_{ij}^{\{I\}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.12}$$

Внески в діагональні елементи дає сума  $\frac{1}{2} \sum_i (\hat{s}_i^+ \hat{s}_{i+1}^- + \hat{s}_i^- \hat{s}_{i+1}^+)$ , у недіагональні – сума  $\sum_i \hat{s}_{z,i} \hat{s}_{z,i+1}$ . Нижче записані середні  $\hat{\Delta}_s$  у станах з енергіями  $E_I$  (3.10) ( $\chi = \sqrt{16t_h^2 + U^2}$ ):

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \frac{U - \chi}{2}, & \langle \varphi_1 | \hat{\Delta}_s | \varphi_1 \rangle &= -\frac{3}{8} \left( 1 + \frac{U}{\chi} \right), \\
 E_2 &= 0, & \langle \varphi_2 | \hat{\Delta}_s | \varphi_2 \rangle &= \frac{1}{4}, \\
 E_3 &= U, & \langle \varphi_3 | \hat{\Delta}_s | \varphi_3 \rangle &= 0, \\
 E_4 &= \frac{U + \chi}{2}, & \langle \varphi_4 | \hat{\Delta}_s | \varphi_4 \rangle &= -\frac{3}{8} \left( 1 - \frac{U}{\chi} \right).
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Спостерігаємо феромагнітне впорядкування спінів у стані з відмінним від нуля  $\langle \hat{\mathbf{S}}^2 \rangle = 2$ . Унаочнімо результати (3.10), (3.11), (3.13). Покладаючи  $U = 20t_h$  [2], будемо графіки, які продемонстровані на рис. 3.1.

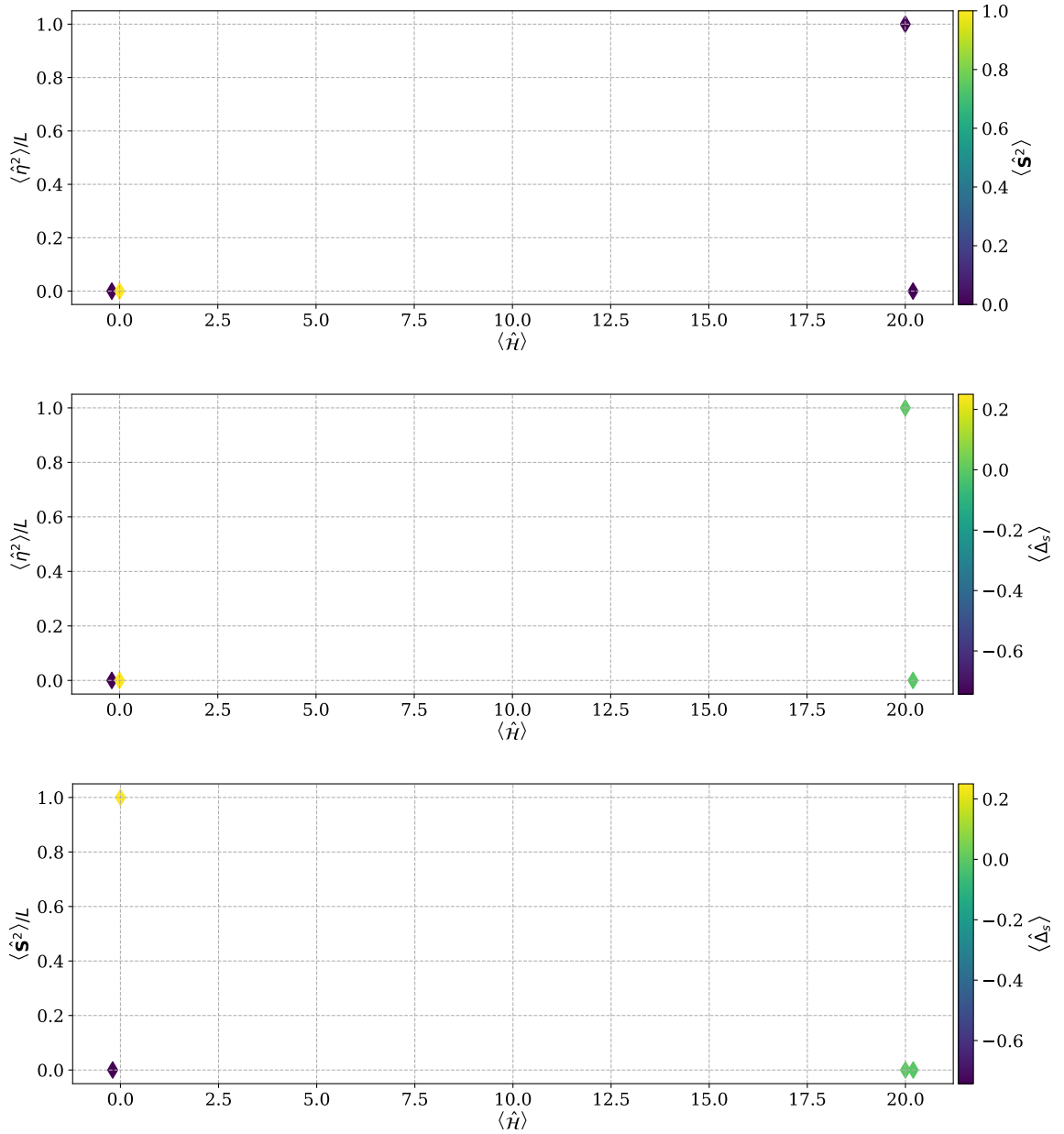


Рис. 3.1: Надпровідні та магнітні характеристики власних енергетичних станів системи з  $L = 2$  вузлів та за фіксованого  $U = 20t_h$ . Абсциса точки дорівнює енергії стану, ордината та колір вказують на зв'язок між надпровідністю та магнетизмом стану (верхній графік), між надпровідністю стану та типом впорядкування спінів (середній), між магнетизмом стану та типом впорядкування спінів (нижній графік).

Для системи, що складається з  $L = 6$  вузлів, при  $U = 20t_h$  аналогічні графіки зображені на рис. 3.2. Із них видно, що станам з найбільш сильними надпровідними кореляціями не властиві сильні магнітні кореляції між

найближчими сусідами. Феромагнітний порядок спінів спостерігається у станах з великими значеннями  $\langle \hat{S}^2 \rangle$ , антиферомагнітний порядок трапляється серед станів зі слабким проявом надпровідності за низьких та помірних енергій. У високоенергетичних станах системи спостережуване  $\hat{\Delta}_s$  прямує до нуля.

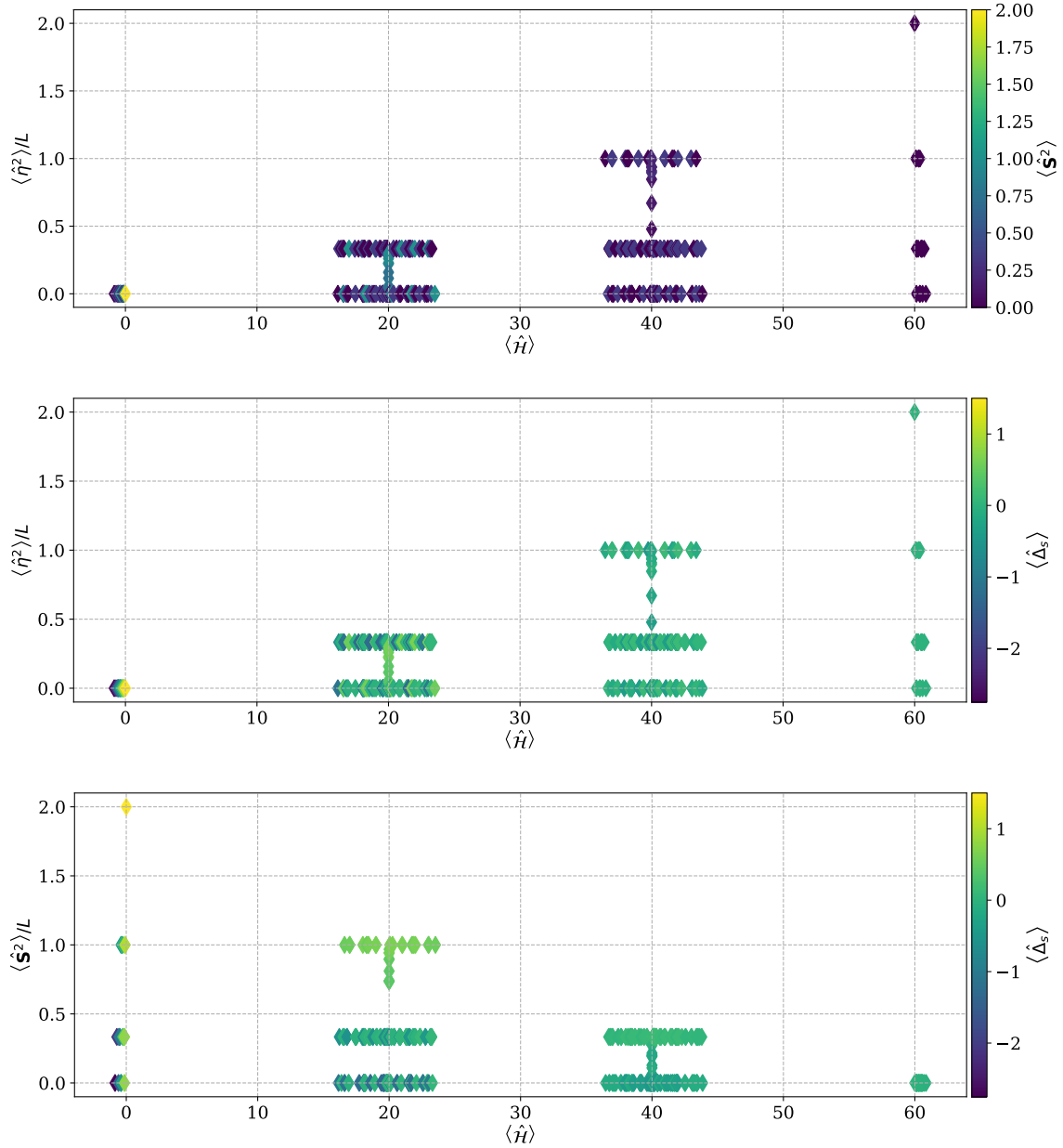


Рис. 3.2: Надпровідні та магнітні характеристики власних енергетичних станів системи з  $L = 6$  вузлів за фіксованого  $U = 20t_h$ . Абсциса точки дорівнює енергії стану, ордината та колір вказують на зв'язок між надпровідністю та загальним спіном (верхній графік), між надпровідністю та впорядкуванням спінів (середній), між загальним спіном та впорядкуванням спінів (нижній графік).

## РОЗДІЛ 4

### Збудження системи імпульсом зовнішнього поля

Уведемо в стаціонарний гамільтоніан (2.1) часозалежне зовнішнє електромагнітне поле з векторним потенціалом  $A(t)$  за допомогою підстановки Паєрлса:  $\hat{K}(t) \rightarrow e^{i\Phi(t)}\hat{K}$ , де  $\Phi(t) = aA(t)$ ,  $a$  – стала ґратки (відстань між сусідніми вузлами), а напруженість електричного поля  $E(t) = -\frac{1}{a} \frac{d\Phi(t)}{dt}$ . У результаті отримуємо нестаціонарний гамільтоніан (4.1), з яким надалі працюватимемо:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t_h \sum_i \sum_{\sigma} \left( e^{i\Phi(t)} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i+1,\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (4.1)$$

Розгляньмо напівзаповнену систему з періодичними граничними умовами (РВС) у моттівському діелектричному стані: покладімо  $a = 1$ ,  $t_h = 1$ ,  $U = 20t_h$ , кількість електронів – рівною кількості вузлів ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2$ ). Як було показано раніше [2], під дією суттєво нелінійного імпульсу зовнішнього поля (4.2) така система може перейти із нормального стану в стан, що характеризується ненульовим значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle$ . Нижче наведено імпульс, що нами використовуватиметься:

$$\Phi(t) = \Phi_0 \exp\left(-\frac{(t-t_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) \cos(\omega_p(t-t_p)). \quad (4.2)$$

Оптимальні параметри цих модульованих гаусіаном гармонічних коливань обираються таким чином, щоб у початковий момент часу гамільтоніан (4.1) співпадав зі стаціонарним виразом (2.1) та  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle$  під час еволюції досягав максимального дозволеного значення. Покладімо  $t_p = 10/t_h$ ,  $\sigma_p = 2/t_h$ ,  $\Phi_0 = 0.3$ , тоді оптимальні кутові частоти  $\omega_p$  для систем з  $L = 6, 8, 10, 12, 14$  вузлів будуть, відповідно,  $18.68t_h, 19.11t_h, 19.36t_h, 19.54t_h, 19.66t_h$  [2]. Ми зосередимося на вивченні системи, що складається з  $L = 6$  вузлів, тому покладімо  $\omega_p = 18.68t_h$ .

