

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)

МАГІСТРА

на тему

укр. Дослідження сильнокорельованих фаз у газах лужноземельних
та їм подібних атомів за допомогою підходу
динамічної теорії середнього поля.

англ. Many-body phases in optical-lattice systems with
alkaline-earth-like atoms. Dynamical Mean Field approach.

Виконав: студент 2-го курсу магістратури,
групи ТЯ-61

спеціальності 105 прикладна фізика та
наноматеріали

освітня програма: Експериментальна
ядерна фізика та фізика плазми

Білоконь Е.О. _____
(особистий підпис)

Керівник д.ф.-м.н., ст. досл.

Сотніков А.Г. _____
(особистий підпис)

Рецензент д.ф.-м.н., проф., акад.

Слюсаренко Ю.В. _____
(особистий підпис)

АНОТАЦІЯ

Робота присвячена дослідженню властивостей ультрахолодних газів лужноземельних металів та їм подібних атомів, розміщених у станозалежних квазі-двовимірних оптичних ґратках, які можуть бути ефективно описані двоорбітальною моделлю Габбарда. Задля врахування ефектів (гармонічної) пастки, яка неминуче присутня в усіх експериментах із ультрахолодними газами на ґратках, а також отримання розподілів густини частинок у реальному просторі, локальних параметрів порядку та інших локальних фізичних величин, нами використано теоретичний підхід динамічного середнього поля із наближенням локальної густини.

У певних діапазонах густин ми досліджуємо стабільність різних типів сильно корельованих фаз атомної системи, а також визначаємо критичну температуру, нижче якої є можливість спостерігати магнітно- або орбітально-впорядковані стани. Щоб врахувати ефекти близькості, які зазвичай присутні на границях між фазами в сильно корельованих системах, ми проводимо узагальнення теоретичного підходу, використовуючи динамічну теорію середнього поля в реальному просторі.

ABSTRACT

We study finite-temperature properties of ultracold mixtures of alkaline-earth-like atoms in state-dependent quasi-two-dimensional optical lattices that can be effectively described by the two-band Hubbard model. We use the dynamical mean-field approach with the local-density approximation to include the effects of a (harmonic) trap, which is inevitably present in all experiments with ultracold gases on the lattices, and to obtain the real-space distributions of the density of particles, local order parameters and other local physical observables relevant for the experiments.

In certain ranges of densities, we investigate the stability of different possible strongly correlated phases of the atomic system. We estimate the critical temperatures below which the long-range ordered phases emerge. In order to account for the proximity effects that are usually present at the boundaries between phases in strongly-correlated systems, we extend our analysis using the real-space generalization of dynamical mean-field theory.

ЗМІСТ

ВСТУП	6
Огляд літератури	9
РОЗДІЛ 1 Лужноземельні та їм подібні атоми в оптичних ґратках	12
1.1 Атом у пастці	12
1.1.1 Радіаційні оптичні сили	12
1.1.2 Дипольні оптичні сили	13
1.2 Магнітооптичні пастки	15
1.3 Взаємодії між атомами	16
1.4 Резонанс Фешбаха	17
1.5 Лужноземельні і їм подібні атоми	19
РОЗДІЛ 2 Модель Габбарда	22
2.1 Формулювання моделі Габбарда	22
2.1.1 Локальний базис моделі	26
2.1.2 Граничні випадки	27
2.1.3 Симетрії	29
2.2 Багаторбітальна модель Габбарда	30
2.3 Двоорбітальна модель Габбарда	32
РОЗДІЛ 3 Динамічна теорія середнього поля	35
3.1 Функції Гріна як математичний апарат для опису систем багатьох частинок	35
3.2 Математичне формулювання DMFT	37
3.3 Граничні випадки	43
3.3.1 Границя невзаємодійних атомів ($U = 0$)	43
3.3.2 Границя за відсутності стрибків ($t_{ij} = 0$)	43
3.4 Домішковий розв'язувач — точна діагоналізація	44
3.5 DMFT на двочастинній ґратці	46
3.6 Багатоорбітальна динамічна теорія середнього поля	47
3.7 Динамічна теорія середнього поля у реальному просторі	49
РОЗДІЛ 4 Результати	51
4.1 Залежність критичної температури від густини атомів у ґратці	53
4.2 Орбітальні та спінові корелятори між вузлами ґратки	55
4.3 Залежність густини g та e атомів від хімічного потенціалу	58

4.4	Метод динамічного середнього поля у реальному просторі	61
	ВИСНОВКИ	64
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	67

ВСТУП

Перші десятиліття двадцятого століття стали початком формування зовсім нової теорії, яка повинна була пояснити явища, що не підкоряються законам класичної фізики. З появою квантової механіки наукове товариство почало відкривати закони мікросвіту, описувати багато аспектів природи в масштабі атомів, а також використовувати отриманні знання для технічного прогресу. Тим не менш, не дивлячись на зроблений за ці часи прорив, існує безліч аспектів опису квантових процесів.

Так, наприклад, системи багатьох частинок все ще залишаються недостатньо зрозумілими і, відтак, привертають велику увагу науковців. Без сумніву, теорія квантової механіки забезпечує надзвичайно точний опис явищ, що мають прояв на рівні мікросвіту та пов'язані з взаємодією багатьох частинок. На відміну від класичної фізики, ми маємо змогу оперувати такими поняттями як ймовірність, принцип суперпозиції, квантова заплутаність тощо. Однак через введення додаткових понять для опису квантових ефектів, виникає необхідність одночасного розгляду кожного можливого стану системи в математичному описі задачі. Зі збільшенням частинок в системі, тобто зі збільшенням кількості ступенів вільності, це призводить до експоненціального зростання гільбертового простору. Таке зростання робить квантову механіку досить “громіздкою”, а отже точне вирішення проблеми при врахуванні повної квантової природи є майже неможливим. Як результат, ми маємо лише обмежене розуміння щодо взаємодійних квантових систем.

Альтернативним підходом до вивчення квантових систем став розвиток квантових симуляцій, інтерес до яких значно зростає [1–3]. Основна ідея полягає в дослідженні властивостей основного стану, вимірюванні різноманітних середніх фізичних величин, а також в моделюванні поведінки з плином часу за допомогою синтетичних квантових систем, що є спрощеними аналогами справжніх систем.

Протягом останніх десятиліть науковцями було розроблено ряд квантових моделей, серед яких особливу увагу приділяють ультрахолодним атомам, що є гарними зразками для аналізу сильновзаємодійних систем. Для вивчення фізики багатьох частинок та імітації систем конденсованої речовини ультрахолодні атоми захоплюються в оптичні ґратки [4–7] (які, в свою

чергу, можуть бути станозалежними [8–10]), що, насамперед, дає ряд переваг, таких як ізолюваність від навколишнього середовища, можливість використання різних потенціалів, що змінюють геометрію та вимірність ґратки, налаштування взаємодій за допомогою резонансів Фешбаха.

Темою цієї роботи є дослідження сильнокорельованих фаз у газах лужноземельних та їм подібних атомів за допомогою підходу динамічної теорії середнього поля. За скінченних температур ми надамо теоретичний аналіз поведінки основного стану атомів ^{87}Sr та ^{171}Yb , що знаходяться у станозалежній квазі-двовимірній просторово-періодичній оптичній ґратці за відсутності, а також за наявності зовнішнього потенціалу. Важливість даної роботи полягає не тільки в розширенні вже відомих уявлень про вплив взаємодії у квантових фермі-газах, а й в формуванні нових знань щодо можливих магнітних та орбітальних впорядкувань, властивих складним твердотільним системам, що можуть бути описані за допомогою квантових симуляцій з використанням ультрахолодних атомів.

В основній частині роботи ми проаналізуємо теоретичні відомості про атоми, що знаходяться під дією електромагнітного поля, а також наведемо деякі деталі теорії розсіювання для розуміння взаємодій між частинками та можливості налаштування короткодійних взаємодій між ними за допомогою резонансів Фешбаха. Без особливих деталей ми розглянемо принцип магнітооптичної пастки, що є одним з найпопулярніших інструментів для охолодження та утримання квантових газів. Окрему увагу приділено атомним системам, що знаходяться в оптичних ґратках, а саме лужноземельним та їм подібним атомам. Завдяки унікальній структурі, результатом якої є збереження $SU(N)$ симетрії взаємодій, а також наявності довгоіснуючих метастабільних збуджених станів, ця група атомів є одним із найкращих зразків для проведення квантових симуляцій.

Система, яка досліджується в цій дипломній роботі, описується моделлю Фермі–Габбарда. З появою цієї моделі науковці зробили сильний прорив у вивченні різноманітних впорядкувань та явищ, що виникають в твердих тілах. Для отримання повної інформації про модель, ми почнемо з аналізу її формулювання, граничних випадків, а також наявності симетрій. Необхідність коректного опису систем з багатоорбітальною структурою, а саме взаємодій між атомами в різних орбітальних станах, вимагає від нас ви-

значення багатоорбітальної моделі Фермі–Габбарда. Ми отримаємо гамільтоніан, який включає різноманітні взаємодії, що характерні ферміонним ізотопам атомів ^{87}Sr та ^{171}Yb .

Як було зазначено вище, отримання точного математичного опису системи, що складається з багатьох взаємодійних частинок, є неможливим в умовах сьогодення. Саме тому один з розділів роботи присвячений наближеному методу, динамічній теорії середнього поля, що допомагає досліджувати квантові задачі сильно корельованих систем. Ми розглянемо математичне формулювання теорії, а саме перехід від нелокальної задачі багатьох тіл на ґратці до локальної задачі з урахуванням всіх локальних флуктуацій, які можуть бути описані домішковою моделлю. Окрема увага буде приділена домішковому розв'язувачу – точній діагоналізації, що є одним із центральних елементів циклу динамічної теорії середнього поля. Ми також надамо інформацію щодо модифікації теорії у реальному просторі. Цей крок є необхідним для вивчення систем, яким притаманне певне магнітне або орбітальне впорядкування, або для систем, на які діє додатковий потенціал захоплення.

Останній розділ дипломної роботи буде присвячений результатам, отриманим за допомогою динамічної теорії середнього поля. В центрі нашої уваги будуть системи атомів ^{87}Sr та ^{171}Yb , що в основних станах можуть проявляти певні впорядкування. Ми проаналізуємо залежність критичної температури від заселеності ґратки частинками, що мають дві спінові та дві орбітальні ступені вільності, а також розрахуємо спінові та орбітальні корелятори між сусідніми вузлами ґратки. Спираючись на нюанси, характерні експериментам з ультрахолодними атомами, ми наведемо залежність густини частинок від хімічного потенціалу для кожного ізотопу. Наостанок, увага буде приділена поведінці атомів в оптичній ґратці за наявності зовнішнього потенціалу, що вимагає від нас використання методу динамічного середнього поля у реальному просторі.

Огляд літератури

Реалізація конденсації Бозе–Ейнштейна [11–13] і досягнення режиму квантового виродження в газах зі статистикою Фермі–Дірака [14–16] в ультрахолодних розріджених газах відкрило нове уявлення про атомну та молекулярну фізику, в якому статистика та взаємодії між частинками відіграють центральну роль. Наразі квантовий вироджений фермі-газ був отриманий в багатьох атомних системах, серед яких ^{40}K [14], ^6Li [15, 16] і ^{173}Yb [17]. Останні десятиліття стали визначними з точки зору прогресу використання квантових газів, що, без сумніву, впливає на наше розуміння фізики багатьох тіл. Квантові гази є дуже зручними та надійними інструментами для дослідження задач в зовсім різних галузях, таких як фізика конденсованих середовищ, статистична фізика, квантова хімія, фізика високих енергій тощо [18].

Завдяки високому рівню контролю та можливості детектувати індивідуальні атоми, квантові гази відіграють значну роль у вирішенні задач, які не під силу сучасним потужним суперкомп'ютерам. Багато уваги надано розробці різних способів управління станами багатьох частинок (просторова шумова інтерферометрія [19, 20], високоточна спектроскопія [21–23], ґратчаста візуалізація з одновузловим дозволом [24, 25] та адресація [26]).

Завдяки захопленню в пастках ультрахолодним атомам ми маємо уявлення про такі квантові стани як ізолятори Мота [5, 27, 28], ферміонні надплинні рідини [29] та антиферромагнітні квантові магніти [30–32]. Ультрахолодні атоми надали нам змогу вивчити одноорбітальну модель Фермі–Габбарда, що дає надію на пояснення високотемпературної надпровідності [33–38]. Окрім цього, потенціали ґраток і надалі використовують для ефективною зміни вимірності системи шляхом дуже щільного утримання атомів в одному або кількох напрямках, а також для імітації різноманітних симетрій кристалів, що зустрічаються в природі та відіграють суттєву роль у прояві певних властивостей твердотільних матеріалів [39–42].

Нещодавно експериментальне дослідження систем почали проводити з використанням розріджених газів лужноземельних металів та їм подібних атомів (AEL). Завдяки своїм властивостям, у першу чергу, вони виступали в якості потужних стандартів частоти. З моменту реалізації першого атомного годинника на оптичній ґратці [43] по всьому світу було зібрано

безліч годинникових систем, які на сьогодні є найбільш точними існуючими стандартами частоти. Окрім їхнього використання в квантовій метрології, лужноземельні та їм подібні атоми привертають до себе увагу й в інших галузях. Так, наприклад, групою Ю. Такахаші в Кіото [44] було вперше охолоджено бозонний ізотоп ітербію до виродженого стану. АЕЛ атоми встигли відрекомендувати себе як гарний інструмент для проведення квантових обчислень в оптичних ґратках [45–48], після чого були проведені квантові симуляції з їхнім використанням [49–51]. Більш того, вони допомогли реалізувати низку явищ, що ґрунтуються на орбітальних взаємодіях [[51–53], розширених симетриях [51, 54, 55] та сильних ефективних калібрувальних полях [56]. Додатково спостерігалися явища квантового виродження цих газів [17, 57–62] та стану ферміонного ізолятора Мотта [63].

Врахування орбітальних ступенів вільності досліджуваної системи надає простір для спостереження низки нових взаємодій між атомами. Так у статті [64] було повідомлено про перше пряме спостереження швидких когерентних коливань спінового обміну між різними довгоіснуючими електронними орбіталями ультраохолоджених атомів ^{173}Yb . Про спостереження спінобмінних контактних взаємодій у двоорбітальному $SU(N)$ -симетричному квантовому газі, реалізованому за допомогою ферміонного ізотопу ^{173}Yb , також було повідомлено у статті [65].

Охолодження та утримання атомів можливе з використанням різноманітних пасток. Магнітооптична пастка (МОП) – основа широкого спектру наукових і технологічних застосувань з використанням ультраохолоджених атомів. З моменту створення першої МОП [66] до наших часів нараховується більше ніж двадцять елементів, що були охолоджені за допомогою лазера, серед яких атоми натрію [66], цезію [67], рубідію [68] тощо. Наразі пастки в різних варіантах («темна пляма» [69], двовимірні [70, 71], що дозволяють одночасно утримувати два різних елементи [72, 73] або ізотопи [74] та інші) стали стандартними інструментами дослідження.

Для теоретичного опису систем багатьох частинок створено низку наближених підходів, які допомагають отримувати коректні результати, не дивлячись на експоненціальний ріст гільбертового простору. Одним із таких методів є динамічна теорія середнього поля, яка стає точною лише в границі нескінченномірної системи [75]. Тим не менш, вона стала популяр-

ним методом, успішно застосованим до сильно корельованих електронних систем, а також знайшла застосування в описі ультрахолодних атомів в оптичних ґратках [76–78]. Основні обчислення можуть виконуватися за допомогою різних алгоритмів, зокрема алгоритму точної діагоналізації або квантового методу Монте-Карло [79]. У випадку систем з притаманними їм впорядкуваннями основного стану (наприклад, стан Нееля) було розроблено динамічну теорію середнього поля у реальному просторі [80].

РОЗДІЛ 1

Лужноземельні та їм подібні атоми в оптичних ґратках

1.1 Атом у пастці

Електромагнітна сила визначається рівнянням

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (1.1)$$

де \mathbf{v} – швидкість частинки із зарядом q ; \mathbf{E} і \mathbf{B} символізують електричні та магнітні поля відповідно. Оскільки атом нейтральний, то $q = 0$. Це означає, що для визначення поля системи зарядів потрібно брати до уваги дипольний момент \mathbf{d} . Індукування дипольного моменту можливе за допомогою змінного поля поблизу атомної резонансної частоти. Через те, що ці частоти зазвичай знаходяться в оптичному діапазоні, дипольний момент ефективно створюється майже резонансним світлом [81].

Після поглинання світла атом переходить у збуджений стан. Його повернення в основний відбувається в результаті спонтанного або вимушеного випромінювання.

1.1.1 Радіаційні оптичні сили

Поглинання світла від пучка викликає обмін імпульсом між атомами та світловим полем із наступною силою:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \hbar\mathbf{k}\gamma_p, \quad (1.2)$$

де γ_p позначає коефіцієнт збудження атомів і залежить від різниці між частотою лазера та частотою атомного резонансу. Рівень інтенсивності світла визначає тип можливого випромінювання. За досить низької інтенсивності існує велика ймовірність, що атом повернеться до основного стану шляхом спонтанного випромінювання (див. Рис. 1.1). У результаті випромінюване світло з імпульсом $\hbar\mathbf{k}$ рухається у випадковому напрямку, так що середній обмін імпульсом дорівнює нулю. За високої інтенсивності світла відбувається вимушене випромінювання. У цьому випадку імпульси поглиненого і випромінюваного світла спрямовані у протилежних напрямках. Отже, за-

гальний переданий імпульс дорівнює нулю.