Побудуємо графік залежності  $\langle \Psi(t) | \hat{\eta}^2 | \Psi(t) \rangle / L$  від часу. Ці та наступні розрахунки будемо проводити за допомогою пакету для точної діагоналізації та динаміки квантових систем багатьох тіл QuSpin [26, 27]. Зокрема, для розв'язання часозалежного рівняння Шредінґера  $\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -i\hat{\mathcal{H}}(t) |\Psi(t)\rangle$

пакет QuSpin за замовчуванням використовує вбудований в клас для чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь бібліотеки SciPy алгоритм Дорманда й Принса для явного методу Рунге–Кутти порядку 8(5,3). Будемо відстежувати еволюцію з початкового стану  $|\Psi_0\rangle$ , що є власним станом стаціонарного гамільтоніана з мінімальною енергією, на проміжку часу від  $t = 0$  до  $t = 30/t_h$ , який у чисельному алгоритмі розбиватимемо на 10 тисяч точок (це відповідає часовому кроку  $3t_h^{-1} \times 10^{-3}$ , що набагато менше періоду коливань збуджувального поля  $T = 2\pi/\omega_p \approx 3t_h^{-1} \times 10^{-1}$ ). На рис. 4.1 представлений результат чисельних розрахунків для еволюції  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ .

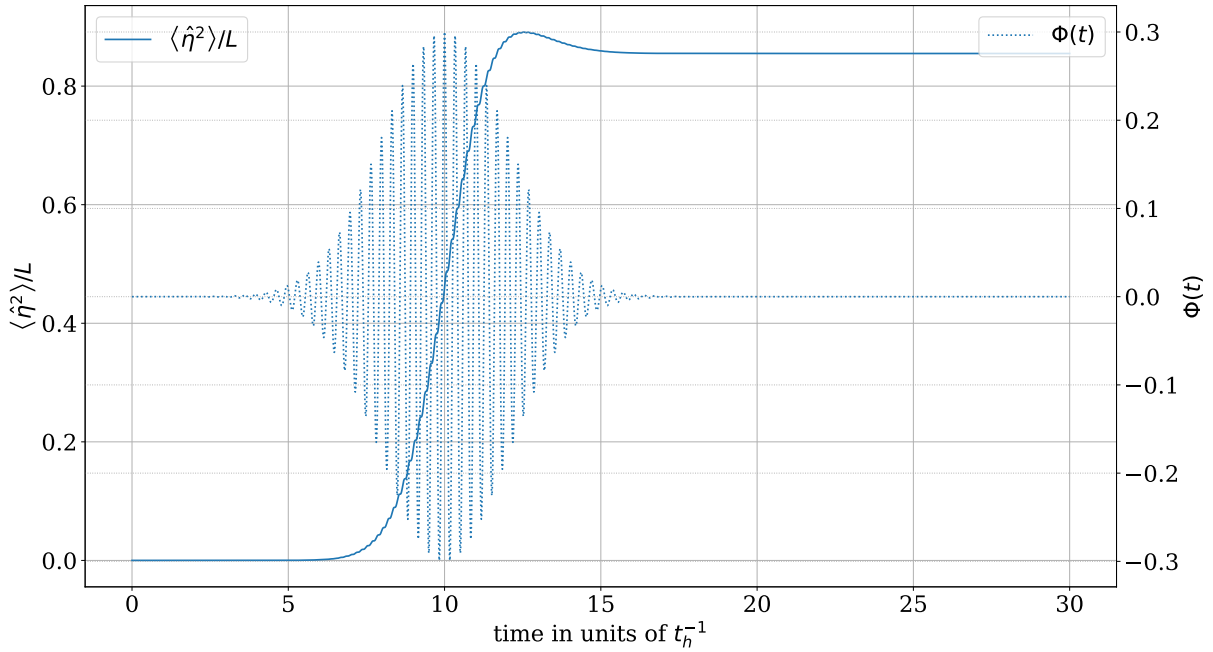


Рис. 4.1: Еволюція  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  в 6-вузловій напівзаповненій системі під дією зовнішнього поля (4.2) з  $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68t_h$ . Пунктирною лінією подано збуджувальний імпульс  $\Phi(t)$ .

Як бачимо, разом з увімкненням зовнішнього поля починається зростання  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ , яке змінюється легким спадом під час загасання амплітуди збуджувального імпульсу. Цікаво подивитися, які власні стани операторів  $\hat{\mathcal{H}}$  і  $\hat{\eta}^2$  роблять внески у стан  $|\Psi_{\max}\rangle$  з максимальним спостережуваним під час еволюції значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  та у фінальний стан  $|\Psi_{\text{final}}\rangle = |\Psi(30/t_h)\rangle$ . Для цього побудуємо в координатах  $\langle \varphi_I | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_I \rangle$ ,  $\langle \varphi_I | \hat{\eta}^2 | \varphi_I \rangle / L$  діаграми розподілу статистичної ваги  $w_I = |\langle \varphi_I | \Psi \rangle|^2$  власних станів  $|\varphi_I\rangle$  операторів  $\hat{\mathcal{H}}$  і  $\hat{\eta}^2$ . Ці результати представлені на рис. 4.2.

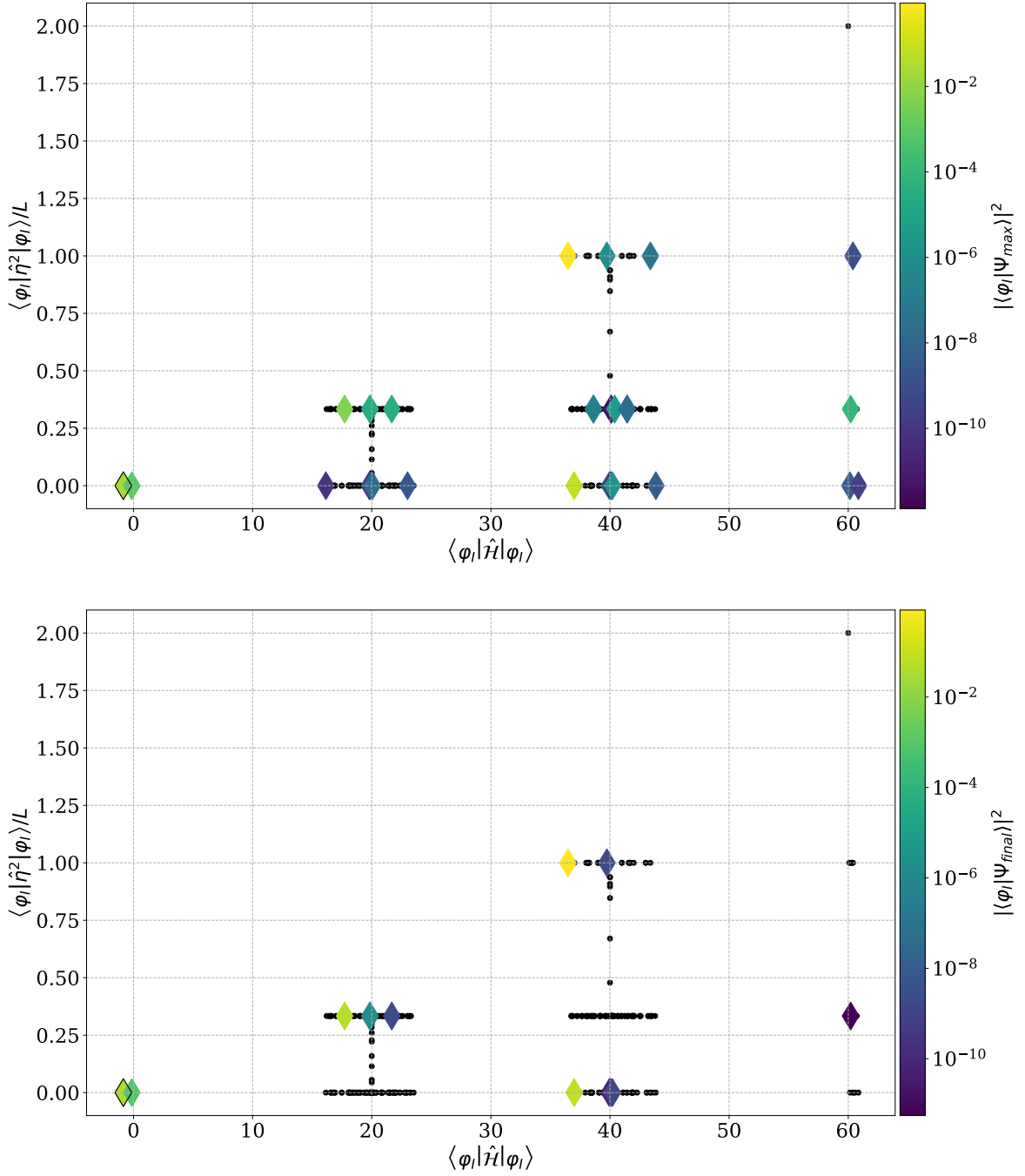


Рис. 4.2: Внески власних станів операторів  $\hat{H}$  і  $\hat{\eta}^2$  у стан системи  $|\Psi_{\max}\rangle$  з максимальним спостережуваним під час еволюції значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  (верхня діаграма) та у фінальний стан  $|\Psi_{\text{final}}\rangle = |\Psi(30/t_h)\rangle$  (нижня діаграма). Кольором (32 ромбики на верхній діаграмі і 13 на нижній) позначена статистична вага  $w_I = |\langle \varphi_i | \Psi \rangle|^2$ . Станам з  $w_I < 10^{-13}$  у відповідності чорні точки, а ромбик початкового стану має чорний контур. Еволюція відбувалася під дією зовнішнього поля (4.2) з  $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68t_h$ .

Варто підкреслити, що ані в стан  $|\Psi_{\max}\rangle$ , ані у  $|\Psi_{\text{final}}\rangle$  не дає внеску стан з енергією 60 і максимальним для даної системи значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + 1 \right) = 2$ . Інше важливе запитання – як еволюціонує  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  під дією

$\Phi(t)$  з параметрами  $A_0$  та  $\omega_p$ , що відмінні від оптимальних. На рис. 4.3 подано 9 кривих, що відповідають еволюції  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  під дією збуджень з усіма можливим комбінаціям амплітуд  $A_0 = 17.68, 18.68, 19.68$  та кутових частот  $\omega_p = 0.2, 0.3, 0.4$ .

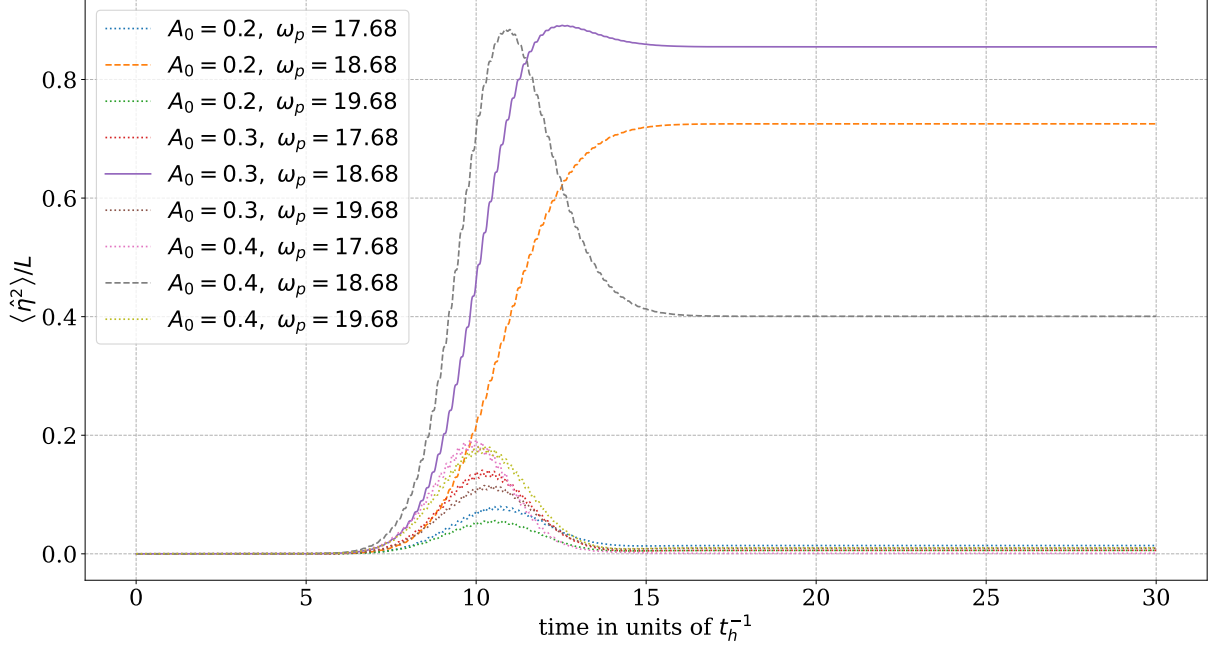


Рис. 4.3: Еволюція  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  під дією зовнішнього поля  $\Phi(t)$  для різних значень амплітуди  $A_0$  та кутової частоти  $\omega_p$ . Суцільна лінія відбповідає оптимальним параметрам. Штрихові – неоптимальній амплітуді та оптимальній частоті. Пунктирні – еволюції, що закінчується у станах зі значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ , близьким до нуля.