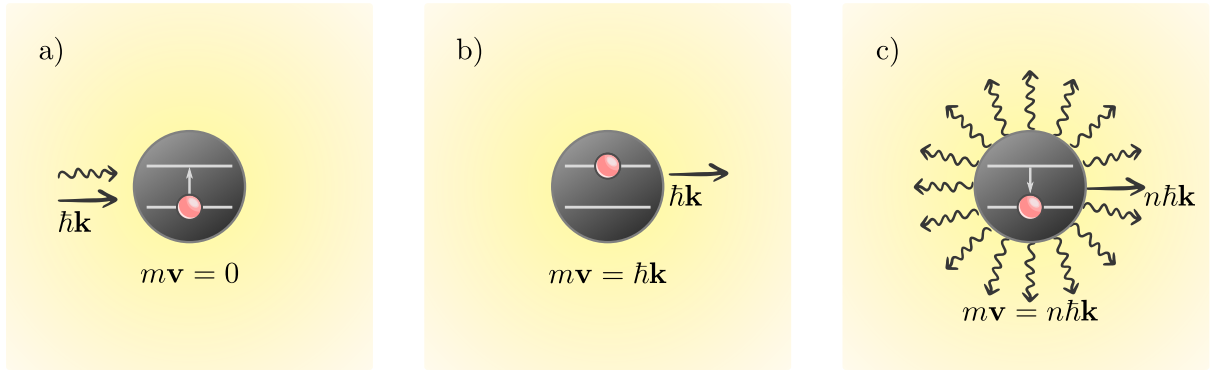


Рис. 1.1: Спрощена схема дії світла на дворівневий атом. а) Фотон з імпульсом $\hbar\mathbf{k}$ досягає атома з масою m , який знаходиться в стані спокою. б) У результаті поглинання світла атом збуджується і набуває імпульсу $\hbar\mathbf{k}$. в) Після n циклів атом зазнає ізотропне спонтанне випромінювання; на цей момент імпульс атома становить $n\hbar\mathbf{k}$ уздовж напрямку поширення вхідних фотонів.

1.1.2 Дипольні оптичні сили

Вимушене випромінювання може мати і ненульовий переданий імпульс. Якщо промені мають принаймні два різних \mathbf{k} -вектори, світло з першого променя поглинається та випромінюється в напрямку другого променя. Це призводить до зміщення рівнів енергії атома, що, у свою чергу, створює потенціал атома. Потенціал можна знайти, розв'язавши рівняння Шредінгера для дворівневого атома в монохроматичній плоскій хвилі.

Коли атом потрапляє в лазерне світло [82], електричне поле \mathbf{E} викликає атомний дипольний момент, що є пропорційним динамічній поляризованості атома [83], тобто

$$\mathbf{d} = \alpha(\omega)\mathbf{E}, \quad (1.3)$$

де ω – частота. Звернемо увагу, що $\alpha(\omega)$ є комплексною поляризованістю. Диполь \mathbf{d} взаємодіє з індукуючим його електричним полем \mathbf{E} , тому потенціал взаємодії можна записати наступним чином:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\langle \mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \rangle = -\frac{1}{2}Re(\alpha(\omega))|\mathbf{E}|^2. \quad (1.4)$$

Градiєнт від (1.4) характеризує дипольну силу

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}) \propto \text{Re}(\alpha(\omega)) \nabla I(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

з $I \propto |\mathbf{E}|^2$.

У більшості випадків частота лазера досить близька до резонансної частоти ω_r , а розладження $\Delta \equiv \omega - \omega_r$ задовольняє умові $|\Delta| \ll \omega_r$. Таким чином, потенціал взаємодії має вигляд:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_r^3 \Delta} I(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

У цьому рівнянні Γ є коефіцієнтом загасання. Згідно з (1.6), розладження Δ визначає тип потенціалу: червоне розладжене світло ($\Delta > 0$) відповідає потенціалу притягання, тоді як синє розладжене світло ($\Delta < 0$) відповідає потенціалу відштовхування. У першому випадку атоми знаходяться в мінімумах потенціалу, а в другому випадку атоми відштовхуються максимумами інтенсивності.

Для створення періодичного потенціалу необхідні два зустрічних лазерних промені, які формують стоячу хвилю. Для періодичного потенціалу потрібне періодичне електричне поле вигляду

$$E(z) = E_0 \sin(kz) \cos(\omega t - \theta), \quad (1.7)$$

де z є орієнтацією осі лазера та $k = 2\pi/\lambda$ – хвильовий вектор лазерного світла. Розрахувавши середнє за часом, можна отримати наступний вираз:

$$V(z) = V_0 \sin^2(kz). \quad (1.8)$$

V_0 – глибина ґратки, яку зазвичай виражають в одиницях енергії віддачі атома $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Для d -вимірних ґраток потенціал має вигляд:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d V_{0,i} \sin^2(k_i x_i). \quad (1.9)$$

1.2 Магнітооптичні пастки

Магнітооптичні пастки (МОП) вважаються одними з найпопулярніших інструментів для проведення експериментів з холодними атомами. Вперше застосовані у 1987 році [66], вони являють собою комбінацію як магнітних, так і оптичних полів. Схематичне зображення МОП показано на Рис. 1.2.

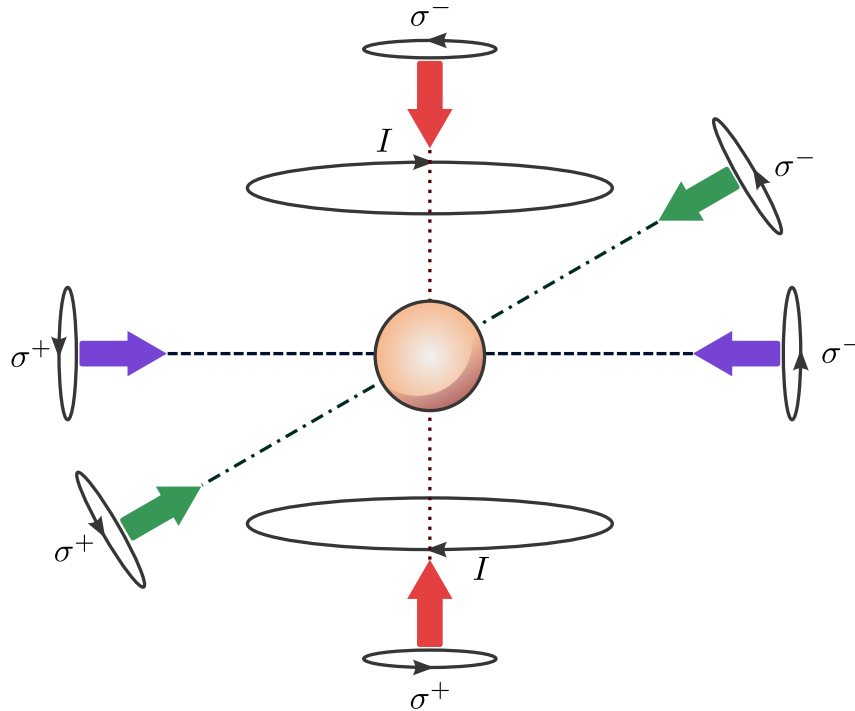


Рис. 1.2: Схема магнітооптичної пастки: пунктирні лінії – лазерні промені з зазначеними поляризаціями; кола символізують котушки, що генерують магнітне поле.

Три пари лазерних променів, які поширюються вздовж трьох декартових осей, спрямовані на досліджуваний атом [68]. Частоти лазерів обираються таким чином, щоб їхні значення були трохи меншими порівняно з частотою атомного переходу. Це змушує атоми використовувати свою кінетичну енергію, щоб компенсувати нестачу енергії збудження, що надходить від світла. Подальше випромінювання атомів забирає їхню енергію, що призводить до охолодження системи за допомогою передачі імпульсу між фотонами та атомами. Локалізація атома досягається за допомогою коаксіального неоднорідного магнітного поля і протилежно поляризованих лазерних променів. В результаті, магнітне поле, що змінюється лінійно, викликає розщеплення магнітних підрівнів атома. Конфігурація пастки, а саме поляризація лазерних променів, побудована таким чином, щоб рух

атомів був спрямований до центру пастки. Будь-який зсув від центру призводить до наближення одного з магнітних підрівнів до резонансу з лазерним випромінюванням.

1.3 Взаємодії між атомами

Розглянемо деякі деталі теорії розсіювання, які допоможуть проаналізувати низькоенергетичні взаємодії між двома частинками з масами m_1 і m_2 відповідно [84]. У системі центру мас (зведену масу визначають як $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$) хвильова функція, яка описує розсіювання частинок, являє собою суму плоскої хвилі (хвиля до розсіювання) e^{ikz} та розсіяної хвилі, а саме

$$\psi = e^{ikz} + \psi_{sc}(\mathbf{r}), \quad (1.10)$$

де $\psi_{sc}(\mathbf{r})$ за великих значень r визначає сферичну хвилю $f(\mathbf{k})e^{ikr}/r$ з амплітудою розсіювання $f(\mathbf{k})$ та хвильовим вектором \mathbf{k} . Ми також припускаємо, що z – це напрямок відносної швидкості хвилі до розсіювання. Вважаючи взаємодію атомів сферично симетричною, хвильову функцію можна записати наступним чином:

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta)e^{ikr}/r. \quad (1.11)$$

У рівнянні (1.11) кут між початковим напрямом відносного імпульсу та напрямом після розсіювання позначається як θ . Кожен стан можна охарактеризувати енергією

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.12)$$

Для низьких значень E достатньо враховувати лише s -хвильове розсіювання. Отже, амплітуда розсіювання $f(\theta)$ має бути сталою $f(\theta) \approx -a$, де a – довжина розсіювання. Знак a визначає тип взаємодії, а саме $a > 0$ відповідає відштовхуванню, а $a < 0$ – тяжінню.

За визначенням, диференціальний переріз дорівнює

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (1.13)$$

з $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$. За умови сферичної симетрії потенціалу хвильова функція має осьову симетрію. Виконуючи розділення змінних, ψ можна запи-

сати наступним чином:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r), \quad (1.14)$$

де $R_{kl}(r)$ – радіальна хвильова функція, а $P_l(\cos \theta)$ – поліноми Лежандра.

Зрештою, амплітуда розсіювання $f(\theta)$ набуває вигляду

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{i2\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta), \quad (1.15)$$

де δ_l є фазовим зсувом, а повний переріз σ визначають як

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (1.16)$$

При $k \rightarrow 0$ фазові зсуви стають малими, і найбільший внесок надходить від доданку з $l = 0$ (s -хвильове розсіювання). За умови такої границі рівняння (1.15) перетворюється на $f = \delta_0/k$, що призводить до спрощення формули повного перерізу

$$\sigma = 4\pi a^2. \quad (1.17)$$

За невеликих енергій довжина розсіювання a служить єдиним параметром для опису процесу розсіювання [85]. Зауважимо, що у випадку двох однакових ферміонів значення повного перерізу наближається до нуля (s -хвильове розсіювання унеможливлене за рахунок принципу заборони Паулі).

1.4 Резонанс Фешбаха

Не зупиняючись на деталях, розглянемо можливість налаштування ефективної короткодійної взаємодії між атомами. Одним із найбільш відомих інструментів утворення молекул із холодних атомів є техніка резонансів Фешбаха [86]. Основна ідея методу полягає в наявності закритого каналу з низькозв'язаним енергетичним станом поблизу відкритого каналу (або вхідного каналу) [87]. Перший включає потенціал зв'язку, тоді як другий представляє собою потенціальну криву для вільних атомів за однакової енергії (див. Рис. 1.3). Під дією зовнішнього магнітного поля B_0 закритий канал зсувається відносно відкритого і резонує з ним [88, 89]. У разі

наявності зв'язку між каналами може відбуватися сильна зміна довжини розсіювання. У свою чергу, довжину розсіювання лише з одним замкнутим каналом можна записати наступним чином:

$$a(B) = a_{bg} + a_r(B). \quad (1.18)$$

У (1.18) a_{bg} характеризує відкритий канал, а $a_r(B)$ є довжиною розсіювання, створеною магнітним полем. За наявності резонансу Фешбаха $a(B)$ визначають як

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right), \quad (1.19)$$

де ΔB позначає ширину резонансу, тобто різницю між резонансним магнітним полем B_0 і полем, при якому $a(B) = 0$.

Зауважимо, що у випадку лужноземельних та їм подібних атомів, які досліджуються в цій роботі, метод магнітного резонансу Фешбаха не працює, оскільки кожен взаємодіючий атом має $J = 0$. Тим не менш, незважаючи на деякі недоліки, пов'язані зі спонтанними випромінюваннями, для контролювання взаємодій може використовуватися оптичний резонанс Фешбаха [90].

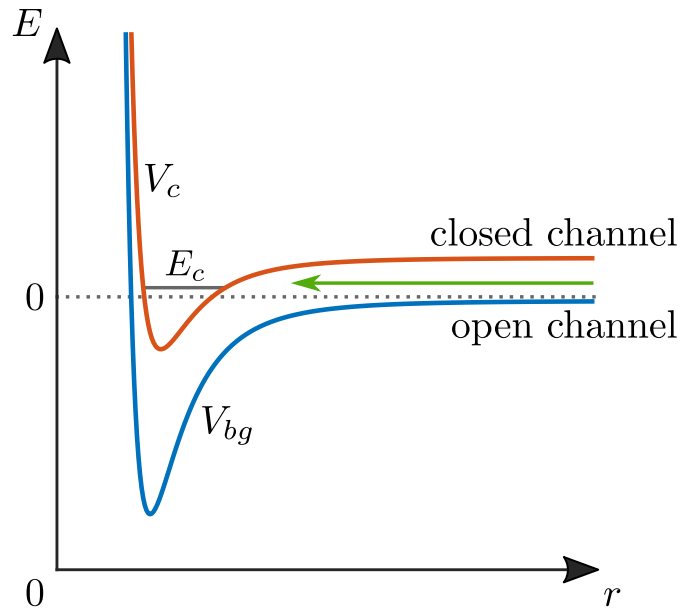


Рис. 1.3: Ілюстрація двоканальної моделі у випадку резонансу Фешбаха. Два атоми зіштовхуються з енергією E (позначено зеленою стрілкою) у відкритому каналі та утворюють молекулярний стан з енергією E_c у закритому каналі.

1.5 Лужноземельні і їм подібні атоми

Група лужноземельних та їм подібних атомів включає лужноземельні елементи, такі як Be, Mg, Ca, Sr, Ba і Ra, елементи з d -блоку (Zn, Cd, Hg), а також з f -блоку (Yb, No). Усі вони мають повністю заповнені внутрішні оболонки, а також повністю заповнену зовнішню s -оболонку з двома електронами. Подібно до атому гелію, електронні стани лужноземельних та їм подібних атомів можна розділити на два типи: спіновий синглет ($S = 0$) і спіновий триплет ($S = 1$). Оскільки в дипольному наближенні спін-фліп переходи ($\Delta S \neq 0$) заборонені [83], переходи між цими станами є дуже вузькими. Щодо прикладу застосування, $^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ використовується для доплерівського охолодження атомних систем до температур близько 10 мкК або навіть нижче. Більш того, на відміну від лужних атомів, усі довжини хвиль основних переходів лужноземельних та їм подібних атомів належать до оптичного діапазону електромагнітного спектра (див. Рис. 1.4).

Крім того, однією з найбільш важливих особливостей атомів цієї групи є наявність довгоіснуючих метастабільних збуджених станів, а саме 3P_0 і 3P_2 . Обидва стани мають дуже слабкий зв'язок з основним станом 1S_0 . Зазвичай такі переходи називають ультравузькими переходами, оскільки вони в 10^8 разів вужчі за звичайні оптичні. Зокрема, $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ викликає особливий інтерес для реалізації атомних годинників [94–97].

Збуджений стан 3P_0 , як і основний стан, має нульовий орбітальний момент ($J = 0$), що робить перехід $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ подвійно забороненим в дипольному наближенні. Тим не менш, ферміонні ізотопи з ядерним спіном $I \neq 0$ завдяки надтонкій взаємодії (HFI) мають змішані стани з однаковим повним атомним моментом F ($\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$), тобто

$$|^3P_0\rangle = |^3P_0^0\rangle + \alpha_0|^3P_1\rangle + \beta_0|^1P_1\rangle + \gamma_0|^3P_2^0\rangle, \quad (1.20)$$

де α_0 , β_0 і γ_0 – коефіцієнти змішування надтонкої взаємодії (деталі див. у праці [98]). Таким чином, перехід $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ стає можливим.

Як зазначалося вище, лужноземельні та їм подібні атоми мають ненульовий напівцілий ядерний спін I і нульовий кутовий момент J . У результаті, $F = |\mathbf{J} + \mathbf{I}| = I$, тобто загальний орбітальний момент повністю визначається спіном ядра атома. Така особливість призводить до відокремлення ядерних та електронних ступенів вільності. Оскільки властивості зіткнень

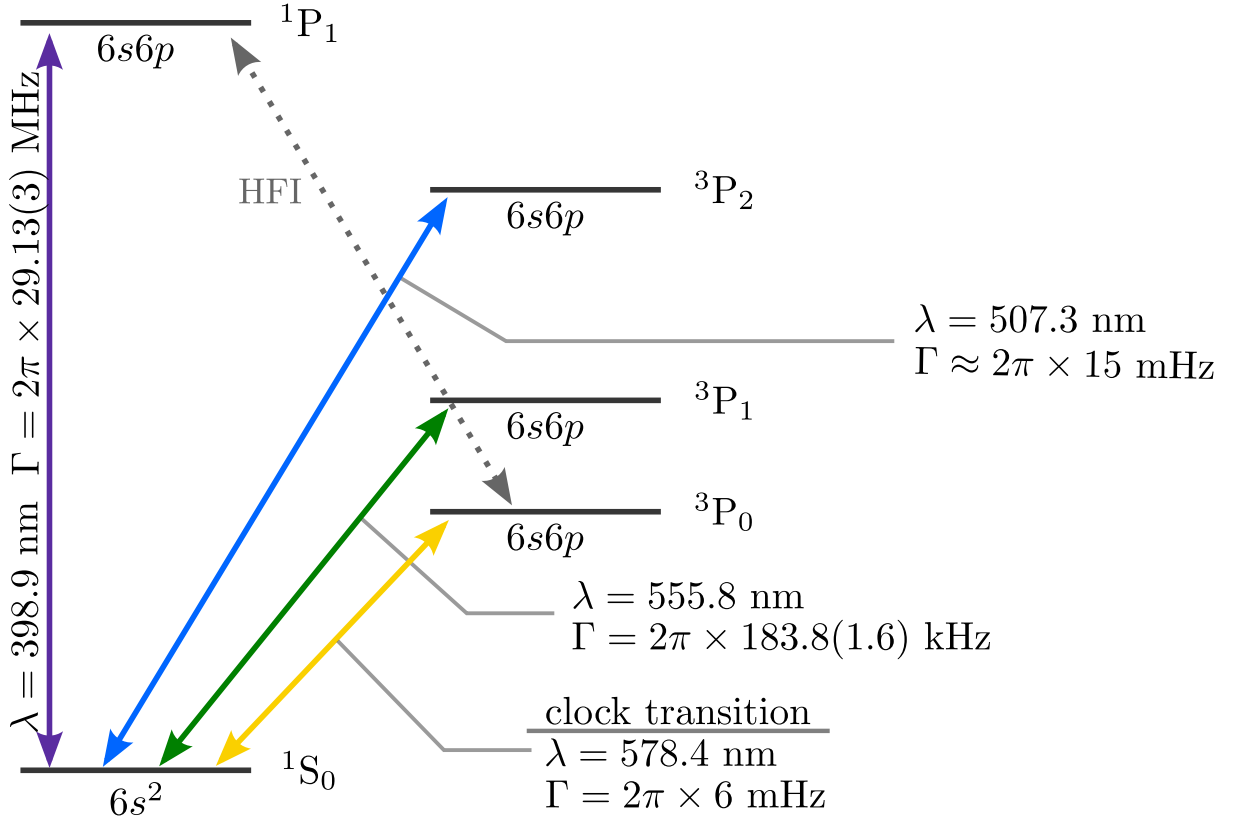


Рис. 1.4: Часткова діаграма енергетичних рівнів атомів ^{173}Yb (не в масштабі). Оптичні переходи показані за допомогою стрілок і позначені відповідними довжинами хвиль λ і коефіцієнтами розпаду Γ . Пунктирна лінія представляє надтонку взаємодію. Усі значення для переходів взято з: [91] ($1S_0 \rightarrow 1P_1$), [92] ($1S_0 \rightarrow 3P_2$, $1S_0 \rightarrow 3P_0$), [93] ($1S_0 \rightarrow 3P_1$).

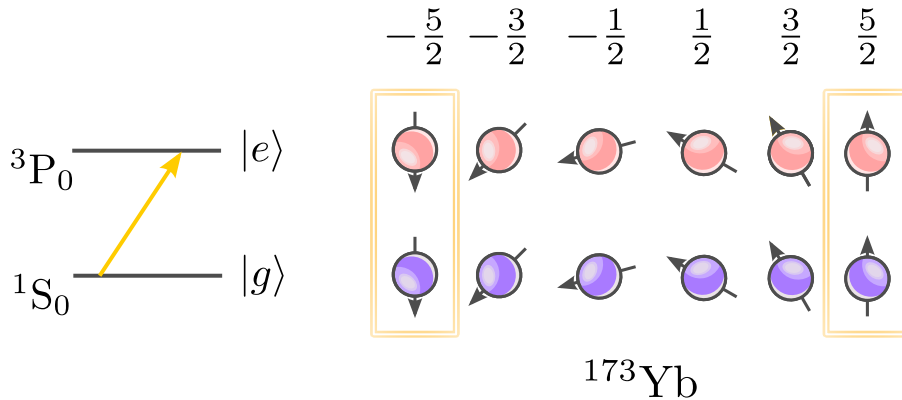


Рис. 1.5: Спінні та орбітальні ступені вільності проєкції спіну ядра ферміонного ізоотопу ^{173}Yb .

не залежать від проєкцій ядерного спіну, захищеного всередині ядра, експерименти з лужноземельними та їм подібними атомами зберігають $SU(N)$

симетрію взаємодій. Зокрема, ця робота присвячена вивченню атомних систем із $SU(2)$ симетрією, тобто систем з двома спіновими і двома орбітальними ступенями вільності, як позначено на Рис. 1.5.

РОЗДІЛ 2

Модель Габбарда

Завдяки зусиллям Дж. Габбарда [99], М. Г'уцвіллера [100] та Й. Канамо-рі [101], статті яких були присвячені опису кореляцій електронів у вузьких енергетичних зонах, відбулося формулювання моделі Габбарда. Початковою метою їх наукових праць було вивчення сильного феромагнітного упорядкування в кристалах оксидів перехідних металів. Проте з плином часу модель знайшла своє застосування не тільки в цьому напрямку. Протягом шістдесяти років модель Габбарда є інструментом для дослідження різних явищ, таких як феромагнетизм [102], антиферомагнетизм [103], надпровідність [104], перехід метал-ізолятор [105] тощо.

До 1963 року походження феромагнітного впорядкування в твердих тілах було досить складним питанням фізики. Існуюча на той час модель сильного зв'язку, яка не включає жодних взаємодій на вузлі, не була спроможна належним чином описати це явище. Поява моделі Габбарда стала ключем до проблеми корельованих ферміонів, оскільки модель розглядає як процеси стрибків електронів між найближчими вузлами, так і кулонівську взаємодію між двома електронами [106]. Незважаючи на свою простоту, модель Габбарда описує всі важливі особливості взаємодіючих квантових частинок, що рухаються в твердих тілах.

Тим не менш, великий прогрес у обчислювальних ресурсах все ще не є достатнім для розв'язання моделі. На даний момент отримати точне рішення можна тільки для одновимірних однозонних систем. Тож питання привертає велику увагу до дослідження нових чисельних методів, таких як алгоритми Монте-Карло [107] та Ланцоша [108], теорія динамічного середнього поля (DMFT) [75] та інші.

2.1 Формулювання моделі Габбарда

З самого початку припустимо, що йони твердого тіла, які набагато важчі за електрони, утворюють статичну ґратку, тоді як уся динаміка системи походить від руху електронів. Таким чином, систему з N електронів можна

описати гамільтоніаном [109]:

$$\mathcal{H} = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{ion}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i<j} V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (2.1)$$

де $V_{ion}(\mathbf{r})$ – періодичний потенціал іонів, а $V_C(\mathbf{r})$ – кулонівська сила відштовхування. Оскільки \mathcal{H} описує систему багатьох тіл, для отримання розв’язку можна застосувати наближення середнього поля. Для цього додамо та віднімемо допоміжний періодичний потенціал $V_a(\mathbf{r})$ з тим самим періодом, що й потенціал іонів:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{ion}(\mathbf{r}_i) + V_a(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i<j} V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \\ &- \sum_{i<j} \frac{1}{N-1} (V_a(\mathbf{r}_i) - V_a(\mathbf{r}_j)) \\ &= \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i<j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \end{aligned} \quad (2.2)$$

У результаті апроксимації середнього поля другий доданок дає нульовий внесок. Наступним кроком є вторинне квантування гамільтоніана (2.2). Для вибору базису можна розглянути базис одночастинкового гамільтоніана:

$$\mathcal{H}_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Зауважимо, що потенціал $V(x)$ є періодичним, що призводить до виконання теореми Блоха і запису власних функцій \mathcal{H}_1 у вигляді функцій Блоха,

$$\psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Тут $u_{\alpha\mathbf{k}}$ – періодична функція з періодом ґратки, \mathbf{k} – вектор імпульсу кристалла, α – зонний індекс.

Функції Ваньє в термінах станів Блоха можна визначити як

$$w_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N_{ion}}} \sum_{\mathbf{k}, i} \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (2.5)$$

де N_{ion} – кількість іонів, а \mathbf{R}_i – вектор ґратки на вузлі i . Виконуючи

обернене перетворення Фур'є, можна отримати наступне рівняння:

$$\psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_{ion}}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (2.6)$$

Визначимо оператор народження $c_{\alpha\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$, що створює електрон зі спіном σ в станах Блоха $\psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Аналогічно оператор знищення $c_{\alpha\mathbf{k},\sigma}$ “знищує” частинку зі спіном σ . Таким чином, після перетворення Фур'є

$$\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_{ion}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_{\alpha\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}; \quad (2.7)$$

$$\hat{c}_{\alpha i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_{ion}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_{\alpha\mathbf{k},\sigma}. \quad (2.8)$$

Для компактності можна визначити польовий оператор [85], який народжує електрон зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, а саме

$$\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \psi_{\alpha\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{\alpha\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} = \sum_{\alpha i} w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger}. \quad (2.9)$$

За тієї ж логіки, польовий оператор, що знищує електрон зі спіном σ і координатою \mathbf{r} , набуває вигляду

$$\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha i} w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i,\sigma}. \quad (2.10)$$

Довільний квантовий оператор у вторинному квантуванні можна записати в термінах рівнянь (2.9) і (2.10)

$$\hat{O} = \int \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{o} \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.11)$$

Ми вважаємо, що \hat{o} діє на функції у станах Блоха. Отже, відповідно до рівняння (2.11) гамільтоніан (2.2) має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\sigma} \int \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\mathcal{H}}_1 \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int \int \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\sigma, \alpha, i, j} \int w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} \hat{\mathcal{H}}_1 w_{\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\beta j, \sigma} d\mathbf{r} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \\ i, j, m, n, \\ \sigma, \sigma'}} \int \int w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} w_{\beta}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\beta j, \sigma'}^{\dagger} U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\
&\times w_{\gamma}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) \hat{c}_{\gamma m, \sigma'} w_{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \hat{c}_{\delta n, \sigma} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.
\end{aligned}$$

Введемо матричні елементи, що описують стрибки $t_{ij}^{\alpha\beta}$ та взаємодії $U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta}$,

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = \int w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{\mathcal{H}}_1 w_{\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}; \quad (2.13)$$

$$U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int \int w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\beta}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\gamma}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) w_{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (2.14)$$

та перепишемо гамільтоніан у вигляді

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, \alpha, i, j} t_{ij}^{\alpha\beta} \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha j, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \\ i, j, m, n}} U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\beta j, \sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{\gamma m, \sigma'} \hat{c}_{\delta n, \sigma}. \quad (2.15)$$

На цьому етапі можна застосувати деякі спрощення. Наприклад, якщо поверхня Фермі розташована в одній зоні провідності, багатозонну модель Габбарда можна розглядати як однозонну з гамільтоніаном

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, i, j} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_i \hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i, \sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{i, \sigma'} \hat{c}_{i, \sigma}. \quad (2.16)$$

Беручи до уваги, що $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, отримаємо:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, i, j} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j, \sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}, \quad (2.17)$$

де $\hat{n}_{i, \uparrow} = \hat{c}_{i, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{i, \uparrow}$ та $\hat{n}_{i, \downarrow} = \hat{c}_{i, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{i, \downarrow}$ – локальні оператори густини. Останнє спрощення, яке можливо виконати, пов'язане з наближенням сильного зв'язку. Припускаючи, що функції Ваньє сильно локалізовані навколо \mathbf{R}_i , достатньо враховувати лише стрибки між найближчими сусідніми вузлами. Оскільки електрони можуть стрибати не тільки зліва направо, але і в зворотному

напрямку, то

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma, \langle ij \rangle} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (2.18)$$

Рівняння (2.18) представляє однозонну модель Габбарда, де амплітуди t і U є дійсними числами, а індекс i позначає вузол ґратки.

2.1.1 Локальний базис моделі

Оператори народження $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ та знищення $\hat{c}_{i,\sigma}$, у термінах яких визначений Гамільтоніан моделі Габбарда (2.18), підкоряються антикомутаційним співвідношенням

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} &= \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}\} = 0; \\ \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (2.19)$$

з індексами вузла ґратки $i, j = \{1, 2, \dots, L-1, L\}$ та індексами спіну $\sigma, \sigma' = \{\uparrow, \downarrow\}$.



Рис. 2.1: Схематичне зображення базисних станів одноорбітальної моделі Габбарда.

Кожен вузол може перебувати в одному з чотирьох можливих станів [110], які зображені на Рис. 2.1, тобто

$$|0\rangle_i \quad \text{вузол } i \text{ є порожнім}; \quad (2.20)$$

$$\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger |0\rangle_i \quad \text{вузол } i \text{ заселений електроном зі спіном } \uparrow; \quad (2.21)$$

$$\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger |0\rangle_i \quad \text{вузол } i \text{ заселений електроном зі спіном } \downarrow; \quad (2.22)$$

$$\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger |0\rangle_i \quad \text{вузол } i \text{ заселений двома електронами.} \quad (2.23)$$

Оскільки модель має чотири внутрішні ступені вільності, то розмір гільбертового простору дорівнює 4^L .

Довільний стан моделі Габбарда можна визначити наступним чином:

$$|\mathbf{i}, \boldsymbol{\sigma}\rangle = \hat{c}_{i_N, \sigma_N}^\dagger \hat{c}_{i_{N-1}, \sigma_{N-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{i_2, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{i_1, \sigma_1}^\dagger |0\rangle, \quad (2.24)$$

де $\mathbf{i} = \{i_1, i_2, \dots, i_{N-1}, i_N\}$ та $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N-1}, \sigma_N\}$, i_s позначає позицію s -ого електрону. Зауважимо, що $(\hat{c}_{i, \sigma}^\dagger)^2 = 0$, тобто два електрони з однаковими спінами σ не можуть заселяти вузол i одночасно.

2.1.2 Граничні випадки

Розглянемо два граничні випадки, які можуть виникнути в моделі Габбарда, коли один із доданків (2.18) дорівнює нулю.

Границя $t \rightarrow 0$. За відсутності тунелювання границю $t \rightarrow 0$ називають атомною границею, оскільки всі електрони локалізовані на вузлах. У цьому випадку гамільтоніан (2.18) має вигляд

$$\hat{\mathcal{H}} = U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}. \quad (2.25)$$

Отриманий вираз можна розглядати як суму незалежних вузлів, а саме $\hat{\mathcal{H}} = \sum_i^L \hat{\mathcal{H}}_i$. Зауважимо, що $\hat{\mathcal{H}}$ вже має діагональну форму.

Можна вибрати дві множини вузлів, позначені як L_1 та L_2 , які заселені частинками зі спінами \uparrow та спінами \downarrow відповідно. Таким чином, загальний вид власного вектора:

$$\Psi = \left(\prod_{i \in L_1} \hat{c}_{i, \uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{i \in L_2} \hat{c}_{i, \downarrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (2.26)$$

Цілком очевидно, що відповідне власне значення можна задати виразом

$$E = \sum_{i \in L_1 \cap L_2} U_i. \quad (2.27)$$

Якщо кількість електронів менша за кількість вузлів ґратки, можна вибрати L_1 і L_2 таким чином, щоб $L_1 \cap L_2 = \emptyset$ і енергія основного стану дорівнювала нулю.

Слід зазначити, що за відсутності тунелювання система є виродженою. Зокрема, при $N < L$ існує C_L^N способів для електронів заселяти вузли таким чином, щоб на одному вузлі знаходилось не більше одного електрона. З урахуванням спінових ступенів вільності виродження дорівнює $2^N C_L^N$. У випадку половинного заповнення, $N = L$, виродження є 2^L -кратним [111].

Границя $U \rightarrow 0$. Модель Габбарда (2.18) у випадку $U \rightarrow 0$ наближається до моделі невзаємодійного газу з гамільтоніаном

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma, \langle ij \rangle} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right). \quad (2.28)$$

Для отримання власних векторів та власних значень $\hat{\mathcal{H}}$ перейдемо до імпульсного простору. Оператори народження та знищення мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{\frac{2\pi i}{L} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger; \\ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{-\frac{2\pi i}{L} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \hat{c}_{j,\sigma}; \end{aligned} \quad (2.29)$$

Таким чином, після оберненого перетворення Фур'є

$$\begin{aligned} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-\frac{2\pi i}{L} \mathbf{R}_j \cdot \mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger; \\ \hat{c}_{j,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{2\pi i}{L} \mathbf{R}_j \cdot \mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \quad \text{де } j = 1, 2, \dots, L-1, L \end{aligned} \quad (2.30)$$

Підставляючи $\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger$ та $\hat{c}_{j,\sigma}$ до виразу (2.28), можна отримати

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (2.31)$$

де величину $\epsilon(\mathbf{k})$ визначають як

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_i e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i+1})} + e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{i+1} - \mathbf{R}_i)} = -2t \sum_i \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \quad (2.32)$$

з вектором ґратки $\mathbf{a} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i+1}$.

2.1.3 Симетрії

Визначимо оператор числа частинок для електронів зі спіном \uparrow ,

$$\hat{N}_\uparrow = \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i,\uparrow} \quad (2.33)$$

та зі спіном \downarrow ,

$$\hat{N}_\downarrow = \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (2.34)$$

Оскільки $[\hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger] = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger$ та $[\hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}] = -\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{j,\sigma'}$, де $\delta_{ij}(\delta_{\sigma\sigma'})$ – символ Кронекера, можна записати наступні комутаційні вирази:

$$[\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger, \quad [\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{j,\sigma'}] = -\delta_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{j,\sigma'}. \quad (2.35)$$

У результаті

$$[\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{i,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'}] = [\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{i,\sigma'}^\dagger] \hat{c}_{j,\sigma'} + \hat{c}_{i,\sigma'}^\dagger [\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{j,\sigma'}] = 0. \quad (2.36)$$

Це призводить до того, що гамільтоніан (2.18) комутує з оператором числа частинок \hat{N}_σ , тобто

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{N}_\sigma] = 0. \quad (2.37)$$

Взявши до уваги дану властивість, а також те, що $\hat{N} = \hat{N}_\uparrow + \hat{N}_\downarrow$, отримуємо

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{N}] = 0. \quad (2.38)$$

Більш того, за визначенням $\hat{S}^z = \frac{1}{2} (\hat{N}_\uparrow - \hat{N}_\downarrow)$, тому

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}^z] = 0. \quad (2.39)$$

Окрім збереження повного спіну та загальної кількості частинок, варто розглянути симетрію частинка-дірка.