З рис. 4.3 можна зробити такі висновки: по-перше, частота  $\omega_p = 18.68t_h$  має бути резонансною (тільки за неї спостерігається помітне збудження надпровідних кореляцій), по-друге, за  $\omega_p = 18.68t_h$  відхилення від оптимального значення амплітуди призводить до суттєво різних величин  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  в кінцевому стані після остаточного вимкнення імпульсу зовнішнього поля. Щоб простежити результати розвитку надпровідних кореляцій під дією суттєво більшої вибірки імпульсів, побудуємо діаграму розподілу  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  у станах  $|\Psi_{\max}\rangle$  та  $|\Psi_{\text{final}}\rangle$  за амплітудами  $A_0 \in [0, 2.5]$  та частотами  $\omega_p \in [0, 37.68t_h]$ . Результати обчислень наведені на рис. 4.4. Ми спостерігаємо чіткий резонансний дублет поблизу  $\omega_p = U = 20t_h$ , за частот якого досягаються максимальні значення  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ . Якісно це можна пояснити розщепленням внаслідок тунелювання резонансної лінії  $\omega_p = U$ , що у наближенні окремих атомів відповідає народженню на вузлі електронної пари  $\uparrow, \downarrow$ .

За більших частот (розрахунки проводились до  $\omega_p = 68.68t_h$  (найвищий енергетичний рівень системи  $E_{\max} \approx 60.8525t_h$ )) збудження надпровідних кореляцій не спостерігалось.

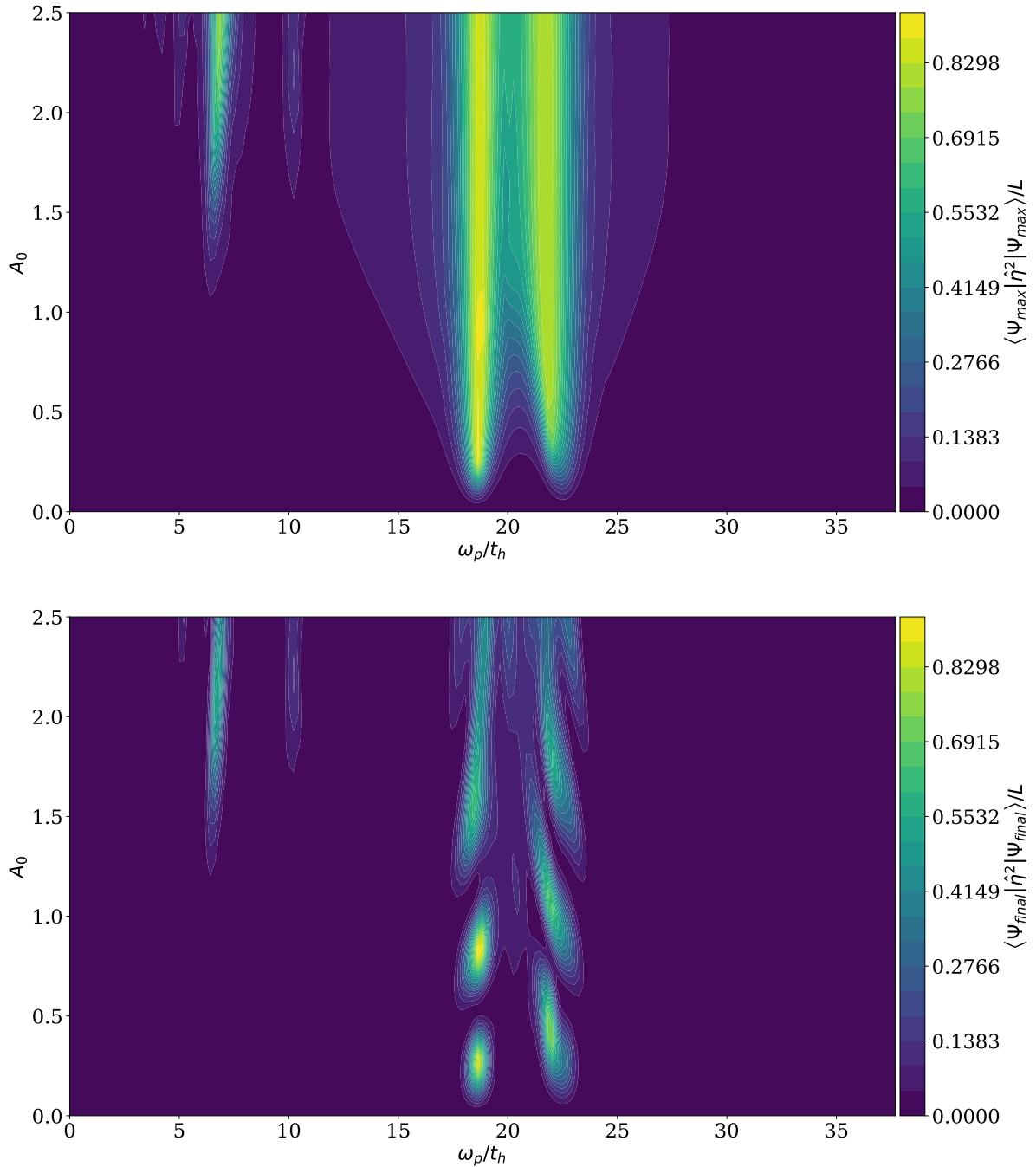


Рис. 4.4: Залежність максимального (верхній графік) та кінцевого (нижній графік) значень  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ , що досягаються в ході еволюції, від параметрів збуджувального імпульсу  $A_0$  та  $\omega_p$ . Часовий проміжок від  $t = 0$  до  $t = 30/t_h$  розбивався на  $10^3$  точок, що відповідає часовому кроку еволюції  $\sim 0.1T$ , де  $T = \frac{2\pi}{\omega_p}$  – період коливань збуджувального поля. Крок вздовж вісі  $\omega_p/t_h$  дорівнює 0.2, вздовж вісі  $A_0$  – 0.05.

## РОЗДІЛ 5

## Засади контролю за Ляпуновим

За результатами попереднього розділу постає запитання: чи можна покращити еволюцію надпровідних кореляцій для даних  $A_0$  та  $\omega_0$ ? Крім цього, цікавість становить запитання, чи можна під дією зовнішнього поля повернутися зі збудженого стану у нормальний. Квантовий контроль за Ляпуновим накладає умову на похідну середнього значення оператора. Для покращення розвитку  $\eta$ -кореляцій ми вимагатимемо  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle \geq 0$ , для їх ефективного пригнічення, – відповідно,  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle \leq 0$ .

Запишімо явний вигляд похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ . За теоремою Еренфеста ( $\hat{\eta}^2 \neq \hat{\eta}^2(t)$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle = i \langle [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\eta}^2] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{\eta}^2}{\partial t} \right\rangle = i \langle [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\eta}^2] \rangle. \quad (5.1)$$

Тут часткові похідні підкреслюють, що в загальному випадку оператори та стани можуть залежати від координати. Ми можемо замінити їх на повні похідні. Враховуючи комутаційні співвідношення, встановлені у другому розділі, бачимо:  $[\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\eta}^2] = [\hat{\mathcal{K}}(t), \hat{\eta}^2]$ . Тут  $\hat{\mathcal{K}}(t) = \hat{K}(t) + \hat{K}^\dagger(t)$  – кінетичний доданок часозалежного гамільтоніана (4.1). З урахуванням того, що  $\hat{K}(t) = -t_h \sum_i \sum_\sigma e^{i\Phi(t)} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} = e^{i\Phi(t)} \hat{K}$ ,  $[\hat{K}^\dagger, \hat{\eta}^\pm] = -[\hat{K}, \hat{\eta}^\mp]^\dagger$  та, згідно з (2.13),  $[\hat{K}, \hat{\eta}^\pm]^\dagger = [\hat{K}, \hat{\eta}^\mp]$ , комутатор  $[\hat{K}(t), \hat{\eta}^2]$  можна виразити через синус зовнішнього поля і оператор  $\hat{\mathcal{Q}}$  (5.3):

$$2 [\hat{K}(t), \hat{\eta}^2] = e^{i\Phi(t)} \left( \left\{ [\hat{K}, \hat{\eta}^+], \hat{\eta}^- \right\} + \left\{ [\hat{K}, \hat{\eta}^-], \hat{\eta}^+ \right\} \right) - e^{-i\Phi(t)} \left( \left\{ [\hat{K}, \hat{\eta}^-]^\dagger, \hat{\eta}^- \right\} + \left\{ [\hat{K}, \hat{\eta}^+]^\dagger, \hat{\eta}^+ \right\} \right) \equiv -2it_h \sin(\Phi(t)) \hat{\mathcal{Q}}. \quad (5.2)$$

Тут  $-t_h \hat{\mathcal{Q}} = \{[\hat{K}, \hat{\eta}^+], \hat{\eta}^-\} + \{[\hat{K}, \hat{\eta}^-], \hat{\eta}^+\} = \{[\hat{K}, \hat{\eta}^+], \hat{\eta}^-\} + h.c.$  Також можемо записати більш явний вигляд  $\hat{\mathcal{Q}}$ :

$$\hat{\mathcal{Q}} = \sum_i \sum_j (-1)^{i+j} \left\{ \left( \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i+1,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i+1,\uparrow}^\dagger \right), \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow} \right\} + h.c. \equiv \hat{q} + \hat{q}^\dagger. \quad (5.3)$$

За допомогою цього позначення рівняння (5.1) перетворюється на таке:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle = t_h \sin(\Phi(t)) \langle \hat{\mathcal{Q}} \rangle. \quad (5.4)$$

Одна з ознак коректно отриманої структури оператора  $\hat{Q}$  – дійсність його середнього значення:  $\langle \hat{Q} \rangle = \langle \hat{q} + \hat{q}^\dagger \rangle = \langle \hat{q} \rangle + \langle \hat{q} \rangle^* \in \mathbb{R}$ . Так і має бути, якщо йому пропорційна похідна від спостережуваного значення ермітового оператора. Простежмо за еволюцією  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$  і  $\langle \hat{Q} \rangle$  під дією імпульсу зовнішнього поля (4.2) (рис. 5.1 і рис. 5.2).

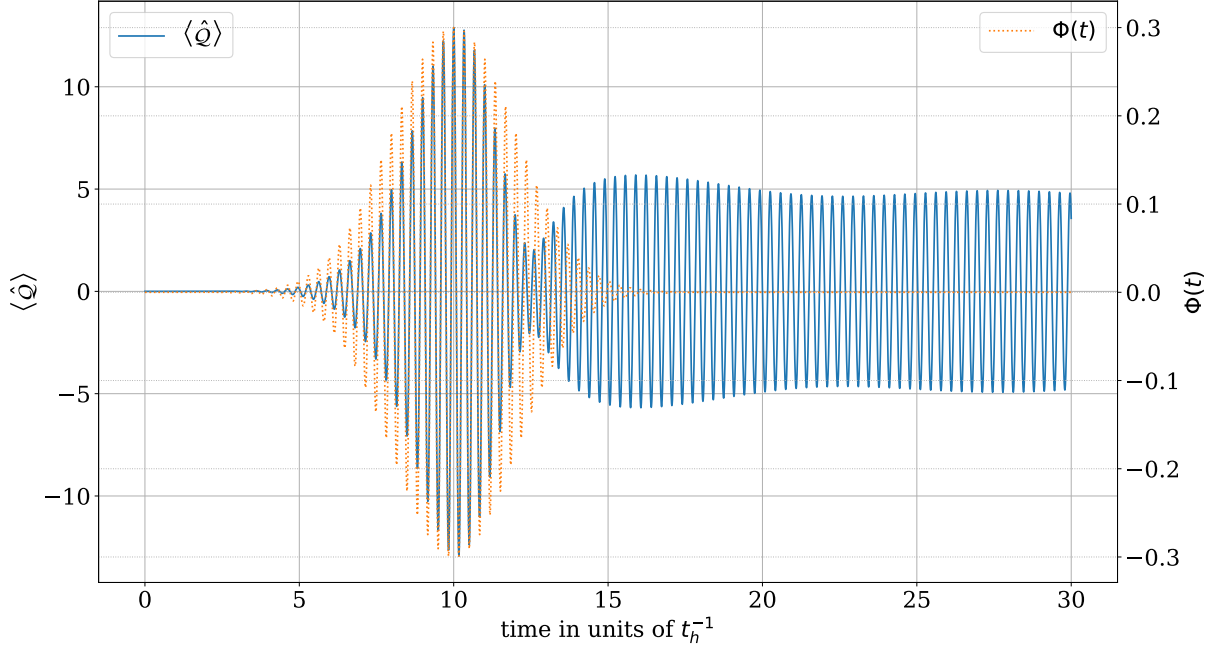


Рис. 5.1: Еволюція  $\langle \hat{Q} \rangle$  у напівзаповненій системі ( $N_\uparrow = N_\downarrow = L/2$ ) з періодичними граничними умовами під дією зовнішнього поля  $\Phi(t)$  (4.2).  $L = 6$ ,  $a = 1$ ,  $t_h = 1$ ,  $U = 20t_h$ ,  $t_p = 10/t_h$ ,  $\sigma_p = 2/t_h$ ,  $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68$ , крок еволюції  $\tau = 3t_h^{-1} \times 10^{-3}$ .

Якщо обрати  $\Phi(t)$  у вигляді

$$\Phi(\langle \hat{Q} \rangle(t)) = \arcsin \left( \frac{\langle \Psi(t) | \hat{Q} | \Psi(t) \rangle}{\max(|\{Q_i\}_{\text{eigen}}|)} \right), \quad (5.5)$$

то під час еволюції, згідно з (5.4), виконуватиметься умова  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle \geq 0$ . Тут  $\max(|\{Q_i\}_{\text{eigen}}|)$  – максимальний модуль власного значення оператора  $\hat{Q}$ . Під час чисельних розрахунків замість  $\max(|\{Q_i\}_{\text{eigen}}|)$  буде братися  $\lceil \max(|\{Q_i\}_{\text{eigen}}|) \rceil$  (значення, заокруглене вгору). Необхідно визначитися з умовою увімкнення контролю. Якщо це зробити на самому початку, амплітуда збуджувального сигналу буде нульова, та еволюція буде тривіальною. Логічно запропонувати вмикати контроль, коли похідна  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$  стає від’ємною, але під час осциляцій (рис. 5.2) вона набуває малих негативних

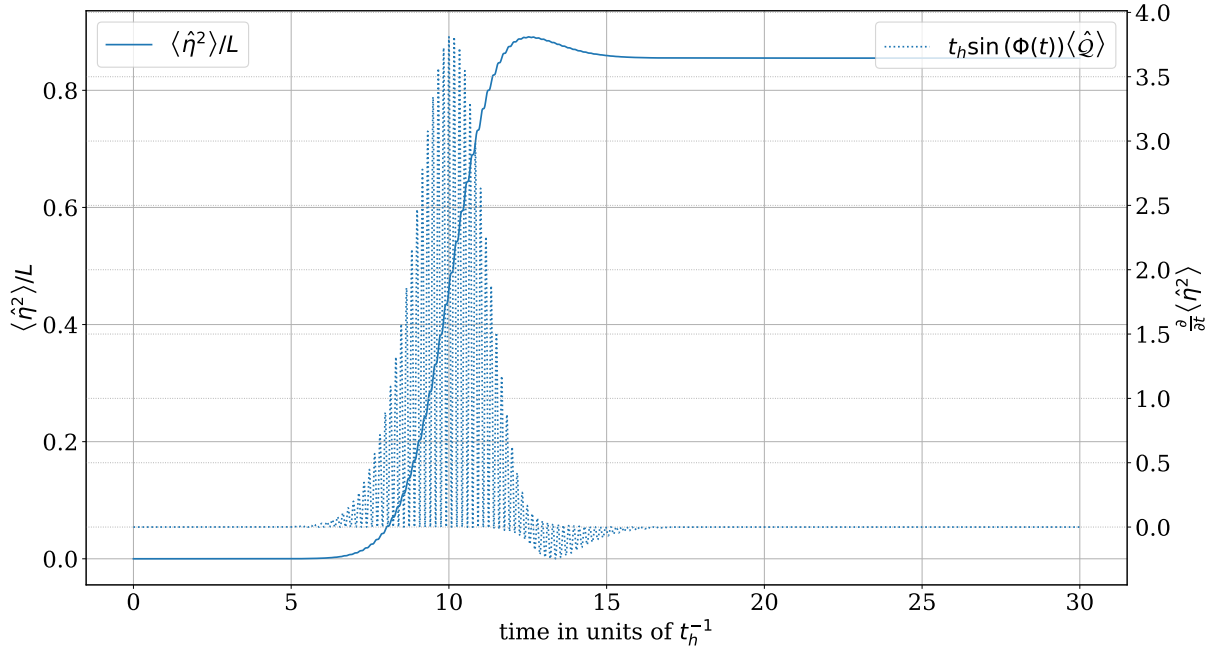


Рис. 5.2: Еволюція  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  і  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$  у напівзаповненій системі ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2$ ) з періодичними граничними умовами під дією зовнішнього поля  $\Phi(t)$  (4.2).  $L = 6$ ,  $a = 1$ ,  $t_h = 1$ ,  $U = 20t_h$ ,  $t_p = 10/t_h$ ,  $\sigma_p = 2/t_h$ ,  $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68$ , крок еволюції  $\tau = 3t_h^{-1} \times 10^{-3}$ .

значень від самого початку еволюції. Якщо обрати фіксоване від'ємне число  $\varepsilon$ , при досягненні похідною якого вмикається контроль, виявляється, що, по-перше, існує доволі суттєва залежність від вибору цього числа (емпірично було встановлено, що  $\varepsilon \sim -1 \times 10^{-3}$  є оптимальним), по-друге, амплітуда результуючого імпульсу має доволі різкий стрибок при переході від  $\Phi(t)$  до  $\Phi(\langle \hat{Q} \rangle(t))$  навіть у випадку простого придушення спадання  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle$  після досягнення максимуму за оптимальних умов ( $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68t_h$ ). Більш фізичною умовою, що не залежить від вибору параметра  $\varepsilon$  є увімкнення контролю, коли похідна стає від'ємною в середньому за період  $T = \frac{2\pi}{\omega_p}$  коливань  $\Phi(t)$ . Саме для неї і будуть представлені подальші результати. Таким чином, зокрема, вдається усунути стрибок амплітуди результуючого імпульсу за оптимальних умов ( $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68t_h$ ). Хоча для всіх випадків це не досягається.

У чисельному алгоритмі розраховується сума значень похідної за час від початку еволюції до періоду. Якщо вона додатна, часовий проміжок зсувається на один крок в бік кінця еволюції. Так повторюється доти, доки сума не стає від'ємною. Тоді від кінця часового інтервалу відступаємо на

половину періоду назад і вмикаємо контроль за Ляпуновим. Далі еволюція стану системи описується таким нелінійним рівнянням Шредінгера (часткова похідна за часом замінена повною через незалежність операторів і станів від координати):

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = -i\hat{\mathcal{H}}(\langle\hat{Q}\rangle(t))|\Psi(t)\rangle \quad (5.6)$$

Окремо слід зазначити, що контроль, у якому  $\Phi(t)$  замінюється на  $-\Phi(t)$  щоразу, коли похідна стає від'ємною, не враховує зміну “періоду”  $\langle\hat{Q}\rangle(t)$  під час загасання амплітуди імпульсу (рис. 5.3) і, отже, не є оптимальним. Після його увімкнення вдається зупинити спадання  $\langle\hat{\eta}^2\rangle$ , але не досягти його збільшення. Так само добре не зарекомендували себе контролю, у яких під арксинусом (5.5)  $\langle\hat{Q}\rangle(t)$  не масштабується, а змінюється його форма.

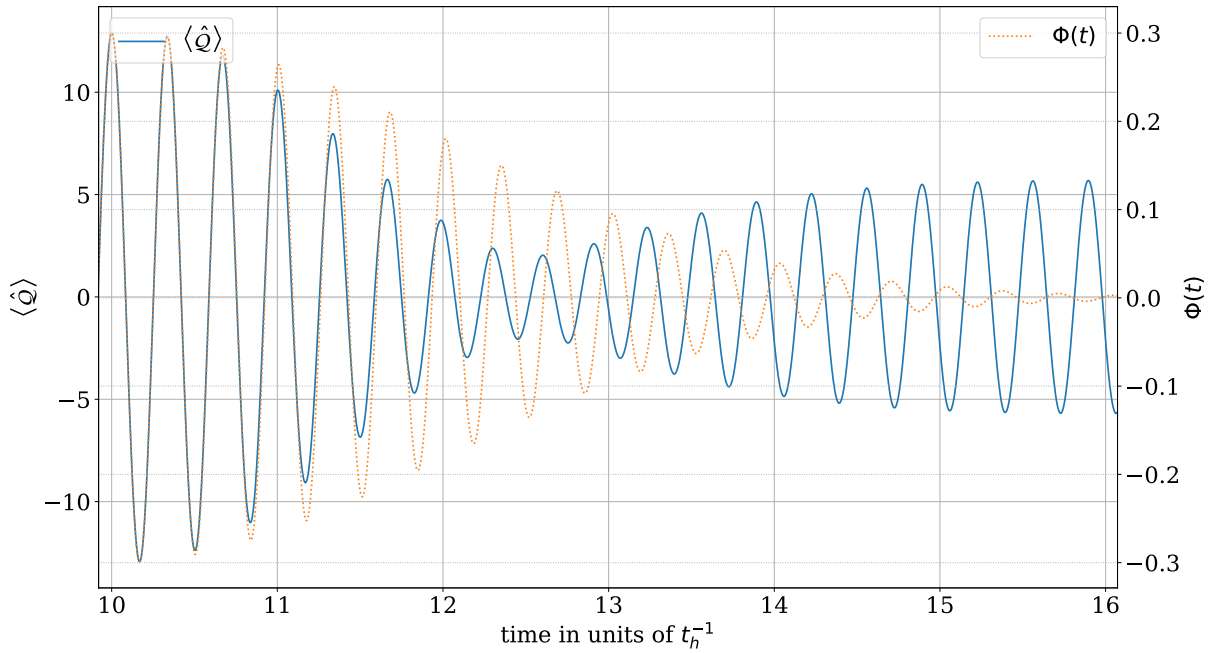


Рис. 5.3: Зміна “періоду” коливачь  $\langle\hat{Q}\rangle(t)$  під час загасання амплітуди збуджувального імпульсу  $\Phi(t)$ . Параметри системи та еволюції співпадають зі вказаними під рис. 5.1 і рис. 5.2.

## РОЗДІЛ 6

## Підсилення надпровідного спарювання

Застосуємо окреслений в минулому розділі алгоритм до напівзаповненої системи ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2 = 3$ ) з періодичними граничними умовами. Подаймо збуджувальний імпульс  $\Phi(t)$  (4.2), зачекаймо, коли середнє за період коливань значення похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$  стане від'ємним – увімкнімо контроль за Ляпуновим.

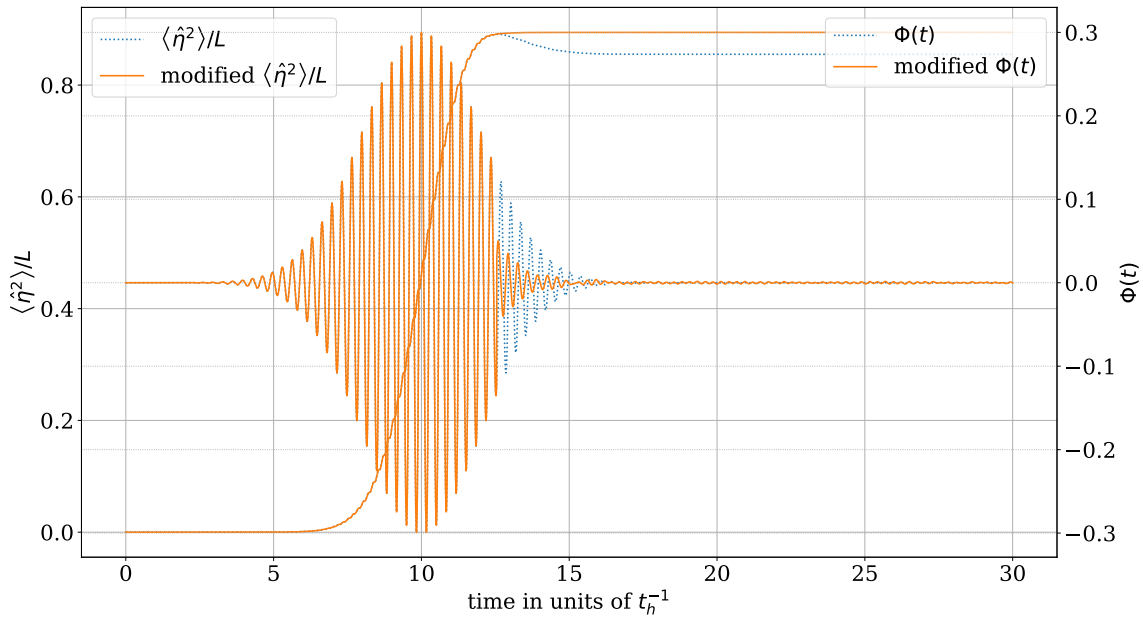


Рис. 6.1: Порівняння еволюції під дією оптимального  $\Phi(t)$  (4.2) ( $A_0 = 0.3$ ,  $\omega_p = 18.68t_h$ ) без (синій пуктир) та із (помаранчева суцільна лінія) застосуванням контролю за Ляпуновим після фіксування середнього негативного значення похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ .

Так, для оптимальних параметрів імпульсу вдається позбутися небажаного спадання  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  (рис. 6.1). Застосування контролю до решти випадків, представлених на рис. 4.3, дає помітне зростання кінцевого значення  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  (рис. 6.2). Від контролю за Ляпуновим у тому найпростішому вигляді, в якому ми його використовуємо, не варто було очікувати отримання гладкої еволюції  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  та результуючих імпульсів збуджувального поля без стрибків в області зшивки  $\Phi(t)$  із  $\Phi(\langle \hat{Q} \rangle(t))$  (див. рис. 6.2 та рис. 6.3). Порівняння вільної та контрольованої еволюцій після початкового збудження з  $A_0 = 0.2$ ,  $\omega_p = 19.68$  наведено на рис. 6.3. Як бачимо, в області зшивки  $\Phi(t)$  із  $\Phi(\langle \hat{Q} \rangle(t))$  поле, що зростало, починає стрибком спадати. У сенсі ж

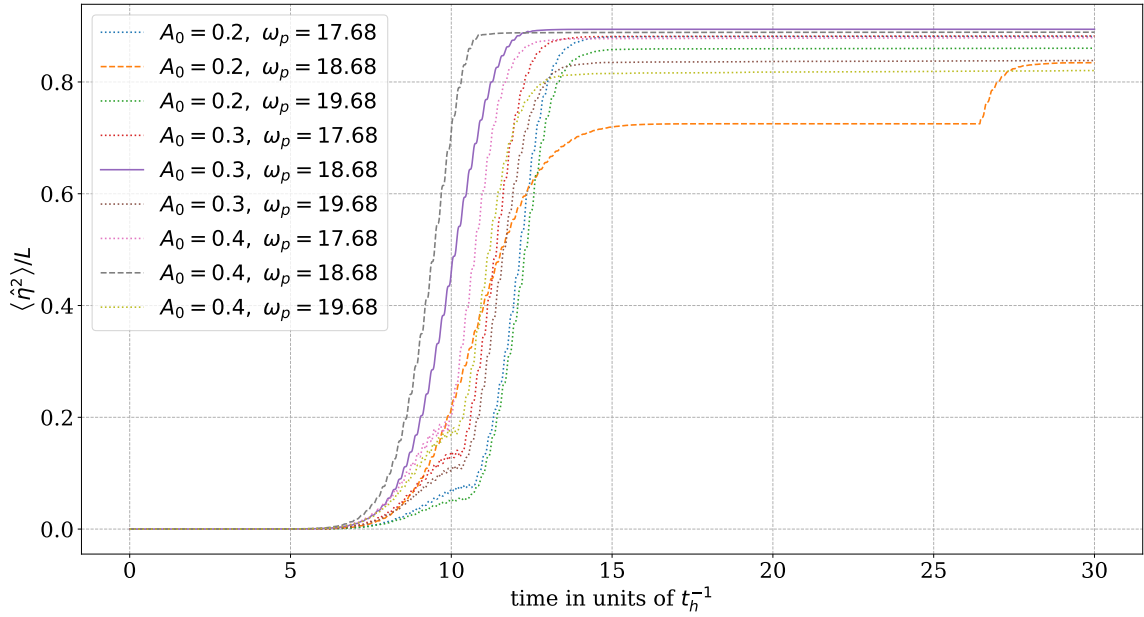


Рис. 6.2: Еволюція під дією оптимального  $\Phi(t)$  (4.2) ( $A_0 = 0.3, \omega_p = 18.68t_h$ ) із увімкненням контролю за Ляпуновим після фіксування середнього негативного значенням похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ .

збільшення кінцевого значення  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  ефективність контролю за Ляпуновим складно недооцінити. Щоб отримати повнішу картину результатів йо-

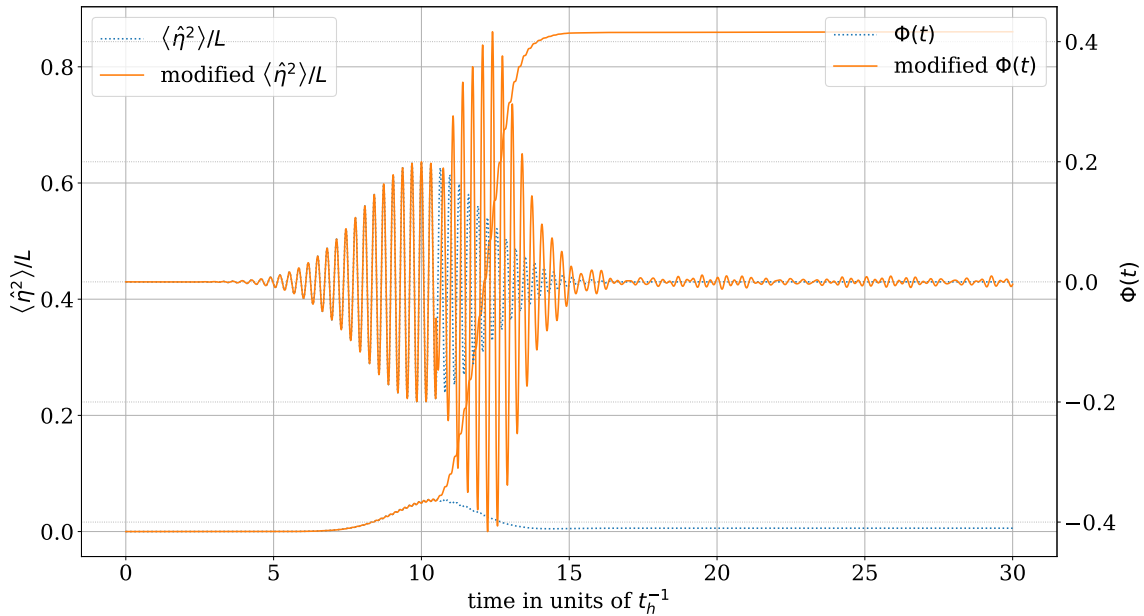


Рис. 6.3: Порівняння еволюції під дією неоптимального  $\Phi(t)$  (4.2) ( $A_0 = 0.2, \omega_p = 19.68t_h$ ) без (синій пуктир) та із (помаранчева суцільна лінія) застосуванням контролю за Ляпуновим після фіксування середнього негативного значенням похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ .

го застосування, побудуймо діаграму розподілу  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  у стані  $|\Psi_{\text{final}}\rangle$  (або  $|\Psi_{\text{max}}\rangle$ , що в даному випадку те ж саме) за амплітудами  $A_0 \in [0, 2.5]$  та частотами  $\omega_p \in [0, 37.68t_h]$  (рис. 6.4).

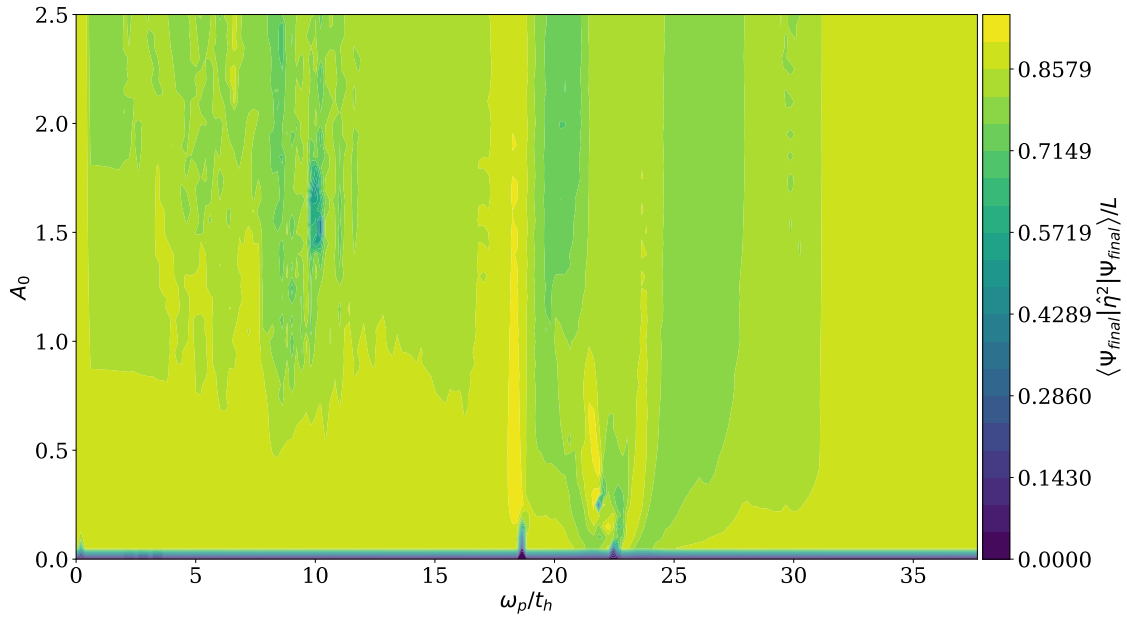


Рис. 6.4: Залежність кінцевого значення  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ , що досягається в ході еволюції з увімкненням контролю за Ляпуновим після фіксування середнього негативного значенням похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ , від параметрів збуджувального імпульсу  $A_0$  та  $\omega_p$ . Часовий проміжок від  $t = 0$  до  $t = 30/t_h$  розбивався на  $10^3$  точок, що відповідає часовому кроку еволюції  $\sim 0.1T$ , де  $T = \frac{2\pi}{\omega_p}$  – період коливань збуджувального поля. Крок вздовж вісі  $\omega_p/t_h$  дорівнює 0.2, вздовж вісі  $A_0$  – 0.05.

Як бачимо, практично для всіх станів досягається помітне збудження надпровідних кореляцій. Крім того, на частоті  $\omega_p \approx 18.3$  з'являється острівок більших значень  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$ , ніж досягаються без застосування контролю. Так, якщо на діаграмах рис. 4.4 максимальне досяжне значення було  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L \approx 0.8943$ , то на рис. 6.4 це  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L \approx 0.9376$ .

## РОЗДІЛ 7

## Пригнічення надпровідного спарювання

Коли система вже має нетривіальні надпровідні характеристики, може виникнути потреба перевести її за допомогою імпульсу електромагнітного поля у нормальний стан. Покажімо на кількох прикладах, що еволюція системи сильно залежить від початкових умов. Розгляньмо 5 моментів у кінці еволюції системи під впливом збурення вигляду (4.2) з оптимальними параметрами:

1. стан  $|\Psi_{\text{final}}\rangle$ ,
2. момент, коли  $\langle \hat{Q} \rangle$  максимальне,
3. момент, коли  $\langle \hat{Q} \rangle = 0$  та  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{Q} \rangle > 0$ ,
4. момент, коли  $\langle \hat{Q} \rangle$  мінімальне,
5. момент, коли  $\langle \hat{Q} \rangle = 0$  та  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{Q} \rangle < 0$ .

Вони позначені відповідними точками на рис. 7.1.

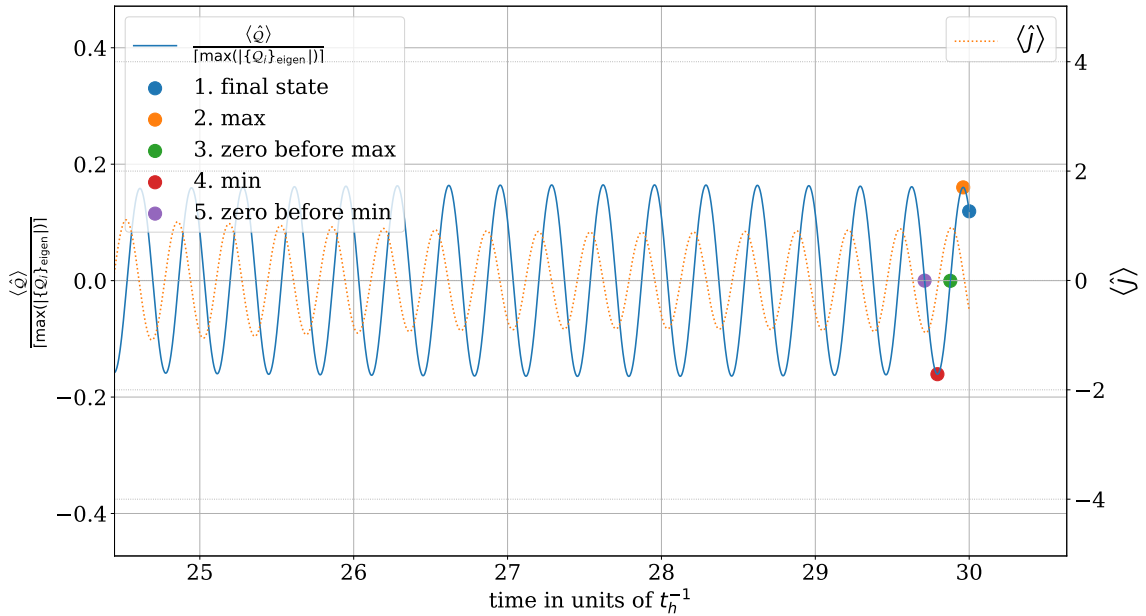


Рис. 7.1: Моменти часу на прикінцевому етапі еволюції системи під дією зовнішнього поля з оптимальними характеристиками, з яких починатиметься пригнічення надпровідних кореляцій.