Повертаючись до гамільтоніана (2.17), можна виконати таке перетворе-

ння:

$$\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \rightarrow \hat{c}_{i,\sigma}, \quad \hat{c}_{i,\sigma} \rightarrow \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger. \quad (2.40)$$

Це означає, що електрон зі спіном σ перетворюється на дірку з таким же значенням спіну. Тоді гамільтоніан має вигляд

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} &= \sum_{\sigma,i,j} t_{ij} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger + U \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \\ &= - \sum_{\sigma,i,j} t_{ij} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + U \sum_i \left(1 - \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}\right) \left(1 - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}\right) \\ &= - \sum_{\sigma,i,j} t_{ij} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + U \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + U(L - N). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Як можна побачити, після перетворень (2.40) гамільтоніан $\tilde{\mathcal{H}}$ змінив свій вигляд. Таким чином, у загальному випадку модель Габбарда не зберігає симетрію частинка-дірка. Тим не менш, для окремого випадку, а саме для випадку, коли ґратку можна розділити на дві підґратки A і B , так що $t_{ij} \neq 0$ лише у випадку, коли i і j належать різним підґраткам, при половинній заповненості [110] можна зробити перетворення

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger &\rightarrow \hat{c}_{i,\sigma}, & i \in A; \\ \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger &\rightarrow -\hat{c}_{i,\sigma}, & i \in B, \end{aligned} \quad (2.42)$$

які перетворюють гамільтоніан (2.17) у самого себе.

2.2 Багаторбітальна модель Габбарда

З огляду на простоту одноорбітальна модель Габбарда не може коректно описувати матеріали з багаторбітальною структурою. Для врахування додаткових взаємодій, характерних твердим тілам, слід враховувати як спінові, так і орбітальні ступені вільності та поширити модель на багаторбітальний випадок.

У підрозділі 2.1 ми отримали найзагальніші співвідношення, що описують амплітуди стрибків і взаємодії у моделі Габбарда. Оскільки ця робота зосереджена лише на взаємодіях U , що відбуваються на вузлі, та процесі тунелювання між найближчими вузлами, вираз (2.14) може бути спроще-

ним. Для частинок з однієї орбіталі $U_{\alpha\alpha}$ має вигляд

$$\begin{aligned} U_i^{\alpha\alpha} &= \int \int w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\alpha}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\alpha}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int \int |w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2 U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |w_{\alpha}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (2.43)$$

При цьому взаємодія частинок, які займають різні орбіталі, задається формулою

$$\begin{aligned} U_i^{\alpha\beta} &= \int \int w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\beta}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\beta}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int \int |w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2 U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |w_{\beta}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (2.44)$$

де $\alpha \neq \beta$.

Особливу увагу слід звернути на випадок взаємодії частинок з різних орбіталей з паралельними спінами. За такої конфігурації з появою зв'язку Гунда відбувається зменшення кулонівської взаємодії на $J^{\alpha\beta}$,

$$J_i^{\alpha\beta} = \int \int w_{\beta}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\alpha}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\beta}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (2.45)$$

Рівняння (2.45) також описує взаємодію спін-фліп, яка передбачає обмін спіном між частинками з різних орбіталей. Можливе виникнення ще одного типу взаємодії з амплітудою $J'^{\alpha\beta}$, якщо дві частинки з орбіталі α перестрибують на орбіталь β ($\alpha \neq \beta$), такий процес ще називають парним стрибком,

$$J_i'^{\alpha\beta} = \int \int w_{\beta}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\beta}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\alpha}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (2.46)$$

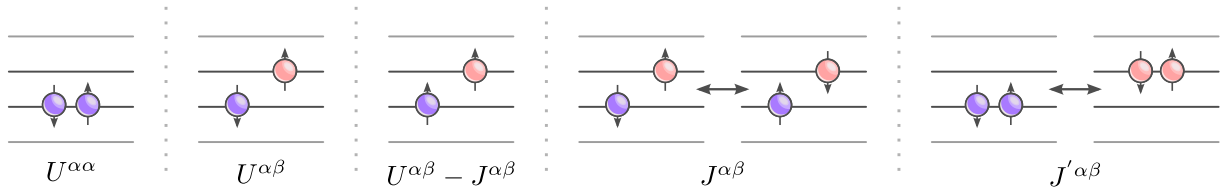


Рис. 2.2: Схематичне зображення можливих взаємодій на вузлі у випадку багатоорбітальної моделі Фермі-Габбарда.

Підсумовуючи, загальний вираз для багатоорбітальної моделі Габбарда з локальними взаємодіями (див. Рис. 2.2) має вигляд

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}} = & \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta,\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\beta\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \alpha} U_{\alpha\alpha} \hat{n}_{i,\alpha\sigma} \hat{n}_{i,\alpha\sigma'} \\
& + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma, \alpha \neq \beta} (U_{\alpha\beta} - J_{\alpha\beta}) \hat{n}_{i,\alpha\sigma} \hat{n}_{i,\beta\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \alpha \neq \beta} U_{\alpha\beta} \hat{n}_{i,\alpha\sigma} \hat{n}_{i,\beta\sigma'} \\
& + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \alpha \neq \beta} J_{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\beta\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha\sigma'} \hat{c}_{i,\beta\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \alpha \neq \beta} J'_{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\beta\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\beta\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha\sigma'} \hat{c}_{i,\alpha\sigma}.
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Обмежуючись двома орбітальними, ми можемо спростити рівняння (2.47) та отримати двоорбітальну модель Фермі-Габбарда.

2.3 Двоорбітальна модель Габбарда

У підрозділі 2.2 ми отримали амплітуди взаємодії для багатоорбітальної моделі Габбарда. Тепер наша увага зосереджена на окремому випадку – двоорбітальній моделі Фермі-Габбарда, реалізованій на лужноземельних та їм подібних атомах. У цьому випадку електронний основний стан 1S_0 і метастабільний збуджений стан 3P_0 представляють орбітальні ступені вільності, $|g\rangle$ і $|e\rangle$ відповідно. Серед можливих ступенів вільності проекції спіну ядра (звернемо увагу, що дана група атомів дозволяє працювати з $N = 2I + 1$ спіновими компонентами, де I позначає ядерний спін) ми вибираємо два з них. Крім того, ми припускаємо, що процес стрибка не може змінити заселеність орбіталі γ , тобто міжорбітальні стрибки відсутні і $t_{ij}^{\gamma\gamma'} = 0$ для $\gamma \neq \gamma'$, тоді як для $\gamma = \gamma'$ амплітуда $t_{ij}^{\gamma\gamma}$ змінюється в залежності від орбіталі. Ми також нехтуємо парним тунелюванням та беремо до уваги симетричні амплітуди взаємодії $U_{\gamma\gamma'} = U_{\gamma'\gamma}$ і $J_{\gamma\gamma'} = J_{\gamma'\gamma}$.

Варто зазначити, що амплітуди взаємодії можуть бути записані через довжини розсіювання (див. [83] для отримання додаткової інформації). Оскільки наша система має два електронні стани, для опису всіх можливих зіткнень для системи з двома спіновими та двома орбітальними станами необхідно мати чотири довжини s -хвильового розсіювання. Довжина розсіювання a_{gg} враховує взаємодію між атомами на орбіталі g , тоді як a_{ee} – взаємодію між e -атомами. Крім того, існують ще два канали, через які можуть відбуватися зіткнення: симетричний $(|eg\rangle + |ge\rangle) / \sqrt{2}$ та антисим-

метричний ($|eg\rangle - |ge\rangle$)/ $\sqrt{2}$ канали. Вони характеризуються довжинами розсіювання a_{eg}^+ і a_{eg}^- відповідно.

Отже, для двоорбітальної моделі Габбарда, яка описує взаємодію між атомами в залежних від стану, але незалежних від спіну оптичних ґратках, амплітуди взаємодії мають вигляд:

$$U_{\gamma\gamma} = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_{\gamma\gamma} \int |w_\gamma(\mathbf{r})|^4 d\mathbf{r}; \quad (2.48)$$

$$U_{eg}^\pm = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_{eg}^\pm \int |w_e(\mathbf{r})|^2 |w_g(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad (2.49)$$

де w_γ – функція Ваньє (2.5) у орбітальному стані γ .

Використовуючи рівняння (2.49), міжорбітальну обмінну V_{ex} і пряму V взаємодії визначають як

$$V_{\text{ex}} = \frac{U_{eg}^+ + U_{eg}^-}{2} \quad (2.50)$$

і

$$V = \frac{U_{eg}^+ - U_{eg}^-}{2} \quad (2.51)$$

відповідно.

Враховуючи вище сказане, гамільтоніан для двоорбітальної моделі Габбарда (див. Рис. 2.3) має вигляд:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_i \sum_{\gamma,\sigma} t_\gamma (c_{i\gamma\sigma}^\dagger c_{i+1\gamma\sigma} + \text{H.c.}) - \sum_{i,\gamma} \mu_\gamma n_{i\gamma} \\ & + \sum_{i,\gamma} U_{\gamma\gamma} \sum_{\sigma < \sigma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma\sigma'} + V \sum_{i,\sigma < \sigma', \gamma < \gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma'} \\ & + (V - V_{\text{ex}}) \sum_{i,\sigma,\gamma < \gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma} \\ & + V_{\text{ex}} \sum_{i,\sigma < \sigma', \gamma < \gamma'} c_{i\gamma\sigma}^\dagger c_{i\gamma'\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma'} c_{i\gamma'\sigma}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

де другий доданок $\sum_{i,\gamma} \mu_\gamma n_{i\gamma}$ регулює загальну кількість частинок у системі з μ_γ у якості хімічного потенціалу для атомів у орбітальному стані γ . Зауважимо також, що обмінну взаємодію V_{ex} можна розділити на окремі доданки типу густина-густина і спін-фліп.

Для опису стану у двоорбітальній моделі Фермі-Габбарда необхідно ви-

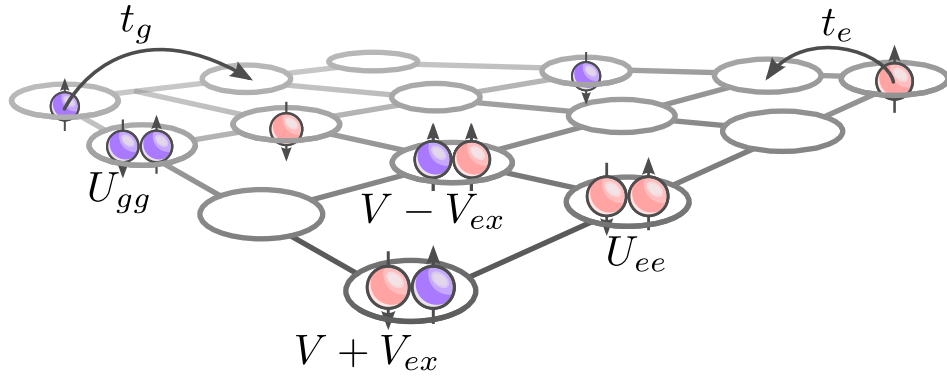


Рис. 2.3: Схематичне зображення можливих взаємодій у двоорбітальній моделі Фермі-Габбарда.

значити спінові σ та орбітальні γ параметри. У підрозділі 2.1.3 було зазначено, що одноорбітальна модель Габбарда зберігає спінову симетрію. Це твердження є справедливим і для гамільтоніана (2.52). Крім того, оскільки ми нехтуємо процесом парних стрибків, жодних змін у заселеності орбіталей не відбувається.

Усі подальші розділи дипломної роботи присвячені дослідженню двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда, що описується гамільтоніаном (2.52).

РОЗДІЛ 3

Динамічна теорія середнього поля

Оскільки точний опис взаємодійних систем багатьох частинок дуже обмежений через їх складність, для дослідження квантових задач слід застосовувати наближені методи. Одним із поширених підходів є теорія середнього поля (MFT). Однак для моделей таких як модель Фермі–Габбарда, він є досить складним у реалізації. Не дивлячись на це, існує можливість застосовувати розширену теорію середнього поля, а саме теорію динамічного середнього поля (DMFT), де середнє поле стає величиною, що залежить від часу. Основний концепт поняття полягає в границі нескінченного координатного числа $Z \rightarrow \infty$ або вимірності простору $d \rightarrow \infty$. У цій границі система зводиться до локальної задачі багатьох частинок та описується за допомогою одного (домішкового) вузла ґратки, оточеного іншими вузлами, що утворюють зовнішній резервуар. Коректне застосування підходу можна реалізувати за допомогою домішкової моделі Андерсона, для якої була розроблена певна кількість методик вирішення. Зокрема, серед них точна діагоналізація (ED), квантовий метод Монте–Карло, числова ренормгрупа та інші.

3.1 Функції Гріна як математичний апарат для опису систем багатьох частинок

Функція Гріна – найпростіша динамічна величина, що вимірює рівноважні властивості корельованої системи багатьох частинок. З математичної точки зору функцію Гріна $G_{\hat{O}_1 \hat{O}_2}$ [112] визначають як квантовомеханічне середнє від операторів \hat{O}_1 та \hat{O}_2 в різні (дійсні чи уявні) моменти часу. У випадку, коли оператори \hat{O}_1 та \hat{O}_2 позначають оператори народження та знищення, відповідно, функція Гріна вимірює амплітуду ймовірності переходу частинки, що перебуває в точці простору α в момент часу τ , в точку простору α' в момент часу τ' . За скінченних температур зазвичай використовують одночастинкову впорядковану за уявним часом функцію Гріна:

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = -\langle \hat{T} \hat{c}_\alpha(\tau) \hat{c}_{\alpha'}^\dagger(\tau') \rangle = - \begin{cases} \langle \hat{c}_\alpha(\tau) \hat{c}_{\alpha'}^\dagger(\tau') \rangle, & \tau > \tau' \\ -\langle \hat{c}_{\alpha'}^\dagger(\tau') \hat{c}_\alpha(\tau) \rangle, & \tau \leq \tau'. \end{cases} \quad (3.1)$$

Зазначимо, як наслідок циклічної властивості сліду, а також антикомутаційних співвідношень ферміонних операторів, $G_{\alpha\alpha'}(\tau)$ є антиперіодичною функцією, тобто

$$G_{\alpha\alpha'}(\tau) = -G_{\alpha\alpha'}(\tau + \beta), \quad \text{для } -\beta < \tau < \tau', \quad (3.2)$$

де β – обернена температура, $\beta = 1/T$ ($k_B = 1$).

Фур'є перетворення $G_{\alpha\alpha'}(\tau)$ визначає матсубарівську функцію Гріна, а саме

$$G_{\alpha\alpha'}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G_{\alpha\alpha'}(\tau) e^{i\omega_n \tau}, \quad (3.3)$$

де $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ – матсубарівська частота, а $n \in \mathbb{Z}$. Застосовуючи обернене перетворення, можна отримати:

$$G_{\alpha\alpha'}(\tau) = T \sum_n G_{\alpha\alpha'}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}. \quad (3.4)$$

Визначимо спектральну густину:

$$\rho_{\alpha\alpha'}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n | \hat{c}_{\alpha'}^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{c}_\alpha | n \rangle (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) \delta(\omega - (E_n - E_m)), \quad (3.5)$$

де Z – статистична сума, E_n і E_m – власні значення з відповідними власними векторами $|n\rangle$ та $|m\rangle$ великого канонічного ансамблю $H - \mu N$. Тоді функція Гріна у термінах спектральної густини має вигляд

$$G_{\alpha\alpha'}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\rho_{\alpha\alpha'}(\omega)}{i\omega_n - \omega}. \quad (3.6)$$

На практиці розрахування $G_{\alpha\alpha'}(i\omega_n)$ за допомогою спектральної густини можливе лише для невеликих систем, тобто для тих систем, власні вектори та власні значення яких можна отримати точно.

Індекси α та α' можуть позначати як номер вузла ґратки, так і імпульс \mathbf{k} , спінові (або орбітальні) ступені вільності σ . Функції Гріна в реальному та імпульсному просторах пов'язані перетворенням Фур'є. Надалі

в центрі нашої уваги буде локальна функція Гріна, для якої $\alpha = \alpha'$ [112]:

$$G_{ii\sigma}(i\omega_n) = G_{\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n), \quad (3.7)$$

де L позначає кількість вузлів ґратки.

У разі невзаємодійних частинок,

$$H - \mu N \rightarrow H_0 - \mu N = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma},$$

невзаємодійна функція Гріна має вигляд

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (3.8)$$

Для взаємодіючих частинок можна визначити самоенергію $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ як різницю між невзаємодіючою та взаємодіючою оберненими функціями Гріна, а саме

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = G_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)}(i\omega_n)^{-1} - G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)^{-1}, \quad (3.9)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)}. \quad (3.10)$$

Рівняння (3.9) також відоме як рівняння Дайсона.