Додатково до нормованого значення  $\langle \hat{Q} \rangle$  на рисунку подано спостережуване струму  $\langle \hat{J} \rangle$ , який задовольняє такому дискретному рівнянню неперервності  $i[\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}_j] = -\frac{1}{a} \left( \hat{J}_j(t) - \hat{J}_{j-1}(t) \right)$  і буде детальніше розглянутий у наступному розділі. Із графіка видний сталий фазовий зсув між  $\langle \hat{Q} \rangle$  та  $\langle \hat{J} \rangle$ . Тож, для вибору оптимального моменту подачі пригнічувального імпульсу потенційно можуть використовуватися показники струму в системі. З кривих на рис. 7.2 видно, що при еволюції з початкового стану  $\langle \hat{Q} \rangle = 0$ ,  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{Q} \rangle > 0$  нормоване середнє  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L$  досягає мінімального значення (перед невеликим зростанням).

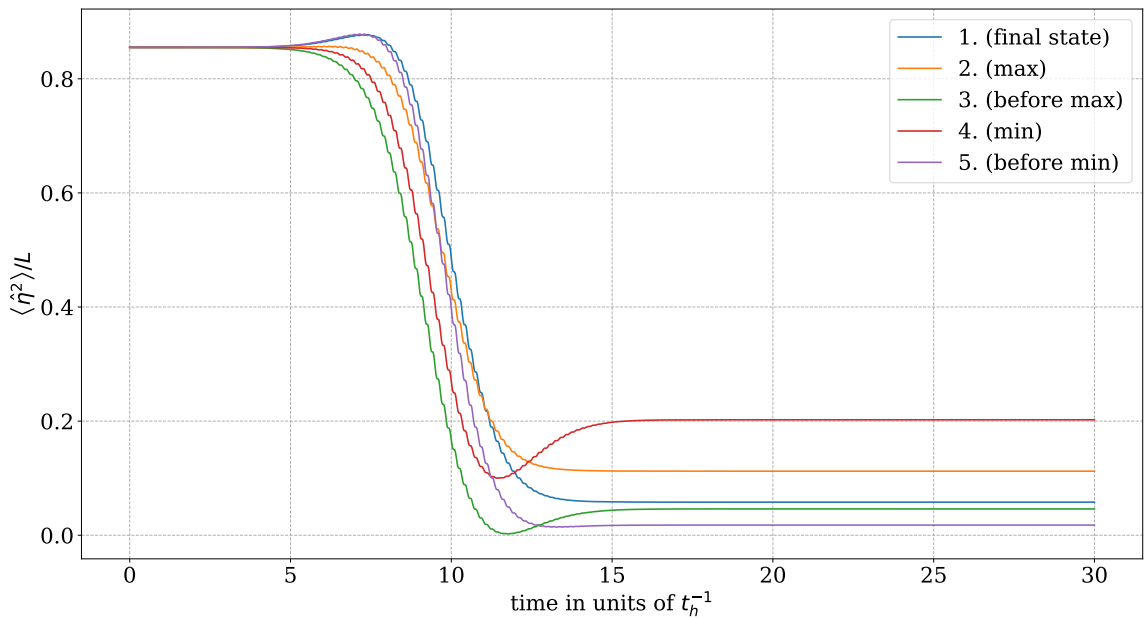


Рис. 7.2: Пригнічення надпровідного стану імпульсом вигляду (4.2) з оптимальними характеристиками без застосування контролю (5 різних початкових станів).

Тепер застосуємо квантовий контроль за Ляпуновим у режимі пригнічення. Для цього оберімо імпульс зовнішнього поля в такому вигляді:

$$\Phi(\langle \hat{Q} \rangle(t)) = -\arcsin \left( \frac{\langle \Psi(t) | \hat{Q} | \Psi(t) \rangle}{\max(|\{Q_i\}_{\text{eigen}}|)} \right). \quad (7.1)$$

Розгляньмо два моменти увімкнення контролю:

1. від самого початку еволюції,
2. після фіксування середнього позитивного значення похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ .

Узагальнені результати представлені на рис. 7.3. Виявляється, що перша умова увімкнення контролю призводить до приблизно однакових кінцевих значень. Водночас його застосування після фіксування позитивної середньої похідної дає у вже згаданому випадку початкового стану  $\langle \hat{Q} \rangle = 0$ ,  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{Q} \rangle > 0$  ефективніше пригнічення надпровідних кореляцій.

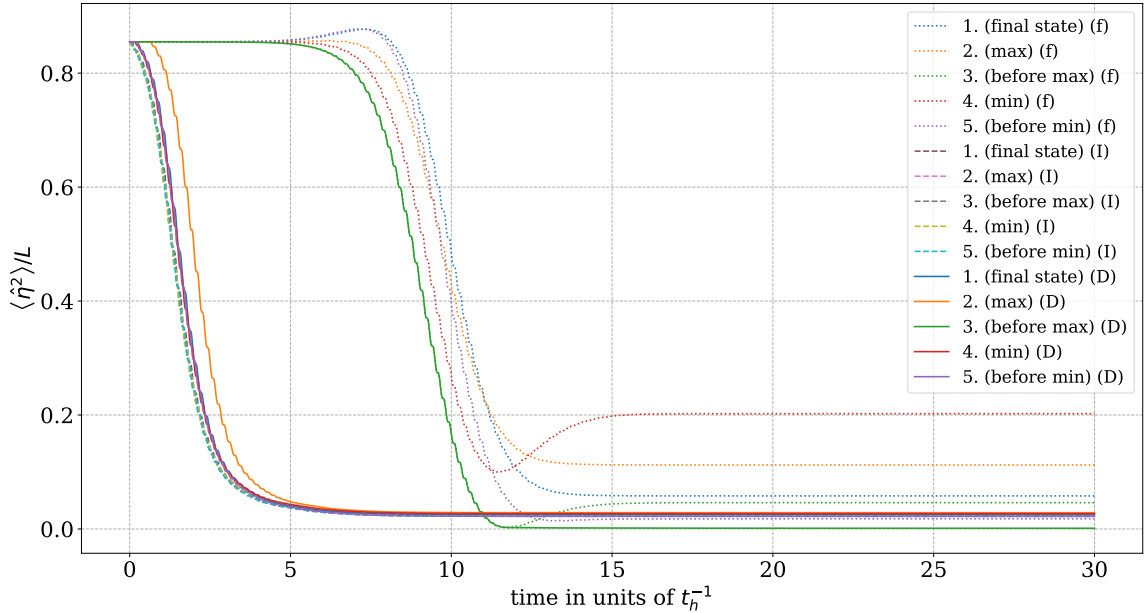


Рис. 7.3: Пригнічення надпровідного стану імпульсом вигляду (4.2) з оптимальними характеристиками без застосування контролю (пунктирні криві), із застосуванням контролю від самого початку (штрихові криві) та із застосуванням контролю після фіксування середнього позитивного значення похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$  (суцільні криві).

## РОЗДІЛ 8

## Теоретичні засади трекінгового контролю

Трекінговий контроль дає змогу спрямувати еволюцію системи таким чином, щоб спостережуване значення обраного оператора слідувало наперед заданій траєкторії [3]. Квантова система при цьому, звичайно, не стає детерміністичною. Розвиток усіх інших характеристик може бути довільним. Оскільки струм досить тривіально спостерігається експериментально, ми зосередимося саме на його трекінгу, хоча алгоритм дій для, наприклад, середнього значення оператора  $\langle \hat{S}^2 \rangle$  ідейно буде тим самим [4]. Почнімо з отримання явного вигляду  $\hat{J}$ . У неперервній системі він має задовольняти такому рівнянню неперервності (тут було враховано, що  $\hat{\rho}(x)$  не залежить від  $t$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\rho}(x) \rangle = -i \left\langle \left[ \hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}(x) \right] \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial x} \langle \hat{J}(x, t) \rangle, \quad (8.1)$$

де  $\hat{\rho}(x) = \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \hat{\psi}_{\sigma}(x)$ , а  $\hat{\psi}_{\sigma}(x)$  – стандартний ферміонний польовий оператор, що задовольняє співвідношенню  $\{\hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(x'), \hat{\psi}_{\sigma}(x)\} = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(x - x')$ . Перехід до нашого дискретного випадку здійснюється заміною  $\hat{\rho}(x) \rightarrow \hat{\rho}_j = \sum_{\sigma} \hat{c}_{j, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j, \sigma}$  та  $\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{1}{a} (( )_j - ( )_{j-1})$ , де  $a$  – стала ґратки,  $j$  – номер вузла:

$$i \left\langle \left[ \hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}_j \right] \right\rangle = -\frac{1}{a} \left( \langle \hat{J}_j(t) \rangle - \langle \hat{J}_{j-1}(t) \rangle \right). \quad (8.2)$$

Тоді рівняння, що визначає струм на двох сусідніх вузлах, можна записати таким чином:

$$i \left[ \hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}_j \right] = -\frac{1}{a} \left( \hat{J}_j(t) - \hat{J}_{j-1}(t) \right). \quad (8.3)$$

Задача знову зводиться до обчислення комутатора. Використовуючи отримані в другому розділі співвідношення, доходимо висновку:

$$\left[ \hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}_j \right] = \left[ \hat{K}(t), \hat{\rho}_j \right] - h.c. \quad (8.4)$$

Тут було враховано, що  $\hat{K}(t) = e^{i\Phi(t)} \hat{K}$  та  $[\hat{K}^{\dagger}(t), \hat{\rho}_j] = -[\hat{K}(t), \hat{\rho}_j^{\dagger}]^{\dagger} = -[\hat{K}(t), \hat{\rho}_j]^{\dagger}$ . Для того, щоб розкрити комутатор у правій частині рівнян-

ня (8.4), можна виконати перетворення на кшталт запропонованих у (8.5):

$$\begin{aligned} \frac{1}{-t_h e^{i\Phi(t)}} \left[ \hat{K}(t), \hat{\rho}_j \right] &= \sum_{\sigma} \sum_{\chi} \left( \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\chi}^{\dagger} \hat{c}_{j,\chi} - \hat{c}_{j,\chi}^{\dagger} \hat{c}_{j,\chi} \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \right) \hat{c}_{j+1,\sigma} + \\ &+ \hat{c}_{j-1,\sigma}^{\dagger} \left( \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{j,\chi}^{\dagger} \hat{c}_{j,\chi} - \hat{c}_{j,\chi}^{\dagger} \hat{c}_{j,\chi} \hat{c}_{j,\sigma} \right) = \sum_{\sigma} \left( -\hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j+1,\sigma} + \hat{c}_{j-1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} \right). \end{aligned} \quad (8.5)$$

Відповідно, явний вираз для оператора повного струму  $\hat{J}(t) = \sum_j \hat{J}_j(t)$  буде таким:

$$\hat{J}(t) = -iat_h \sum_j \sum_{\sigma} \left( e^{i\Phi(t)} \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j+1,\sigma} - h.c. \right). \quad (8.6)$$

На рис. 8.1 представлено характерну залежність спостережуваного струму від часу.