3.2 Математичне формулювання DMFT

Розглянемо математичне формулювання динамічної теорії середнього поля на прикладі одноорбітальної моделі Фермі–Габбарда:

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_i \hat{n}_{i\sigma}. \quad (3.11)$$

Зауважимо, що гамільтоніан моделі Габбарда вже було розглянуто в розділі 2.1. Основна ідея DMFT полягає у визначенні ефективної динаміки певного вузла, тобто на зосередженні лише на цьому вузлі ґратки та об'єднанні всіх ступенів вільності з інших (див. Рис. 3.1). Варто зазначити, що ми також покладаємо наявність в системі трансляційної інваріантності.

У рамках підходу DMFT основною величиною є локальна функція Грі-

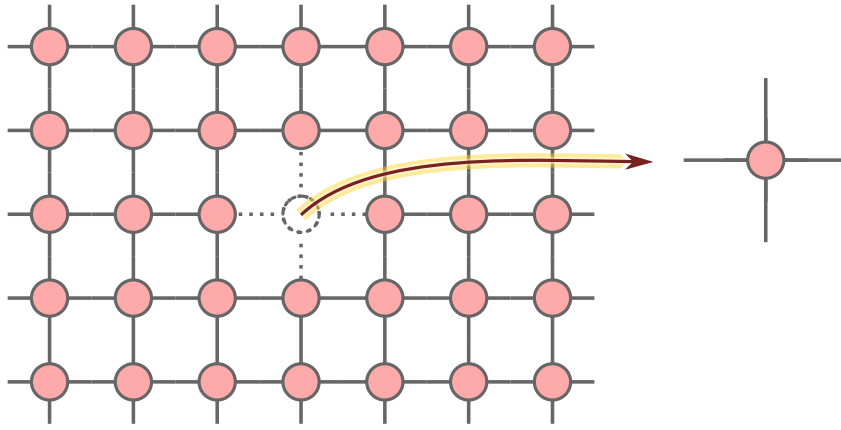


Рис. 3.1: Згідно з теорією динамічного середнього поля задача на ґратці зводиться до локальної задачі багатьох частинок.

на, визначення якої було надано у попередньому підрозділі, тобто

$$G_{loc} \equiv G_{ii}^{\sigma}(\tau - \tau') = -\langle \hat{T} \hat{c}_{i\sigma}(\tau) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle, \quad (3.12)$$

де $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}(\tau)$ ($\hat{c}_{i\sigma}(\tau)$) – ферміонний оператор народження (знищення), який створює (знищує) частинку зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ на вузлі i в момент часу τ (τ'). Відтепер G_{loc} , що містить інформацію про кореляції в системі, ми хочемо подати як функцію Гріна окремого вузла, пов'язаного з ефективним резервуаром [75, 113]. Це можна зробити за допомогою домішкової моделі Андерсона [113] (див. Рис. 3.2):

$$\hat{\mathcal{H}}_A = \hat{\mathcal{H}}_{bath} + \hat{\mathcal{H}}_{coupling} + \hat{\mathcal{H}}_{atom}, \quad (3.13)$$

де

$$\hat{\mathcal{H}}_{bath} = \sum_{l,\sigma} \tilde{\varepsilon}_{l,\sigma} \hat{a}_{l,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{l,\sigma}, \quad (3.14)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{coupling} = \sum_{l,\sigma} V_{l,\sigma} (\hat{a}_{l,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma} + \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{l,\sigma}), \quad (3.15)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{atom} = U \hat{n}_{\uparrow}^c \hat{n}_{\downarrow}^c - \mu (\hat{n}_{\uparrow}^c + \hat{n}_{\downarrow}^c). \quad (3.16)$$

Оператори $\hat{a}_{l,\sigma}^{\dagger}$ і $\hat{a}_{l,\sigma}$ відповідають невзаємодійним ферміонам, які несуть інформацію про ступені вільності зовнішнього резервуару, що діє на вузол i . Оператори $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}$ і $\hat{c}_{i\sigma}$ відповідають локальним ступеням вільності, $\hat{n}_{\sigma}^c = \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma}$ –

оператор густини, а μ – хімічний потенціал. Величини $\tilde{\varepsilon}_{l,\sigma}$ і $V_{l,\sigma}$ позначають параметри Андерсона, де l вказує на номер орбітального стану у зовнішньому резервуарі. Вони обираються таким чином, щоб значення функції Гріна домішкової моделі (модель Андерсона) та локальної функції Гріна (модель Габбарда) були однаковими. У моделі домішок просторові флуктуації не враховуються, але домішка зберігає всі локальні флуктуації, оскільки відбувається динамічний обмін частинками між нею та резервуаром.

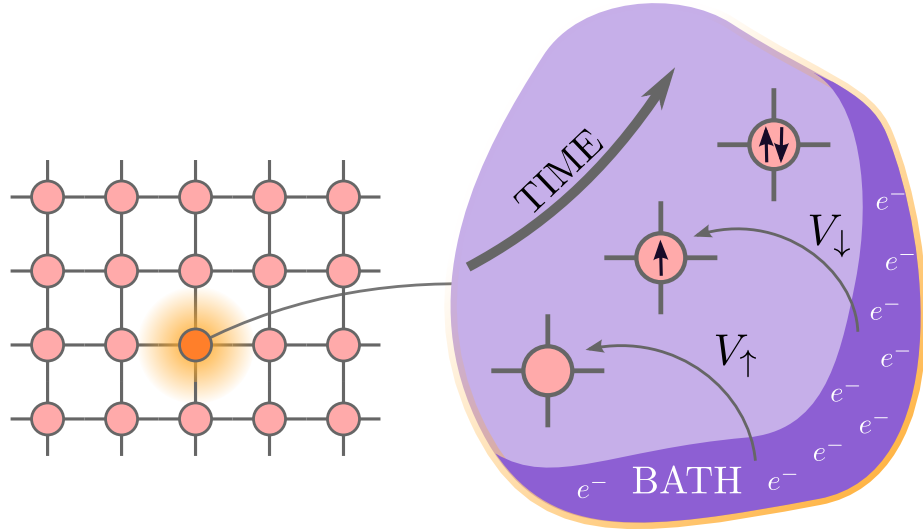


Рис. 3.2: Схематичне зображення переходу від задачі на ґратці до моделі домішок Андерсона. Опис системи відбувається за допомогою одного вузла (домішки), з'єднаного з зовнішнім резервуаром.

Крім того, $\tilde{\varepsilon}_{l,\sigma}$ і $V_{l,\sigma}$ визначають функцію гібридизації:

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}. \quad (3.17)$$

Зазвичай в межах DMFT оперують змінними Грассмана $c_\sigma^\dagger(\tau)$, $c_\sigma(\tau)$, які є повністю незалежними на відміну від ферміонних операторів. Проінтегрувавши за ступенями вільності зовнішнього резервуара, можна отримати ефективну дію для домішки:

$$S_{loc} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_\sigma^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta d\tau n_\uparrow(\tau) n_\downarrow(\tau). \quad (3.18)$$

Рівняння (3.18) описує ефективну динаміку ізолюваного вузла. Як можна

помітити з першого доданку, в момент часу τ ферміон приходить з зовнішнього резервуару і повертається назад в момент часу τ' . Другий доданок означає наявність на домішці двох ферміонів одночасно. Через те, що вузол поєднаний з зовнішнім резервуаром, S_{loc} враховує флуктуації між усіма чотирма домішковими базисними станами, а саме $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ і $|\uparrow\downarrow\rangle$. Варто зазначити, порівняно з класичним підходом середнього поля, теорія динамічного середнього поля оперує функцією Гріна \mathcal{G}_0 як функцією енергії (або часу), що дозволяє розглядати всі локальні квантові флуктуації.

Фур'є образ функції Гріна для ефективної локальної дії без врахування взаємодії (також функції Вейса) \mathcal{G}_0 набуває вигляду

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n). \quad (3.19)$$

У свою чергу, домішкову функція Гріна або локальний пропагатор визначають як

$$G_{imp} \equiv G_\sigma(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \int \prod_\sigma Dc_\sigma^* Dc_\sigma [c_\sigma(i\omega_n) c_\sigma^*(i\omega_n)] e^{-S_{loc}}, \quad (3.20)$$

де Z – статистична сума, яку можна записати як

$$Z = \int \prod_\sigma Dc_\sigma^* Dc_\sigma e^{-S_{loc}}. \quad (3.21)$$

Функцію Вейса можна поєднати з домішковою функцією Гріна за допомогою рівняння Дайсона,

$$\Sigma_{imp} \equiv \Sigma_\sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_n) - G_\sigma^{-1}(i\omega_n), \quad (3.22)$$

де $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ – самоенергія.

Як зазначалося вище, основною метою підходу є отримання таких параметрів Андерсона, за яких домішкова функція Гріна та локальна функція Гріна збігаються. Розглянемо повну взаємодійну функцію Гріна ґратки, тобто $G_{ij}^\sigma(\tau - \tau') = -\langle T c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$. У результаті перетворення Фур'є

$G_{ij}^\sigma(\tau - \tau')$ отримуємо

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega_n)}. \quad (3.23)$$

Тут $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ позначає перетворення Фур'є доданку, що описує стрибки,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sum_j t_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (3.24)$$

Рівняння (3.24) також є дисперсійним співвідношенням для невзаємодійної моделі.

Підсумування за \mathbf{k} у рівнянні (3.23) дає змогу визначити компоненту ґраткової функції Гріна на окремому вузлі,

$$G_{loc}(i\omega_n) \equiv \sum_{\mathbf{k}} G_\sigma(\mathbf{k}, \omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega_n)}. \quad (3.25)$$

Саме з цього моменту починається головне наближення теорії динамічного середнього поля. А саме, ми вважаємо, що самоенергія ґратки збігається з самоенергією домішки. Таке припущення робиться на підставі того, що самоенергія стає суто локальною в границі нескінченного координатного числа [114]. У реальному просторі ми припускаємо, що Σ_{ij} наближається до нуля для $i \neq j$ та

$$\Sigma_{ii} \simeq \Sigma_{imp}. \quad (3.26)$$

У моделі ефективної домішки локальну самоенергію можна отримати за допомогою рівняння Дайсона (3.22),

$$\Sigma_{imp} = \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_n) - G_\sigma^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_\sigma(i\omega_n) - G_\sigma^{-1}(i\omega_n). \quad (3.27)$$

Дотримуючись основного наближення (3.26), локальна функція Гріна має вигляд

$$G_\sigma(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_\sigma(\omega_n)}. \quad (3.28)$$

Вираз (3.28) може бути переписано у термінах невзаємодійної густини ста-

нів,

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \int d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu - \varepsilon - \Sigma_{\sigma}(\omega_n)}, \quad (3.29)$$

де

$$\rho(\varepsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (3.30)$$

Також це співвідношення можна переписати як умову самоузгодженості,

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \int d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\Delta_{\sigma}(i\omega_n) + G_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - \varepsilon}, \quad (3.31)$$

тобто для кожної частоти ω_n воно співвідносить динамічне середнє поле $\Delta_{\sigma}(i\omega_n)$ та локальну функцію Гріна $G_{\sigma}(i\omega_n)$.

Рівняння (3.18), (3.19), (3.22) і (3.29) утворюють повний набір рівнянь для локальної функції Гріна G_{σ} і функції Вейса $\mathcal{G}_{0,\sigma}$.

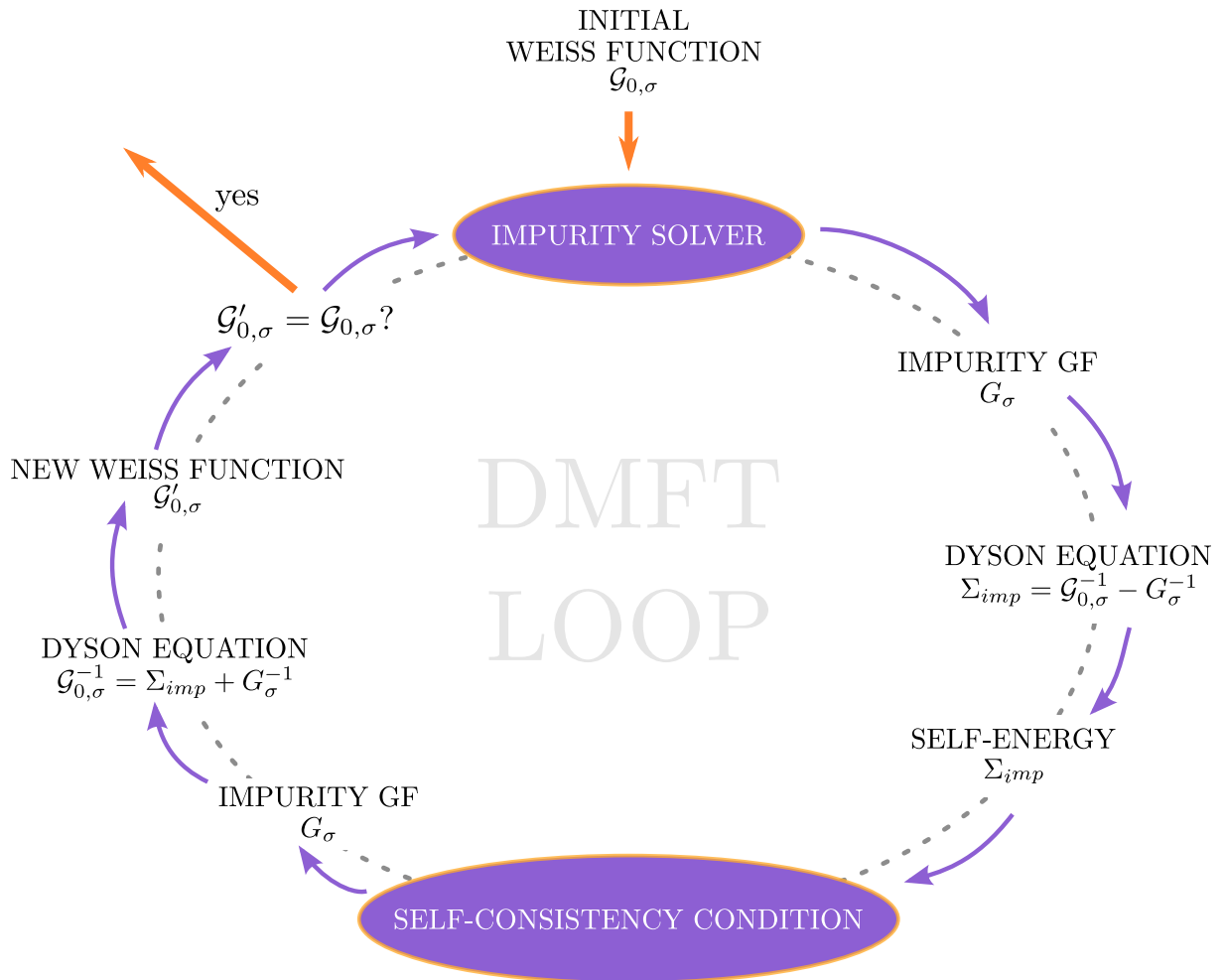


Рис. 3.3: Схематичне зображення ітераційної процедури DMFT.

Підсумовуючи, коротко нагадаємо ітераційну процедуру DMFT (див. Рис. 3.3). На початку циклу необхідно зробити припущення щодо функції Вейса \mathcal{G}_0 . Для обчислення функції Гріна домішки G_{imp} застосовують відповідний розв'язувач. Самоенергія домішки розраховується з рівняння Дайсона $\Sigma_{imp} = \mathcal{G}_{0,\sigma}^{-1}(i\omega_n) - G_{\sigma}^{-1}(i\omega_n)$ і за допомогою \mathbf{k} -підсумовування, як у рівнянні (3.25), визначається локальна функція Гріна. Зрештою, функція Вейса оновлюється за допомогою рівняння Дайсона, $\mathcal{G}'_{0,\sigma}(i\omega_n) = \Sigma_{imp} + G_{\sigma}^{-1}(i\omega_n)$. Наступна ітерація включає $\mathcal{G}'_{0,\sigma}(i\omega_n)$ у якості початкового припущення. Процедура триває до досягнення збіжності.

3.3 Граничні випадки

Хоча DMFT є наближеним методом, у двох граничних випадках можна отримати точні розв'язки [113].

3.3.1 Границя невзаємодійних атомів ($U = 0$)

Як можна побачити, результат рівняння (3.18) дає $G_{\sigma}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{0,\sigma}$, таким чином $\Sigma_{imp} = 0$. Спрощення рівняння (3.25) призводить до

$$\sum_{\mathbf{k}} G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (3.32)$$

Це означає, що функція Гріна зводиться до вільної функції Гріна на вузлі. Як результат зникнення самоенергії, DMFT дає нам точний результат.

3.3.2 Границя за відсутності стрибків ($t_{ij} = 0$)

Коли в системі немає тунелювання, кожен вузол можна вважати незалежним один від одного, що означає $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. Ізоляція атомів призводить до нульової функції гібридизації, $\Delta(i\omega_n) = 0$. Крім того, самоенергія має лише локальні компоненти і, як наслідок, в границі $t_{ij} = 0$ динамічна теорія середнього поля стає точним методом. Оскільки функція Вейса не має члена гібридизації, S_{loc} відповідає квантуванню атомного гамільтоніана. Таким чином, відповідно до [113],

$$G(i\omega_n) = \frac{1 - n/2}{i\omega_n + \mu} + \frac{n/2}{i\omega_n + \mu - U}, \quad (3.33)$$

де

$$n/2 = \frac{e^{\beta\mu} + e^{\beta(2\mu-U)}}{1 + 2e^{\beta\mu} + e^{\beta(2\mu-U)}}. \quad (3.34)$$

3.4 Домішковий розв'язувач — точна діагоналізація

Обчислення домішкової функції Гріна вважають однією з основних частин циклу динамічної теорії середнього поля. Як було зазначено вище, існує певна кількість розв'язувачів домішок зі своїми плюсами та мінусами. Тим не менш, у цій дипломній роботі наша увага зосереджена на методі точної діагоналізації (ED) [75, 115], оскільки всі результати з розділу 4 отримані саме за допомогою цього методу.