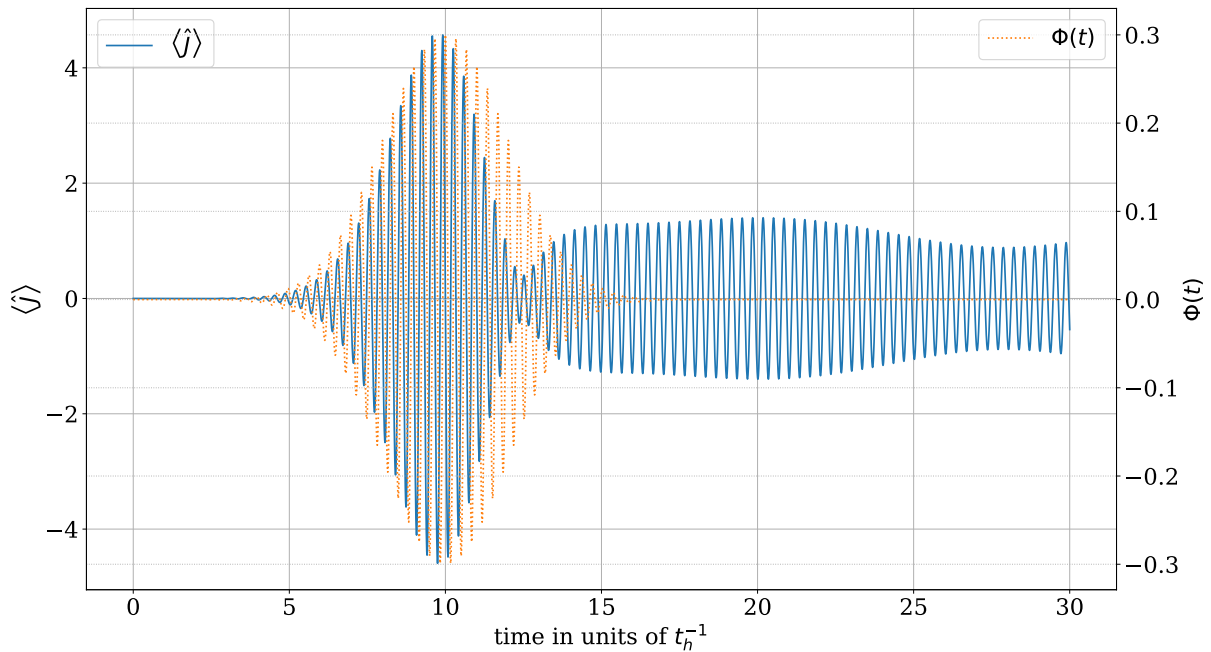


Рис. 8.1: Залежність спостережуваного струму  $\langle \hat{J} \rangle$  від часу при збудженні системи імпульсом вигляду (4.2) з оптимальними параметрами. Як і раніше,  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2 = 3$ ,  $U = 20t_h$ ,  $t_h = 1$ ,  $a = 1$ .

Тепер отримаймо трекінгове поле, що призводитиме до еволюції струму вздовж наперед заданої траєкторії  $J_T(t)$ . Покладімо  $\langle \hat{J} \rangle(t) \equiv J_T(t)$ :

$$J_T(t) = -iat_h \left( e^{i\Phi_T(t)} \left\langle \Psi(t) \left| \sum_j \sum_{\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j+1,\sigma} \right| \Psi(t) \right\rangle - h.c. \right). \quad (8.7)$$

Визначмо величини  $R(\Psi(t))$  та  $\theta(\Psi(t))$  так, як це зроблено в рівнянні (8.8):

$$\left\langle \Psi(t) \left| \sum_j \sum_\sigma \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} \right| \Psi(t) \right\rangle \equiv R(\Psi(t)) e^{i\theta(\Psi(t))}. \quad (8.8)$$

Тепер рівняння (8.7) можна переписати, як показано нижче:

$$J_T(t) = 2at_h R(\Psi(t)) \sin(\Phi_T(t) + \theta(\Psi(t))), \quad (8.9)$$

а з нього – виразити трекінгове поле:

$$\Phi_T(t) = \arcsin\left(\frac{J_T(t)}{2at_h R(\Psi(t))}\right) - \theta(\Psi(t)). \quad (8.10)$$

Із (8.10) випливають обмеження на застосування трекінгового контролю: по-перше,  $\left|\frac{J_T(t)}{2at_h R(\Psi(t))}\right| \equiv |X(t, \Psi(t))| < 1 - \epsilon_1$ , по-друге,  $R(\Psi(t)) > 0 + \epsilon_2$ . На рис. 8.2 наведені залежності  $|X(t, \Psi(t))|$  і  $R(\Psi(t))$  від часу у випадку успішної реалізації контролю (детальніше про цей випадок – у наступному розділі).

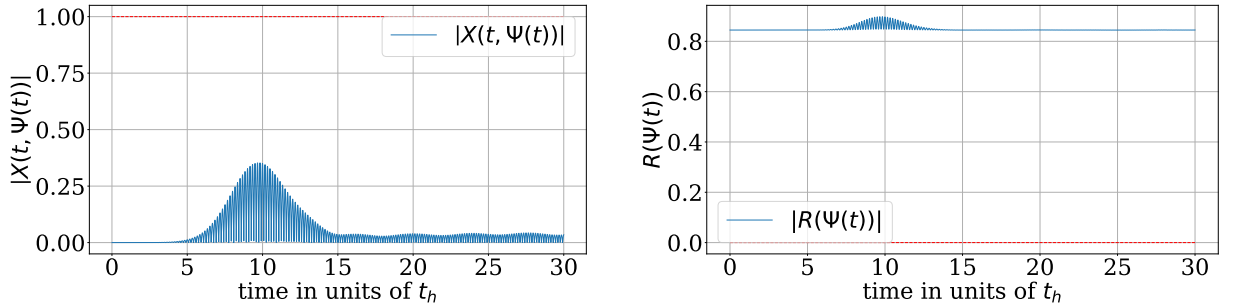


Рис. 8.2: Графіки залежності  $|X(t, \Psi(t))|$  та  $R(\Psi(t))$  від часу в системі, що еволюціонує з основного стану під впливом трекінгового поля  $\Phi_T(t)$ , що призводить до струмового відгуку, ідентичного струму системи з тим самим співвідношенням  $U/t_h = 20$  та у 5 разів меншою сталою ґратки  $a = 1$ , яка еволюціонує під дією поля  $\Phi(t)$  вигляду (4.2) зі стану з  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + 1 \right) = 2$  (див. рис. 4.2). Детальніше про цей випадок – у наступному розділі.

Перше обмеження  $|X(t, \Psi(t))| < 1 - \epsilon_1$  можна подолати масштабуванням амплітуди  $J_T(t)$  і підбором  $a$  у системі, якій “прищеплюють” невласивий струм. Внаслідок другого  $R(\Psi(t)) > 0 + \epsilon_2$  існують стани  $|\Psi_i\rangle$  з  $R(\Psi_i) = 0$ , із яких не можна запускати трекінговий контроль. На рис. 8.3

наведена діаграма розподілу станів  $|\varphi_I\rangle$  з визначеними енергією та  $\langle\hat{\eta}^2\rangle/L$  за величиною  $R(\varphi_I)$ . Як бачимо, наприклад, екзотичний стан з максимальним значенням  $\langle\hat{\eta}^2\rangle/L$  не підходить для “прищеплення” невластивого струму.  $\epsilon_1$  і  $\epsilon_2$  в умовах застосовності контролю залежать від точності чисельного методу. Наприклад, “прищеплений” струм може відрізнятись від трекового при порушенні першого обмеження навіть тоді, коли аргумент арксинуса у (8.10) за модулем не перевищує одиниці.

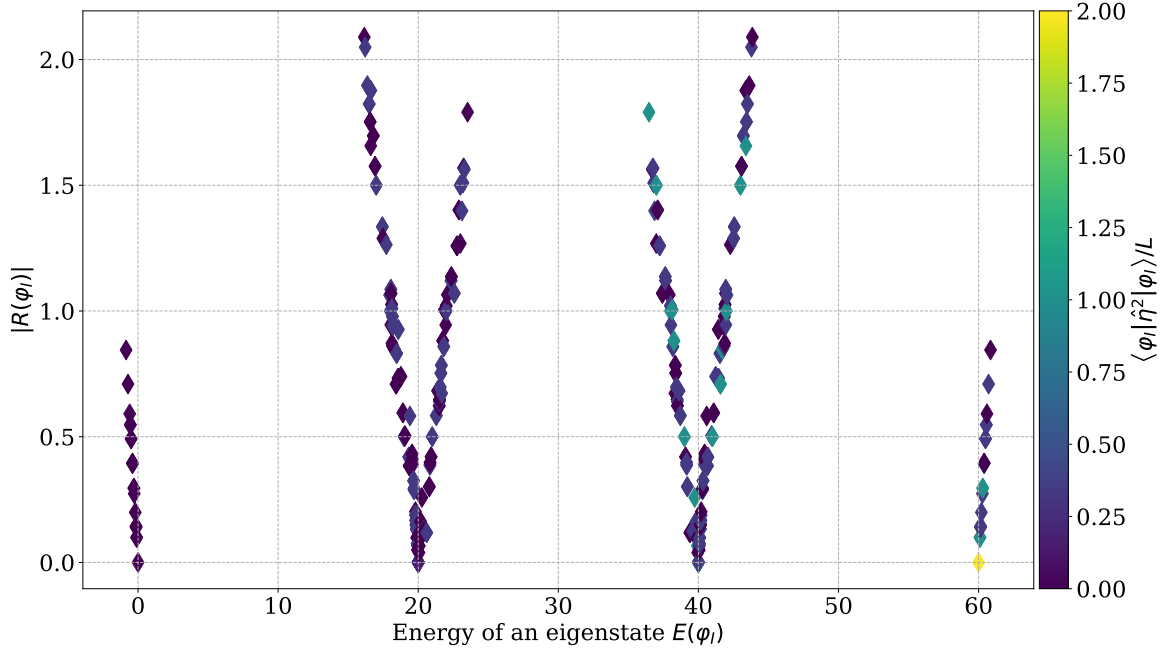


Рис. 8.3: Розподіл станів  $|\varphi_I\rangle$  з визначеними енергією та  $\langle\hat{\eta}^2\rangle/L$  за величиною  $R(\varphi_I)$ . Як і раніше,  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2 = 3$ ,  $U = 20t_h$ ,  $t_h = 1$ ,  $a = 1$ .

## РОЗДІЛ 9

### Застосування трекінгового контролю

У розділах 4 та 6 нам не вдалося перевести напівзаповнену систему з шести вузлів з періодичними граничними умовами у стан з максимальним значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + 1 \right) = 2$  (див. рис. 4.2), який рівномірно розподілений за двадцятьма чистими станами системи (вага кожного дорівнює 0.05), у яких всі електрони збираються на вузлах парами. Внески стану  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 0, 0, 0\rangle$  та всіх, що отримуються з нього мінімальною парною кількістю перестановок вузлів (наприклад,  $|\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 0, 0\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, 0, 0, \uparrow\downarrow\rangle$  тощо), негативні; внески решти – позитивні.

Якщо нас цікавлять лише характеристики струму, ми можемо отримати відгук, створований під дією імпульсу збуджувального поля системою, що перебувала в початковому надзбудженому стані з  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + 1 \right) = 2$ , від системи, що перебувала в основному стані за допомогою подачі правильного трекінгового поля. Як бачимо з рис. 8.3, основний стан задовольняє другій умові застосовності контролю. Для того, щоб задовольнити першій, ми подаватимемо трекінгове поле на систему зі збільшеною сталою ґратки. На рис. 9.1 наведено результат для  $a = 5$ .

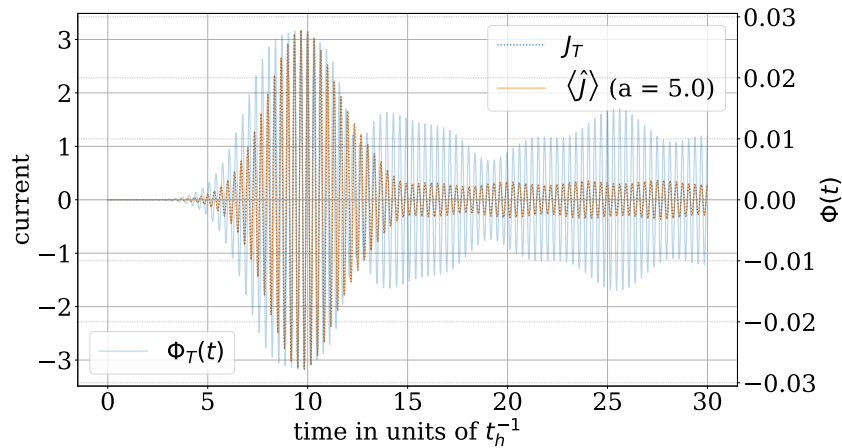


Рис. 9.1: “Прищеплення” струму, який збуджується оптимальним полем вигляду (4.2) у напівзаповненій системі  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2 = 3$ ,  $U = 20t_h$ ,  $t_h = 1$ ,  $a = 1$  з періодичними граничними умовами, яка перебувала в початковому надзбудженому стані з  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + 1 \right) = 2$ , до тієї ж системи, що перебувала в основному стані, зі збільшеною в 5 разів сталою ґратки.

Зменшуючи сталу ґратки  $a$ , ми наближаємося до порушення першої

умови застосовності трекінгового контролю. Якщо зменшити  $a$  з 5 до 3,  $\Phi_T(t)$  стає суттєво аперіодичним (див. рис. 9.2), а за  $a = 2$  та тієї ж точності чисельного алгоритму “прищеплений” струм перестає збігатися з  $J_T(t)$ . Трекінговий контроль у тому вигляді, в якому він застосовується нами,

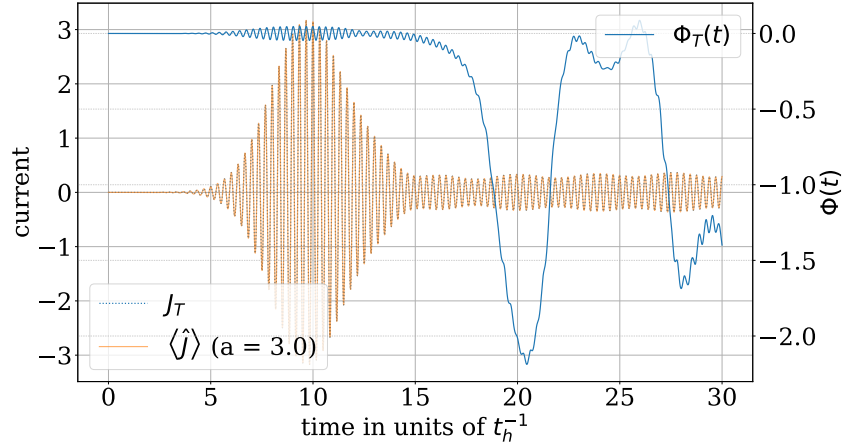


Рис. 9.2: Процес, що зображений на рис. 9.1, але стала ґратки тепер збільшена не у 5, а в 3 рази.

також дає змогу отримувати струмовий відгук, ненульовий у початковий момент часу. Так, ми можемо “прищепити” до основного стану струм, який відповідає еволюції системи з кінцевого стану  $|\Psi_{\text{final}}\rangle$  еволюції, представленої на рис. 4.1, під впливом звичайного збуджувального поля з оптимальними параметрами. На рис. 9.3 порівнено трекінгові поля у випадках, коли  $a$  збільшена у 25 та 100 разів.

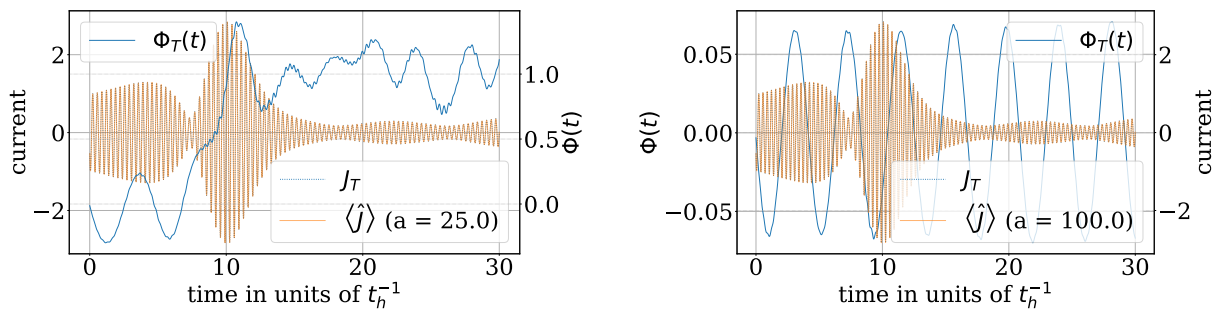


Рис. 9.3: “Прищеплення” струму, який збуджується оптимальним полем вигляду (4.2) у напівзаповненій системі  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2 = 3$ ,  $U = 20t_h$ ,  $t_h = 1$ ,  $a = 1$  з періодичними граничними умовами, яка перебувала у фінальному стані еволюції, представленої на рис. 4.1, до тієї ж системи, що перебувала в основному стані, зі збільшеною у 25 і 100 разів сталою ґратки.

## ВИСНОВКИ

Основну увагу в даній роботі приділено характеристикам надпровідних  $\eta$ -кореляцій в одновимірному напівзаповненому ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L/2$ ) ланцюзі Фермі–Габбарда з періодичними граничними умовами під дією зовнішнього збуджувального поля. Кількісна характеристика, що використовується для їх опису, – середнє значення оператора  $\hat{\eta}^2$ , структура якого аналогічна до структури оператора сумарного спіну  $\hat{\mathbf{S}}^2$ .

У найпростішому випадку  $L = 2$  гамільтоніан, оператор  $\hat{\eta}^2$ , квадрат сумарного спіну  $\hat{\mathbf{S}}^2$  та спін-спіновий корелятор між сусідніми вузлами  $\hat{\Delta}_s = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_{i+1}$  подано у вигляді матриць  $4 \times 4$ , а відповідні власні стани і вектори проаналізовано аналітично. Для кращого розуміння надпровідних та магнітних характеристик станів системи з визначеною енергією були побудовані відповідні діаграми розподілу.

Динаміку надпровідних кореляцій було розглянуто на прикладі системи з  $L = 6$  вузлів. Їх збудження виявляється сильно залежним від вибору частоти та амплітуди зовнішнього поля. Так, спостерігаються дві резонансні лінії ефективного розвитку надпровідного спарювання навколо частоти  $\omega_p = U$ , та плямиста структура на їх місці, що відповідає амплітудам імпульсів, за яких надпровідні кореляції зберігаються після вимкнення зовнішнього поля.

Для ефективного переведення системи у збуджений стан з ненульовим значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle$  було запропоновано використати квантовий контроль за Ляпуновим. Його основа – побудова імпульсу зовнішнього поля таким чином, що похідна  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$  підтримується невід’ємною впродовж усієї еволюції. Ми подавали той же імпульс, що й при вивченні вільної еволюції, і переходили до квантового контролю при спостереженні від’ємного середнього значення похідної  $\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\eta}^2 \rangle$ . За допомогою цього методу вдається побудувати поле, що починається імпульсом із практично будь-яким співвідношенням амплітуди й частоти, але виводить систему в стан з максимальним дозволеним правилами відбору значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle$ . Це, зокрема, дає змогу уникнути процедури підбору оптимальних параметрів для збудження стійкої надпровідності і побудувати бажаний імпульс на основі довільного сильно нелінійного сигналу. Очевидним недоліком цього методу є майже неминучий стрибок поля в області зшивки пробного імпульсу з тим, що будується за

Ляпуновим.

Контроль за Ляпуновим також було використано під час розв'язання задачі пригнічення надпровідних кореляцій у вже збудженій системі. На прикладі цього процесу було показано нелокальність контролю та звернуто увагу на можливість використання струму системи для вибору моменту часу, в який подання імпульсу призведе до найбільш ефективного пригнічення надпровідності.

Крім контролю за Ляпуновим, нами було використано квантовий трекінговий контроль. За його допомогою еволюцію системи можна спрямувати таким чином, що середнє обраного оператора змінюватиметься із часом вздовж наперед заданої траєкторії. Якщо у досліді мають значення лише характеристики струму, можна не переводити систему у необхідний стан, а “прищепити” теоретично розрахований струм до наявного стану системи. У даній роботі, зокрема, від основного стану було отримано відгук, ідентичний до відгуку стану із недосяжним за звичайних умов максимально можливим значенням  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle / L = \frac{1}{2} \left( \frac{L}{2} + 1 \right)$ . Окремо було проаналізовано обмеження, що накладаються на застосування цього квантового контролю.

Можливими розвитками даної роботи є передовсім пошук алгоритму згладжування стрибку результуючого поля, що отримується після використання контролю за Ляпуновим, та глибше вивчення можливостей застосування для досягнення більш ефективного пригнічення надпровідних кореляцій зв'язку між відповідальним за зміну  $\langle \hat{\eta}^2 \rangle$  середнім значенням оператора  $\hat{Q}$  і спостережуваним струмом. Окремими напрямками подальших досліджень є квантовий контроль магнітних характеристик системи і застосування методів асимптотичного контролю, які квадратичні за середніми значеннями операторів і вимагають суттєво більшої точності чисельних розрахунків.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. T. Kaneko, T. Shirakawa, S. Sorella, and S. Yunoki, “Photoinduced  $\eta$  Pairing in the Hubbard Model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 122, p. 077002, Feb 2019.
2. T. Kaneko, S. Yunoki, and A. J. Millis, “Charge stiffness and long-range correlation in the optically induced  $\eta$ -pairing state of the one-dimensional Hubbard model,” *Phys. Rev. Res.*, vol. 2, p. 032027, Jul 2020.
3. G. McCaul, C. Orthodoxou, K. Jacobs, G. H. Booth, and D. I. Bondar, “Driven Imposters: Controlling Expectations in Many-Body Systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 183201, May 2020.
4. G. McCaul, C. Orthodoxou, K. Jacobs, G. H. Booth, and D. I. Bondar, “Controlling arbitrary observables in correlated many-body systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 101, p. 053408, May 2020.
5. A. Sommerfeld and H. Bethe, *Elektronentheorie der metalle*, vol. 19. Springer-Verlag, 2013.
6. W. Pauli Jr, “Über gasentartung und paramagnetismus,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, vol. 41, no. 2, pp. 81–102, 1927.
7. A. Sommerfeld, “Zur elektronentheorie der metalle,” *Naturwissenschaften*, vol. 15, no. 41, pp. 825–832, 1927.
8. F. Bloch, “Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern,” *Zeitschrift für physik*, vol. 52, no. 7, pp. 555–600, 1929.
9. M. C. Gutzwiller, “EFFECT OF CORRELATION ON THE FERROMAGNETISM OF TRANSITION METALS,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 159–162, Mar 1963.
10. J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 276, no. 1365, pp. 238–257, 1963.
11. J. Kanamori, “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, pp. 275–289, 09 1963.
12. E. H. Lieb and F. Y. Wu, “Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 20, pp. 1445–1448, Jun 1968.
13. J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible High  $T_c$  Superconductivity in the Ba–La–Cu–O System,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 64, no. 2, pp. 189–193, 1986.

14. M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, "Superconductivity at 93 K in a New Mixed-Phase Y-Ba-Cu-O Compound System at Ambient Pressure," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, pp. 908–910, Mar 1987.
15. C. N. Yang, " $\eta$  Pairing and Off-Diagonal Long-Range Order in a Hubbard Model," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 63, pp. 2144–2147, Nov 1989.
16. C. N. Yang, "Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 34, pp. 694–704, Oct 1962.
17. D. Fausti, R. Tobey, N. Dean, S. Kaiser, A. Dienst, M. Hoffmann, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, and A. Cavalleri, "Light-Induced Superconductivity in a Stripe-Ordered Cuprate," *Science (New York, N.Y.)*, vol. 331, pp. 189–91, 01 2011.
18. W. Hu, S. Kaiser, D. Nicoletti, C. Hunt, I. Gierz, M. Hoffmann, M. Le Tacon, T. Loew, B. Keimer, and A. Cavalleri, "Optically enhanced coherent transport in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$  by ultrafast redistribution of interlayer coupling," *Nature materials*, vol. 13, p. 705–711, July 2014.
19. S. Kaiser, C. R. Hunt, D. Nicoletti, W. Hu, I. Gierz, H. Y. Liu, M. Le Tacon, T. Loew, D. Haug, B. Keimer, and A. Cavalleri, "Optically induced coherent transport far above  $T_c$  in underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ ," *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 184516, May 2014.
20. M. Mitrano, A. Cantaluppi, D. Nicoletti, S. Kaiser, A. Perucchi, S. Lupi, P. Di Pietro, D. Pontiroli, M. Riccò, S. R. Clark, *et al.*, "Possible light-induced superconductivity in  $\text{K}_3\text{C}_{60}$  at high temperature," *Nature*, vol. 530, no. 7591, pp. 461–464, 2016.
21. A. Cantaluppi, M. Buzzi, G. Jotzu, D. Nicoletti, M. Mitrano, D. Pontiroli, M. Riccò, A. Perucchi, P. Di Pietro, and A. Cavalleri, "Pressure tuning of light-induced superconductivity in  $\text{K}_3\text{C}_{60}$ ," *Nature Physics*, vol. 14, no. 8, pp. 837–841, 2018.
22. M. A. Sentef, A. F. Kemper, A. Georges, and C. Kollath, "Theory of light-enhanced phonon-mediated superconductivity," *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 144506, Apr 2016.
23. D. M. Kennes, E. Y. Wilner, D. R. Reichman, and A. J. Millis, "Transient superconductivity from electronic squeezing of optically pumped phonons,"

- Nature Physics*, vol. 13, p. 479–483, Jan. 2017.
24. K. Ido, T. Ohgoe, and M. Imada, “Correlation-induced superconductivity dynamically stabilized and enhanced by laser irradiation,” *Science advances*, vol. 3, no. 8, p. e1700718, 2017.
  25. G. Mazza and A. Georges, “Nonequilibrium superconductivity in driven alkali-doped fullerides,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 064515, Aug 2017.
  26. P. Weinberg and M. Bukov, “QuSpin: a Python package for dynamics and exact diagonalisation of quantum many body systems part I: spin chains,” *SciPost Phys.*, vol. 2, p. 003, 2017.
  27. P. Weinberg and M. Bukov, “QuSpin: a Python package for dynamics and exact diagonalisation of quantum many body systems. Part II: bosons, fermions and higher spins,” *SciPost Phys.*, vol. 7, p. 020, 2019.
  28. O. Peletmynskiy, Y. Slyusarenko, and A. Sotnikov, *Theory of exotic states in quantum Fermi and Bose systems*. Kyiv: Naukova Dumka, 2023. [in Ukrainian].
  29. M. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*. Wiley, 2006.