Відповідно до зазначеного підходу, точний розв'язок задачі домішок відбувається при обмеженій кількості орбітальних станів n_s . На практиці можна враховувати $n_s \approx 5 - 12$ орбітальних станів у моделі ферміонів зі спіном $1/2$. Така обмежена кількість обумовлена експоненціальним зростанням гільбертового простору. Однак, незважаючи на обмеження, метод точної діагоналізації з раціональною апроксимацією функції Вейса дає надійні результати.

Зупинимося на деяких основних кроках, які слід враховувати для належної реалізації розв'язувача [75].

- Розрахунок функції Вейса можна апроксимувати дискретизованою версією, а саме

$$\mathcal{G}_{0,n_s}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_{l=2}^{n_s} \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}. \quad (3.35)$$

Така апроксимація може розглядатися як проєкція (див. Рис. 3.4) функції Вейса на обмежений функціональний підпростір фіксованої кількості орбіталей n_s . З математичної точки зору це проблема раціонального наближення функцій. Для вирішення цієї задачі можна скористатися одним з існуючих методів (для детальної інформації див. [75]). Звернемо увагу, що якість апроксимації корелює з відстанню між \mathcal{G}_0^{new} і \mathcal{G}_{0,n_s} і зменшується на постійний коефіцієнт зі збільшенням n_s на одиницю.

- Для гамільтоніана моделі домішок Андерсона виконується точна діа-

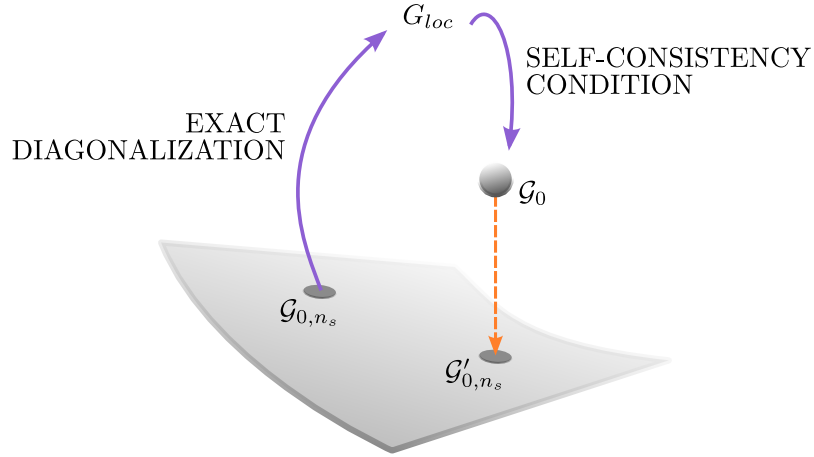


Рис. 3.4: Метод точної діагоналізації передбачає про'єктування функції Вейса \mathcal{G}_0 на простір функцій \mathcal{G}_{0,n_s} , що враховують n_s орбіталей. Про якість наближення можна судити по відстані, що розділяє \mathcal{G}_{0,n_s} та \mathcal{G}'_{0,n_s} .

гоналізація (\mathcal{H}_A є обмеженим певною кількістю орбіталей). У результаті обчислюється функція Гріна $G(i\omega_n)$.

- Після обчислення нової функції Вейса за допомогою рівняння (3.31) її слід порівняти з \mathcal{G}_{0,n_s} , спроектованою на певну кількість орбіталей. Якщо значення не збігаються, наступний цикл алгоритму починається з \mathcal{G}_0^{new} і нового набору параметрів Андерсона V_l і $\tilde{\epsilon}_l$.

Додамо кілька коментарів щодо точної діагоналізації n_s -орбітального гамільтоніана Андерсона. Базисні стани гільбертового простору набувають вигляду

$$|n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow}, \dots, n_{n_s,\uparrow}\rangle |n_{1,\downarrow}, n_{2,\downarrow}, \dots, n_{n_s,\downarrow}\rangle, \quad (3.36)$$

де $n_{l,\sigma} = \{\uparrow, \downarrow\}$ та $\sum_l n_{l,\sigma} = n_\sigma$. Для більшої ефективності можна розбити весь гамільтоніан на окремі блоки з фіксованим числом n_\uparrow і n_\downarrow .

За скінченної температури для обчислення функції Гріна слід брати повний набір власних значень E_i і власних векторів $|i\rangle$, тобто

$$G(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \sum_{i,j} \frac{\langle i|\hat{c}|j\rangle \langle i|\hat{c}^\dagger|j\rangle}{E_i - E_j - i\omega_n} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}), \quad (3.37)$$

де $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$ – статистична сума.

3.5 DMFT на двочастинній ґратці

Для систем з антиферомагнітним упорядкуванням існує можливість розбити ґратку на дві підґратки, див. Рис. 3.5. Підґратки A і B взагалі мають нееквівалентні самоенергії, тобто $\Sigma_\sigma^A \neq \Sigma_\sigma^B$, а також власні оператори народження (знищення) $\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\hat{a}_{i,\sigma}$) і $\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\hat{b}_{i,\sigma}$) відповідно. Отже, кінетичну частину гамільтоніана можна переписати у наступний спосіб:

$$\mathcal{H}_{kin} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger - \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}). \quad (3.38)$$

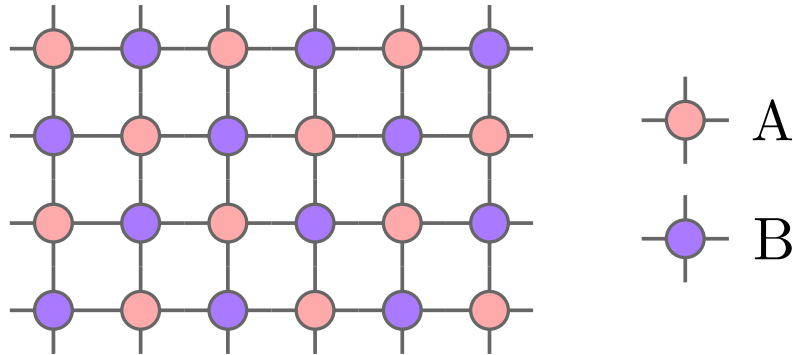


Рис. 3.5: Схематичне зображення двочастинної ґратки, яка розділена на дві підґратки A і B так, що кожний вузол A оточений вузлами з B .

Перетворення Фур'є має вигляд:

$$\mathcal{H}_{kin} = \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (3.39)$$

де спінори визначені як $\Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger)$ та $\Psi_{\mathbf{k},\sigma} = (\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma})^T$. У рівнянні (3.39) $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ є дисперсійним співвідношенням на двочастинній ґратці, а підсумовування за \mathbf{k} виконується в зменшеній зоні Бріллюена. Позначаючи $\zeta_\sigma^X = i\omega_n + \mu - \Sigma_\sigma^X$ з $X = \{A, B\}$, можна записати функцію Гріна у матричній формі,

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} \zeta_\sigma^A & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_\sigma^B \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.40)$$

Отже, у випадку двочастинної ґратки необхідно розв'язати дві ефективні проблеми домішок. Тим не менш, для простого стану Нееля властивості для спіну σ на підґратці A збігаються з властивостями для протилежного

спіну σ' на підґратці B і

$$\zeta_{\sigma}^A = \zeta_{\sigma'}^B. \quad (3.41)$$

Спрощення дозволяє зробити розрахунки тільки для однієї з двох підґраток. Єдина відмінність, яку слід брати до уваги, стосується умови самоузгодженості, оскільки тепер кожен вузол оточений вузлами з різних підґраток. Новий вираз для домішкової функції Гріна має вигляд

$$G_{\sigma}^X = \zeta_{\sigma}^{X'} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\zeta_{\sigma}^A \zeta_{\sigma}^{B-\varepsilon^2}}, \quad (3.42)$$

де X' — підґратка, протилежна X , а $D(\varepsilon)$ — невзаємодійна густина станів, визначена в рівнянні (3.30).

3.6 Багатоорбітальна динамічна теорія середнього поля

Багатоорбітальна динамічна теорія середнього поля є узагальненням відомостей, наведених для одноорбітального випадку. Варто відзначити значне підвищення рівня складності розв'язання системи, що пов'язане зі зростанням вимірності гільбертового простору, а також з наявністю більшої кількості характерних для системи типів взаємодій. Усі функції Гріна, так само як і самоенергії у випадку декількох орбіталей можуть біти подані у вигляді матриць [116], оскільки основні енергетичні стани пов'язані зі збудженими.

Аналогічно до одноорбітальної моделі Габбарда, гамільтоніан багатоорбітальної моделі зіставляється з домішковою моделлю Андерсона, у якій домішка містить декілька енергетичних станів. Більш того, кожний енергетичний рівень характеризується своїм вузлом, а електрони локально гібридизовані між орбіталями.

Зовнішній резервуар, що обмежений певною кількістю орбітальних станів, оточує домішку. Зазначимо, що параметри гібридизації залежать від енергетичного стану. Можна виділити дві концепції поєднання домішки з резервуаром (див. Рис. 3.6). Перша з них передбачає чітку відповідність кожного з вузлів резервуару до конкретної орбіталі домішки. Друга є більш узагальненим випадком, коли усі вузли резервуару поєднанні з кожною орбіталлю домішки.

Гамільтоніан багатоорбітальної моделі Габбарда можна записати у ви-

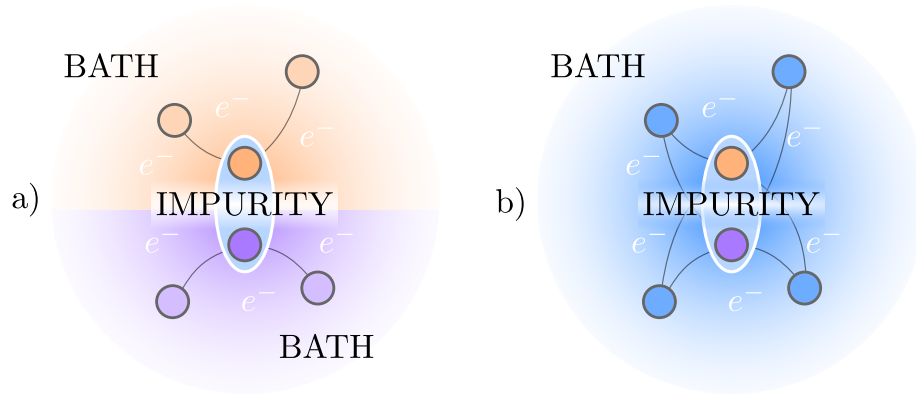


Рис. 3.6: Схематичне зображення концепцій поєднання домішки з резервуаром у випадку багатоорбітальної динамічної теорії середнього поля. а) Кожен вузол резервуару відповідає лише одній з орбіталей домішки. б) Усі вузли резервуару поєднанні з кожною орбітальною домішки.

гляді суми двох доданків, один з яких відповідає за локальні взаємодії, а другий описує тунелювання в системі. Тобто,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int}, \quad (3.43)$$

де

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta,\sigma,\sigma'} t_{ij}^{\alpha\sigma,\beta\sigma'} \hat{c}_{i,\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\beta\sigma'}, \quad (3.44)$$

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} U^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{\alpha i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\beta i,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\gamma i,\sigma} \hat{c}_{\delta i,\sigma}. \quad (3.45)$$

Як і раніше, $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ позначають різні орбіталі. Відзначимо головні зміни, що відбуваються у функціях Гріна та самоенергії:

$$\mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega_n) \rightarrow \mathcal{G}_{0,\sigma\sigma'}^{\alpha\beta}(i\omega_n), \quad (3.46)$$

$$G_\sigma(i\omega_n) \rightarrow G_{\sigma\sigma'}^{\alpha\beta}(i\omega_n), \quad (3.47)$$

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n) \rightarrow \Sigma_{\sigma\sigma'}^{\alpha\beta}(i\omega_n). \quad (3.48)$$

Таким чином, як і було зазначено вище, $\mathcal{G}_{0,\sigma}(i\omega_n)$, $G_\sigma(i\omega_n)$ і $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ переходять в матриці спіно-орбітального простору.

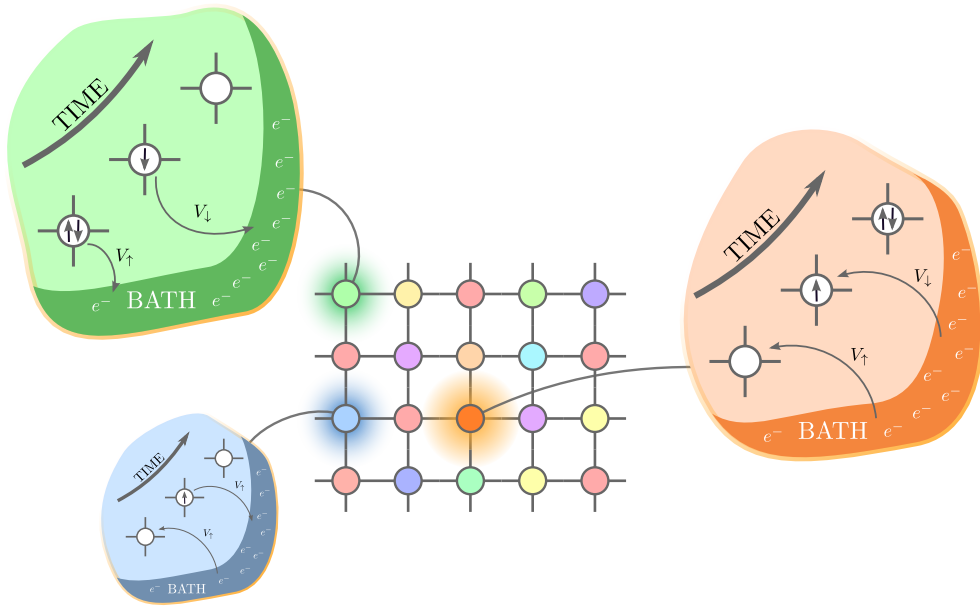


Рис. 3.7: Згідно з теорією динамічного середнього поля у реальному просторі значення самоенергії залежить від вузла ґратки, що вимагає вирішення задачі домішки для кожного вузла окремо.

3.7 Динамічна теорія середнього поля у реальному просторі

Досі ми обговорювали лише однорідні системи та фази, тобто ґратки, у яких усі вузли еквівалентні. У такому випадку домішковий вузол ставиться у відповідність будь-якому вузлу системи. Тепер розглянемо метод динамічного середнього поля у реальному просторі (RDMFT), у якому значення самоенергії залежить від номера вузла. Така модифікація DMFT дозволяє досліджувати більш складні неоднорідні системи з певним (більш складним) магнітним (орбітальним) упорядкуванням або з додатковим потенціалом захоплення. Відповідно до цього методу, кожен вузол має бути відображений в моделі домішок Андерсона незалежно (див. Рис. 3.7). Очевидно, що реалізація RDMFT вимагає більше часу для чисельних обчислень, але вона дає більш точні результати поблизу меж фаз.

Згідно з зазначеним методом, у випадку моделі з двома спіновими та двома орбітальними компонентами (підкреслимо, що обміну частинок між орбітальними станами не відбувається), усі значення самоенергій $\Sigma_{\sigma\sigma}^{(i)}(i\omega_n)$ утворюють ермітову матрицю координатного простору, яка складається з обернених локальних функцій Гріна і елементів з тунелюванням між вузлами. Зазначимо, що ми нехтуємо $\Sigma_{\sigma\sigma'}^{(i)}(i\omega_n)$ при $\sigma \neq \sigma'$. Елемент матриці

координатного простору визначається наступним співвідношенням:

$$[\mathbf{G}^{-1}]_{ij} = \zeta_{\sigma\sigma}^{(i)}(i\omega_n)\delta_{ij} + t_{\sigma}^{(ij)}, \quad (3.49)$$

де δ_{ij} – символ Кронекера, а $t_{\sigma}^{(ij)}$ набуває ненульових значень (наприклад, t_{σ}) лише у випадку, коли дозволене тунелювання між вузлами i та j .

РОЗДІЛ 4

Результати

У цій роботі ми зосереджуємо свою увагу на вивченні двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда (2.52), реалізованої за допомогою охолоджених квантових газів з ферміонними ізотопами атомів стронцію та ітербію. Ізотопи відносяться до групи лужноземельних та їм подібних атомів (див. розділ 1.5), що дає можливість досліджувати системи з двома спіновими та двома орбітальними ступенями вільності проєкції спіну ядра. Орбітальні ступені вільності реалізують за допомогою атомів ^{87}Sr та ^{171}Yb , що знаходяться в основному стані $|g\rangle$ та метастабільному збудженому стані $|e\rangle$; спінові компоненти – двома можливими проєкціями спіну ядра, $|\uparrow\rangle$ і $|\downarrow\rangle$. Подальший аналіз внутрішньо- та міжорбітальних взаємодій системи спирається на експериментально отримані значення [117–121] амплітуд s -хвильового розсіювання, що наведені у Таблиці 1. Як можна помітити, значення a_{eg}^+

	a_{gg}	a_{ee}	a_{eg}^+	a_{eg}^-	Refs.
^{171}Yb	≈ 0	104	240	389	[119–121]
^{87}Sr	96.2	176.0	169	68	[117, 118]

Табл. 1: Довжини s -хвильового розсіювання для чотирьох можливих внутрішньо- та міжорбітальних взаємодій атомів ^{87}Sr та ^{171}Yb . Усі значення в таблиці наведені в одиницях радіуса Бора a_0 з посиланнями на джерела.

та a_{eg}^- доволі сильно відрізняються для різних ізотопів. Ураховуючи цей факт, кожна система атомів характеризується своєю унікальною ієрархією взаємодій, завдяки чому ми маємо можливість досліджувати різні фази у задачах багатьох частинок.

Атоми, що знаходяться в різних станах ($|g\rangle$ або $|e\rangle$), по-різному взаємодіють з близьким до резонансу оптичним полем (з довжиною хвилі λ), створюючим оптичну ґратку. Завдяки цьому ґратка є залежною від стану (SDL). Якщо глибина ґратки для атомів $|g\rangle$ та $|e\rangle$ є однаковою, тобто за однакової поляризованості, атоми знаходяться в оптичному полі з “магічною” довжиною хвилі λ_m . У цій роботі ми припускаємо, що ґратка з помірною амплітудою створена вздовж двох просторових напрямів, а у третьому напрямі діє сильний потенціал магічної ґратки, що практично

унеможливиює рух атомів у відповідному напрямі. Таким чином, система, що досліджується, є квазі-двовимірною.

Для газу атомів ^{171}Yb вважаємо, що станозалежна ґратка створюється вздовж осей x та y з амплітудами $V_x = V_y = 3E_r$. $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$ позначає енергію віддачі атома з масою m , сталою Планка \hbar та $k = 2\pi/\lambda$. Вздовж осі z амплітуду обрано рівною $V_z = 18E_r$ (з $\lambda_m \approx 759$ нм [122]). Варто відзначити, що для дослідження ми обрали поляризованість $p = 2.1$ ($\lambda_{\text{SDL}} \approx 690$ нм [123]). Для атомів ^{87}Sr ми обрали глибину ґратки в напрямках x та y рівною $V_x = V_y = 5E_r$ та $V_z = 18E_r$ в напрямку z ($\lambda_{\text{SDL}} \approx 739$ нм [124], $\lambda_m \approx 813$ нм [43]).

Фокус наших досліджень зосереджений на однорідних нескінченних системах, у яких ми нехтуємо всіма ефектами, що пов'язані з потенціалом захоплення (потенційно такі ефекти можуть бути включені до теоретичного формалізму). Тим не менш, у розділі 4.4 ми розглянемо систему атомів ^{171}Yb в оптичній ґратці за наявності зовнішнього потенціалу $V(x)$, направленого вздовж однієї з осей ґратки.

За допомогою рівнянь (2.48), (2.49), (2.51) та (2.50) нами було отримано параметри Габбарда для ізотопів атомів ^{87}Sr та ^{171}Yb . Результати розрахунків для ^{171}Yb зібрані в Таблиці 2. Як можна побачити з Таблиці 2, для

	t_e	U_{gg}	U_{ee}	V	V_{ex}
^{171}Yb	0.4171	0	2.423	5.513	-1.306

Табл. 2: Амплітуди параметрів Габбарда для атомів ^{171}Yb в одиницях амплітуди тунелювання t_g у випадку $V_x = V_y = 3E_r$; $V_z = 18E_r$.

ітербію-171 енергії взаємодій мають наступну ієрархію $V_{ex} < U_{gg} < U_{ee} < V$. У Таблиці 3 наведені параметри Габбарда для систем, що складаються з атомів ^{87}Sr при $V_x = V_y = 5E_r$ та $V_z = 18E_r$. Проведення досліджень з іншим набором параметрів ми мотивуємо тим, що амплітуди взаємодій у випадку $V_x = V_y = 5E_r$ мають більші значення і дають змогу спостерігати більш сильні сигнали упорядкування. Варто відзначити, що ієрархія амплітуд взаємодій у випадку стронцію-87 має інший характер, а саме $V_{ex} < U_{gg} < V < U_{ee}$. Більш того, атоми ^{171}Yb , на відміну від атомів ^{87}Sr , характеризуються антиферромагнітним зв'язком Гунда ($V_{ex} < 0$), а також нульовою внутрішньоорбітальною амплітудою взаємодії атомів g ($U_{gg} \approx 0$).

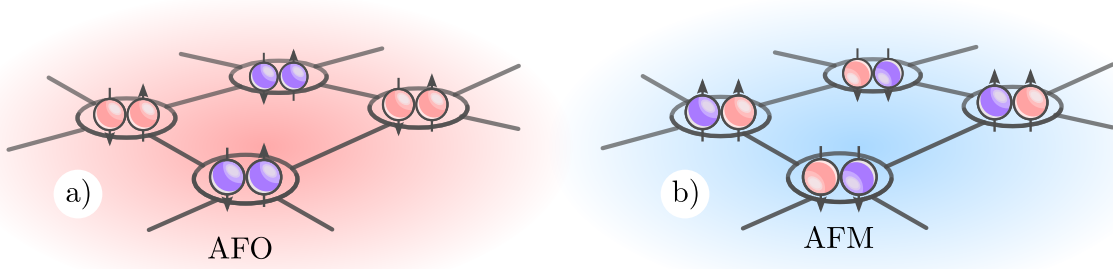


Рис. 4.1: Схематичне зображення а) антиферо-орбітального (AFO) та б) антиферромагнітного (AFM) впорядкувань при $n_g = n_e = 1$.

Наявність таких розбіжностей дає нам натяк на те, що в основному стані атоми ^{171}Yb та ^{87}Sr перебувають у різних упорядкованих фазах.

	t_e	U_{gg}	U_{ee}	V	V_{ex}
^{87}Sr	0.2591	3.051	9.118	4.698	1.998

Табл. 3: Амплітуди параметрів Габбарда для атомів ^{87}Sr в одиницях амплітуди тунелювання t_g у випадку $V_x = V_y = 5E_r$; $V_z = 18E_r$.

Відзначимо, що всі результати, наведені нижче, отримані за допомогою методу динамічного середнього поля (DMFT) та методу динамічного середнього поля у реальному просторі (RDMFT). При вирішенні задачі домішок був використан метод точної діагоналізації з урахуванням до $n_s = 3$ орбіталей резервуару у моделі Андерсона (див. розділ 3.4).

4.1 Залежність критичної температури від густини атомів у ґратці

За високих температур системи атомів, що знаходяться в оптичній ґратці, перебувають у парамагнітному (невпорядкованому) стані. Це обумовлюється тим, що тепловий хаотичний рух руйнує будь-які орбітальні або магнітні кореляції. За подальшого зниження температури ми маємо можливість спостерігати певні впорядкування в системі. Тип упорядкувань безпосередньо залежить від досліджуваного ізотопу та пропорцій g і e атомів у ґратці.

У цій роботі ми демонструємо можливість досягнення та моделювання антиферромагнітного (AFM) та антиферо-орбітального (AFO) впорядкувань (Рис. 4.1) за допомогою лужноземельних та їм подібних атомів у

оптичних ґратках. АФМ фаза (стан Нееля) супроводжується заповненням ґратки, при якому на сусідніх вузлах розміщені атоми мають різні проєкції спіну ядра. У той самий час, фаза АФО характеризується почерговим заповненням сусідніх вузлів ґратки атомами з різних орбіталей. За аналогією зі станом Нееля, ґратка може розглядатися як набір двох підґраток: одна переважно зайнята парами g -атомів, тоді як інша переважно зайнята атомами у стані e .

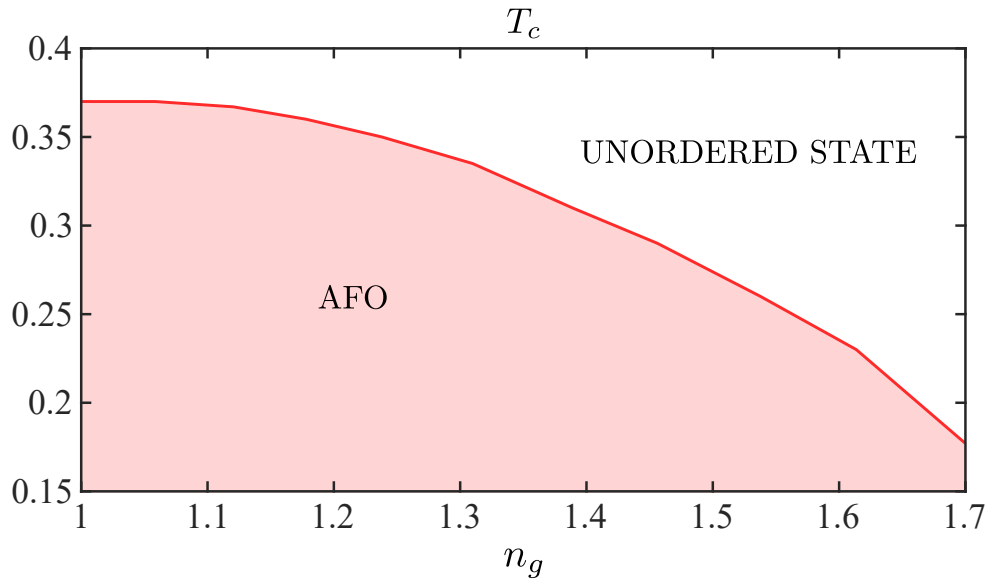


Рис. 4.2: Для ізоотопу ^{171}Yb залежність критичної температури T_c від кількості g та e атомів у ґратці за умови $n_g + n_e = 2$. Значення температури T_c наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

При досить низьких температурах система атомів ^{171}Yb набуває АФО упорядкування, що обумовлено певною ієрархією амплітуд взаємодії. На Рис. 4.2 зображена залежність критичної температури T_c від густини атомів, що перебувають в двох різних станах g та e . Зауважимо, що повна густина $n = n_g + n_e$ є фіксованою і дорівнює $n = 2$. Тож, збільшення кількості атомів g супроводжується зменшенням кількості атомів e . Як можна побачити, зі збільшенням n_g у системі відбувається зниження критичної температури, а її максимальне значення відповідає заселеності ґратки з $n_g = n_e = 1$ ($T_c \approx 0,37t_g$). Таке співвідношення густин супроводжується найбільшою ентропією в системі. Як видно на Рис. 4.2, зона, що знаходиться під кривою, характеризується антиферо-орбітальними кореляціями, в той час як зона над кривою – неупорядкований стан.

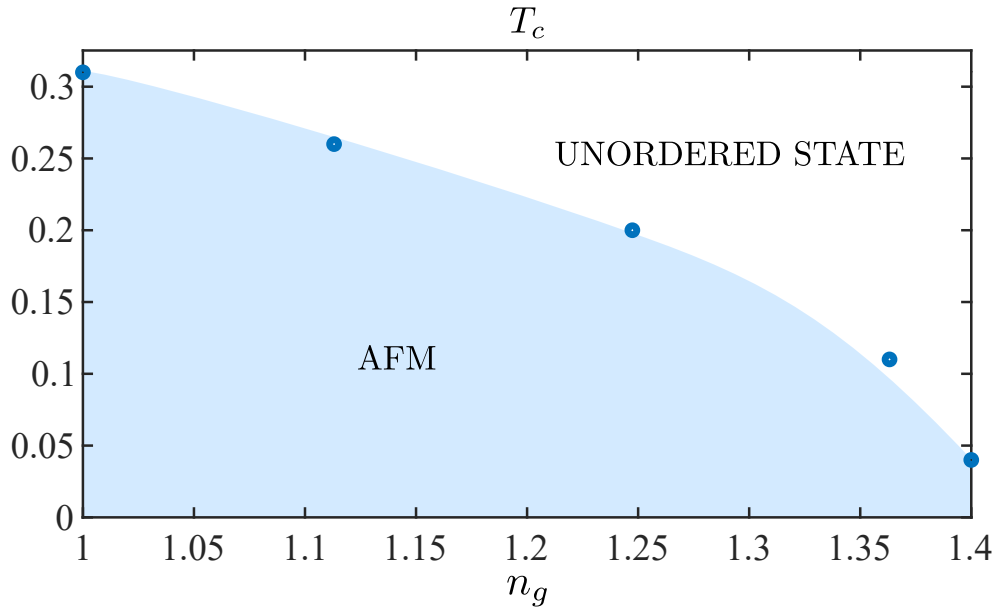


Рис. 4.3: Для ізоотопу ^{87}Sr залежність критичної температури T_c від кількості g та e атомів у ґратці за умови $n_g + n_e = 2$. Значення температури T_c наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

Водночас, основний стан для атомів ^{87}Sr при $n_g + n_e = 2$ характеризується антиферромагнітним упорядкуванням. Залежність критичної температури від густини атомів в системі зображена на Рис. 4.3. Зі збільшенням кількості g атомів у ґратці помітне доволі швидке зниження T_c (при $n_g = 1,4$ значення $T_c < 0,05t_g$). Крива, що позначає $T = T_c$, поділяє Рис. 4.3 на дві різні зони: при $T < T_c$ системі атомів ^{87}Sr притаманне антиферромагнітне упорядкування, в той час як при $T > T_c$ система знаходиться в неупорядкованому (парамагнітному) стані.

4.2 Орбітальні та спінові корелятори між вузлами ґратки

Як було сказано раніше, в основному стані система атомів ^{171}Yb проявляє АФО упорядкування при $n_g + n_e = 2$ з найсильнішим сигналом при $n_g = n_e = 1$. Для аналізу цього явища можна обчислити корелятор $\langle \hat{T}_i^z \rangle \langle \hat{T}_{i+1}^z \rangle$ орбітальних станів між сусідніми вузлами ґратки. Надамо визначення орбітального оператора:

$$\hat{T}_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\tau=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{i\gamma\tau}^\dagger \hat{\sigma}_{\gamma\gamma'}^z \hat{c}_{i\gamma'\tau}, \quad (4.1)$$

де $\hat{\sigma}_{\gamma\gamma'}^z$ є матрицею Паулі.

Залежність корелятора $\langle \hat{T}_i^z \rangle \langle \hat{T}_{i+1}^z \rangle$ від заповнення ґратки атомами g та e зображено на Рис. 4.4. Зауважимо, що загальна кількість частинок в системі, як і у випадку визначення критичної температури, дорівнює $n_g + n_e = 2$. Як можна побачити з Рис. 4.4, зі зниженням температури спостерігається посилення сигналу антиферо-орбітальних кореляцій. Можна припустити, що за нульових температур значення корелятора досягає свого мінімуму $\langle \hat{T}_i^z \rangle \langle \hat{T}_{i+1}^z \rangle = -1$, що відповідає ідеалізованому випадку, коли сусідні вузли ґратки по чергово займають пари g або e атомів. При збільшенні кількості g атомів у системі відбувається послаблення орбітальних кореляцій. За певного значення густини n_g кореляції зовсім згасають – система переходить від упорядкованого режиму до парамагнітного. Індикатором такого переходу є наявність зламу кривих, зображених на Рис. 4.4.

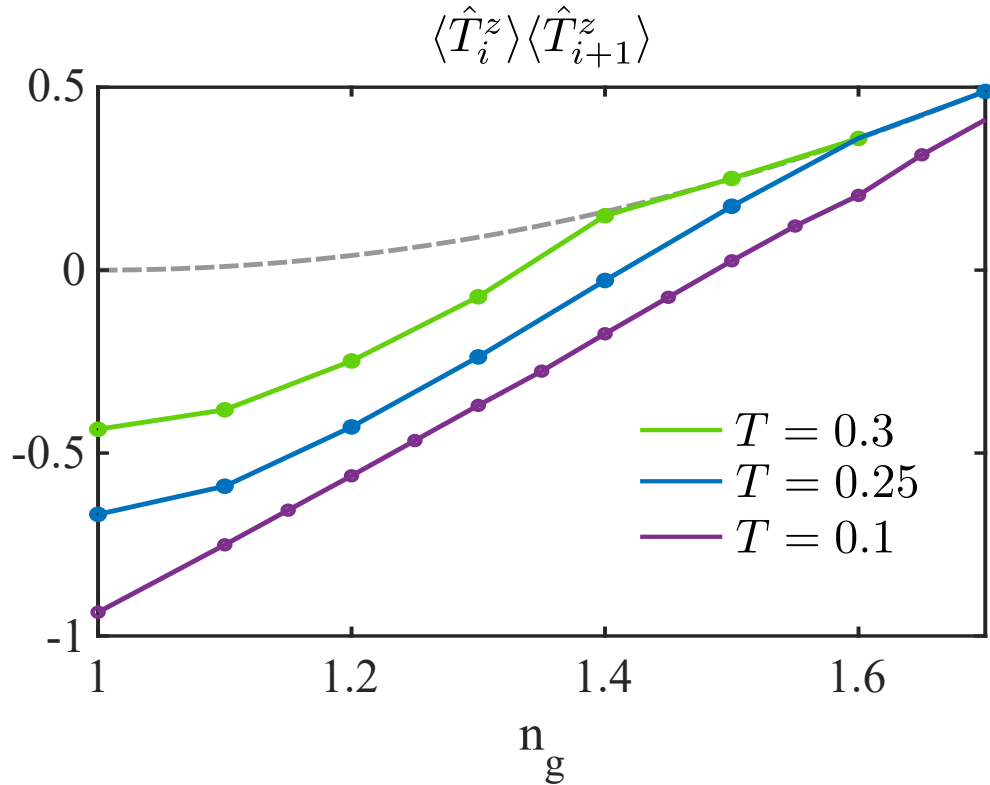


Рис. 4.4: Для газу ^{171}Yb залежність орбітальних кореляцій від густини атомів g та e при різних температурах за умови $n_g + n_e = 2$. Сіра пунктирна лінія зображує залежність, описану виразом (4.2). Значення температури T наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

Якщо на кожному вузлі ґратки перебуває однакова кількість атомів g

(\tilde{n}_g) та атомів e (\tilde{n}_e), то має місце наступний вираз:

$$\langle \hat{T}_i^z \rangle \langle \hat{T}_{i+1}^z \rangle = \frac{1}{4}(n_{i,g} - n_{i,e})(n_{i+1,g} - n_{i+1,e}) = \frac{1}{4}(\tilde{n}_g - \tilde{n}_e)^2. \quad (4.2)$$

За додаткової умови $n_g + n_e = 2$ рівнянню (4.2) відповідає сіра пунктирна крива на Рис. 4.4. За скінчених температур, коли система атомів ^{171}Yb переходить від антиферо-орбітального упорядкування до неупорядкованого стану, криві накладаються на сіру лінію.

У випадку, коли система складається з атомів ^{87}Sr , основний стан при $n_g + n_e = 2$ характеризується антиферомагнітним упорядкуванням. Для аналізу поведінки корелятору $\langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \hat{S}_{i+1}^z \rangle$ від густин g та e атомів запишемо вираз для спінового оператора:

$$\hat{S}_{i\gamma}^z = \frac{1}{2}c_{i\gamma\tau}^\dagger \sigma_{\tau\tau'}^z c_{i\gamma\tau'}. \quad (4.3)$$

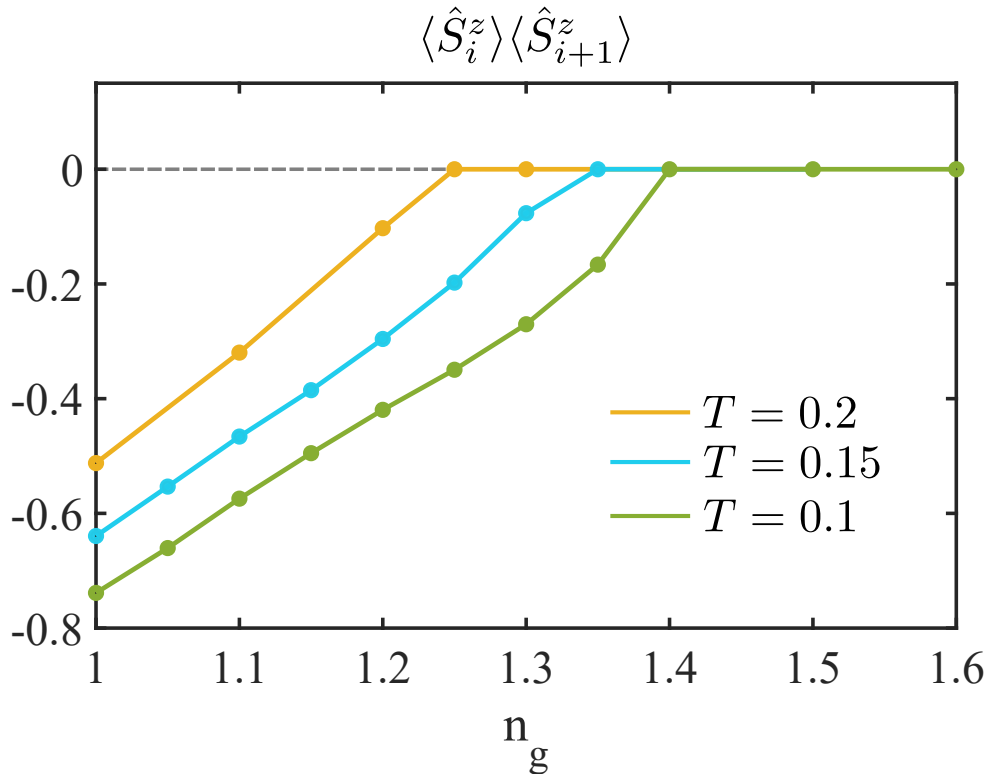


Рис. 4.5: Для ^{87}Sr залежність спінових кореляцій від густини атомів g та e при різних температурах за умови $n_g + n_e = 2$. Сіра пунктирна лінія відповідає випадку $n_\uparrow = n_\downarrow$. Значення температури T наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

Оскільки спінові ступені вільності не залежать від орбітальних, збільшення кількості атомів g не впливає на пропорції між n_{\uparrow} і n_{\downarrow} . Перехід від упорядкованого антиферомагнітного стану до парамагнітного стану характеризується нульовим значенням корелятора $\langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \hat{S}_{i+1}^z \rangle$, що відповідає $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$. На Рис. 4.5 зображені залежності $\langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \hat{S}_{i+1}^z \rangle$ від заповнення ґратки атомами g та e . Як і у випадку ^{171}Yb з антиферо-орбітальним режимом, найсильніший сигнал присутній за конфігурації $n_g = n_e = 1$, а температура Нееля характеризується зламом кривих.

4.3 Залежність густини g та e атомів від хімічного потенціалу

До цього моменту ми розглядали лише однорідні системи, нехтуючи усіма ефектами, пов'язаними з потенціалом захоплення. Однак такі системи є досить ідеалізованими. Насправді в експериментальних умовах утримувати конкретну кількість атомів одночасно на всіх вузлах системи неможливо. Саме тому для спостереження тих чи інших впорядкованих фаз важливо розуміти, в яких саме межах можна варіювати густини частинок g та e .

Для вивчення цієї проблеми більш детально, нами було проведено аналіз залежності густини g та e атомів від $\Delta\mu$, де $\Delta\mu$ є відхиленням хімічного потенціалу μ від значення, що гарантує певне значення середньої густини, зокрема, $n_g = n_e = 1$. На Рис. 4.6 наведено результати для ізотопу ^{171}Yb . У розділі 4.1 ми визначили критичну температуру ($T_c \approx 0,37t_g$), нижче якої при $n_g + n_e = 2$ присутні антиферо-орбітальні кореляції.

Як бачимо з Рис. 4.6(а), за температури $T = 0,3t_g$ при збільшенні $\Delta\mu$ до $\Delta\mu \approx 2$ кількість атомів є сталою величиною, що обумовлює стабільність АФО сигналу. При подальшому зниженні хімічних потенціалів спостерігається різке зменшення густини атомів e , що призводить до згасання антиферо-орбітальних кореляцій і переходу системи до невпорядкованого стану при $\Delta\mu \approx 3$. Зі зниженням температури (див. Рис. 4.6(б,в)) плато, при якому $n_g = n_e = 1$, подовжується, а зменшення n_e в системі стає ще більш швидким. Тим не менш, загальна густина n не зазнає таких різких змін, що пов'язано зі зростанням кількості атомів у стані g . Більш того, варто відзначити появу феро-орбітальної фази, що стає більш стабільною відносно флуктуацій кількості атомів з подальшим зниженням температури.

Згідно з Рис. 4.3, за температури $T < T_c$ ($T_c \approx 0,3t_g$), система з ато-

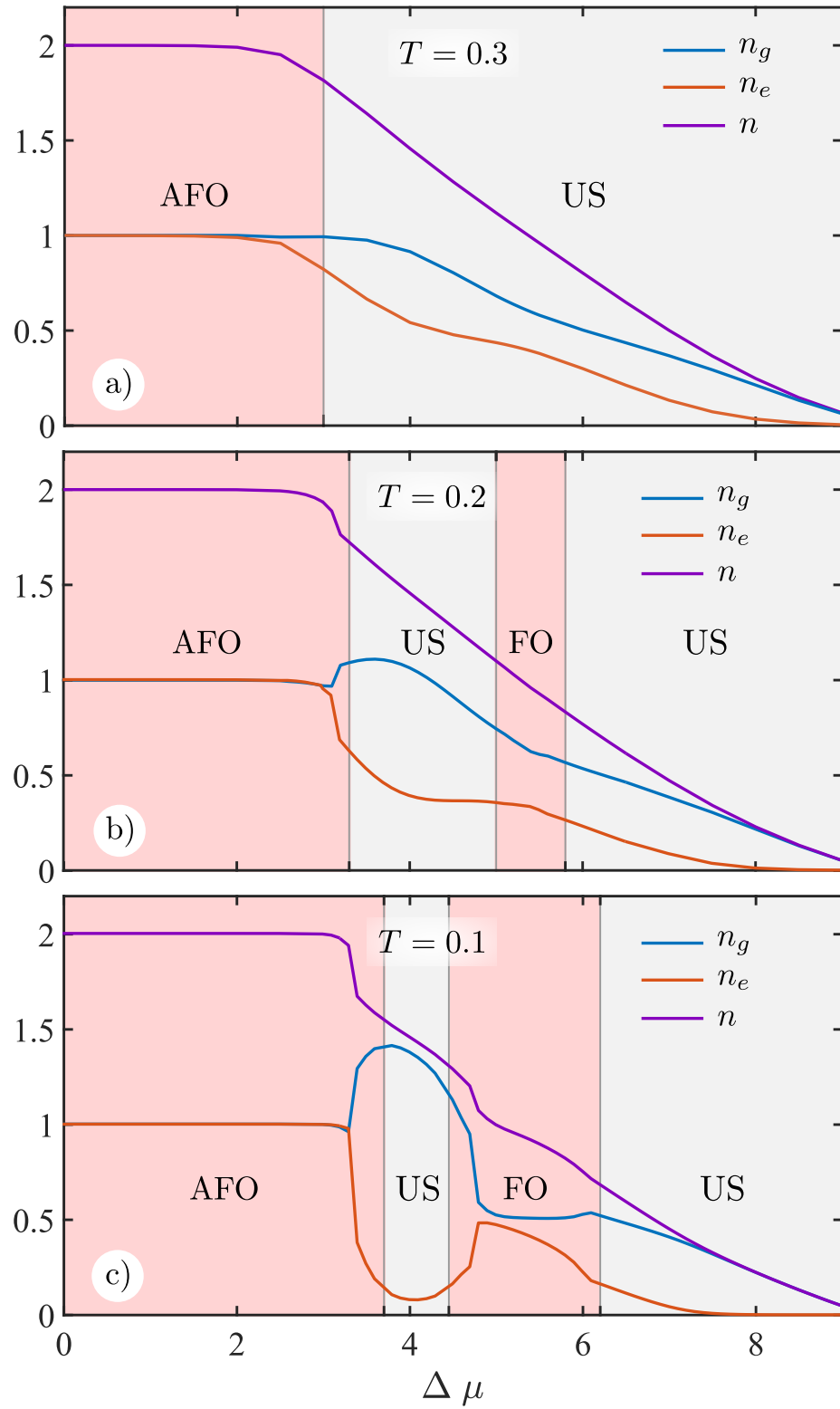


Рис. 4.6: Залежність густини атомів g та e , а також загальної густини n від $\Delta\mu$ для ізооту ^{171}Yb за різних температур. Значення температури T наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

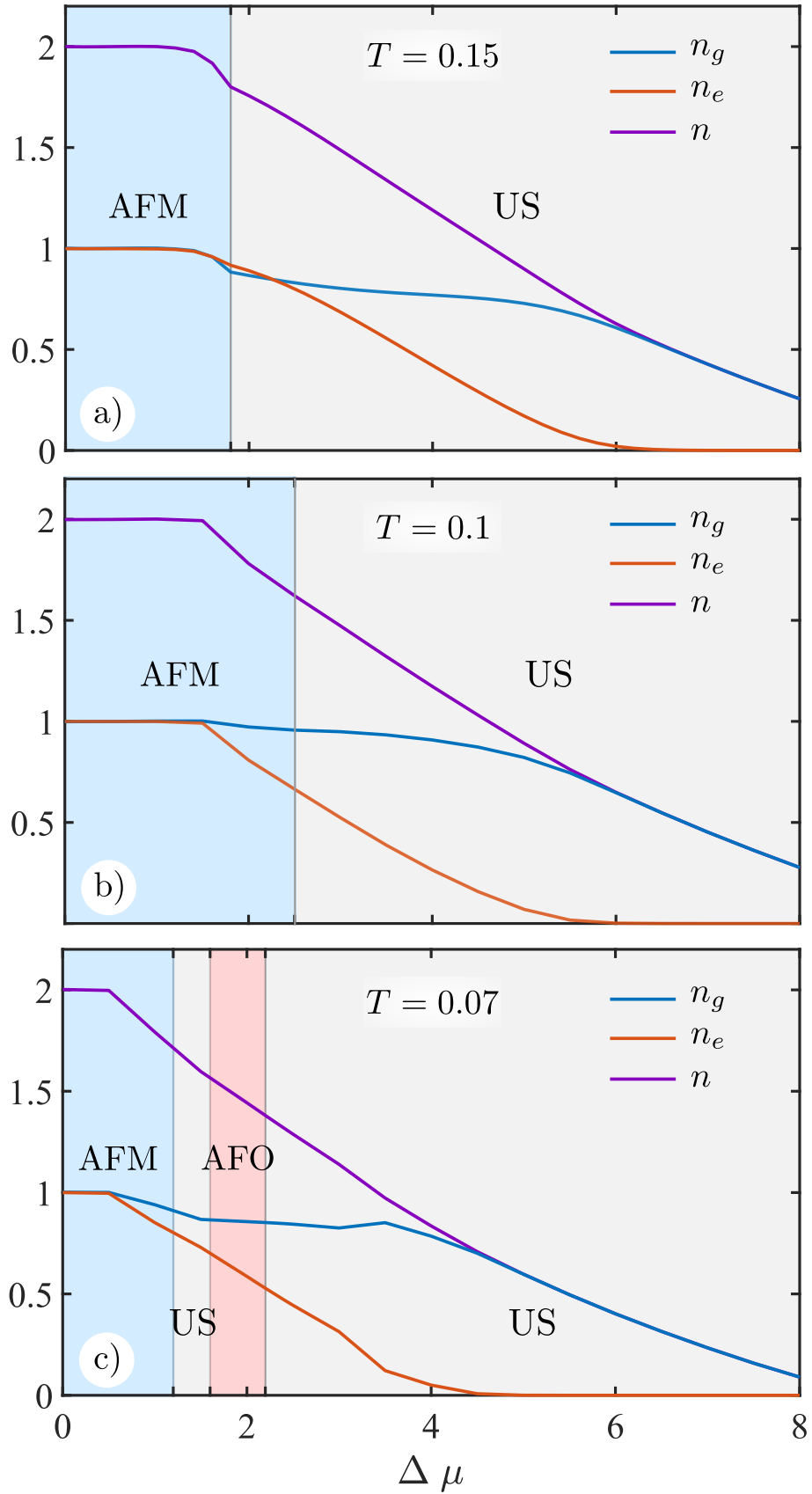


Рис. 4.7: Залежність густини атомів у станах g та e , а також загальної густини n від $\Delta\mu$ для ізоотопу ^{87}Sr за різних температур. Значення температури T наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

мів ^{87}Sr при $n_g = n_e = 1$ зазнає антиферромагнітного впорядкування. Залежність n_g та n_e від відхилення $\Delta\mu$ у випадку стронцію-87 продемонстрована на Рис. 4.7. Як можна побачити, при $\Delta\mu < 2$ кількість атомів залишається незмінною, зберігаючи, таким чином, сильний АФМ сигнал. Антиферромагнітні кореляції слабшають при подальшому збільшенні $\Delta\mu$, що пояснюється значною зміною густини атомів у стані e по відношенню до атомів у стані g . Зазначимо, у випадках (а,б) спостерігається наявність лише двох фаз – антиферромагнітної та парамагнітної. Однак, у [125] для квазі-одновимірної ґратки з глибиною $V_x = 5E_r$; $V_y = V_z = 18E_r$ за нульових температур спостерігається антиферо-орбітальне впорядкування для систем з атомами ^{87}Sr при $n_g + n_e = 1,5$. У нашому випадку за помірних температур $T > 0,1t_g$ спостереження АФО фази не відбувалося. Тим не менш, за подальшого зниження до $T = 0,07t_g$ (див. Рис. 4.7 (в)) стає помітним слабкий антиферо-орбітальний сигнал при $\Delta\mu \approx 2$. Тож, за достатньо низьких температур для ферміонного ізотопу стронцію-87 є можливість спостерігати в одній пастці три різні фази: антиферромагнітну при $n_g + n_e \approx 2$, антиферо-орбітальну при $n_g + n_e \approx 1,5$ та парамагнітну. Більш того, наші результати корелюють з результатами, отриманими за допомогою DMFT підходу для систем з атомами ^{173}Yb , що має таку ж ієрархію амплітуд взаємодій, як і ферміонний ізотоп ^{87}Sr [123].

4.4 Метод динамічного середнього поля у реальному просторі

Розглянемо поведінку атомів в оптичній ґратці за наявності зовнішнього потенціалу, заданого рівнянням

$$V(x) = \Delta\tilde{\mu}x, \quad (4.4)$$

де $\Delta\tilde{\mu}$ є сталою величиною. У такому випадку систему неможливо розв'язати за допомогою класичного методу динамічного середнього поля, адже тепер вузли ґратки, що мають різну координату x , не є еквівалентними. Ідея, яка може застосовуватися для систем за наявності зовнішнього потенціалу полягає у вирішенні задачі домішок для кожного вузла окремо, тобто у використанні методу динамічного середнього поля у реальному просторі.

Для аналізу поведінки атомів ^{171}Yb з потенціалом (4.4) ми обмежимося наступними розмірами оптичної ґратки: $L_x = 12$ та $L_y = 6$. У попередніх

розділах ми виявили наявність антиферо-орбітального впорядкування при $n_g + n_e = 2$ та $T < 0,37t_g$.

Рис. 4.8(а) зображує розподіл густини g та e атомів на вузлах ґратки за температури $T = 0,37t_g$. Як можна побачити, на вузлах зліва, де вплив потенціалу менший, спостерігаються АФО кореляції, тобто почергове заселення ґратки парами атомів в станах g та e . Зі збільшенням порядкового номеру вузла вплив потенціалу зростає, а тому антиферо-орбітальна фаза поступово зникає – система переходить до парамагнітного стану. На Рис. 4.8 (а) це супроводжується розмиванням шахового впорядкування.

Для підрахунку загальної густини n ми провели підсумовування кількості атомів g та e вздовж напрямку y (потенціал покладено незмінним вздовж y та використано відповідні періодичні граничні умови). Відзначимо, що залежність n у випадку DMFT (див. Рис. 4.6(а)) добре узгоджується на кількісному рівні з результатами, отриманими за допомогою RDMFT (див. Рис. 4.8(б)).

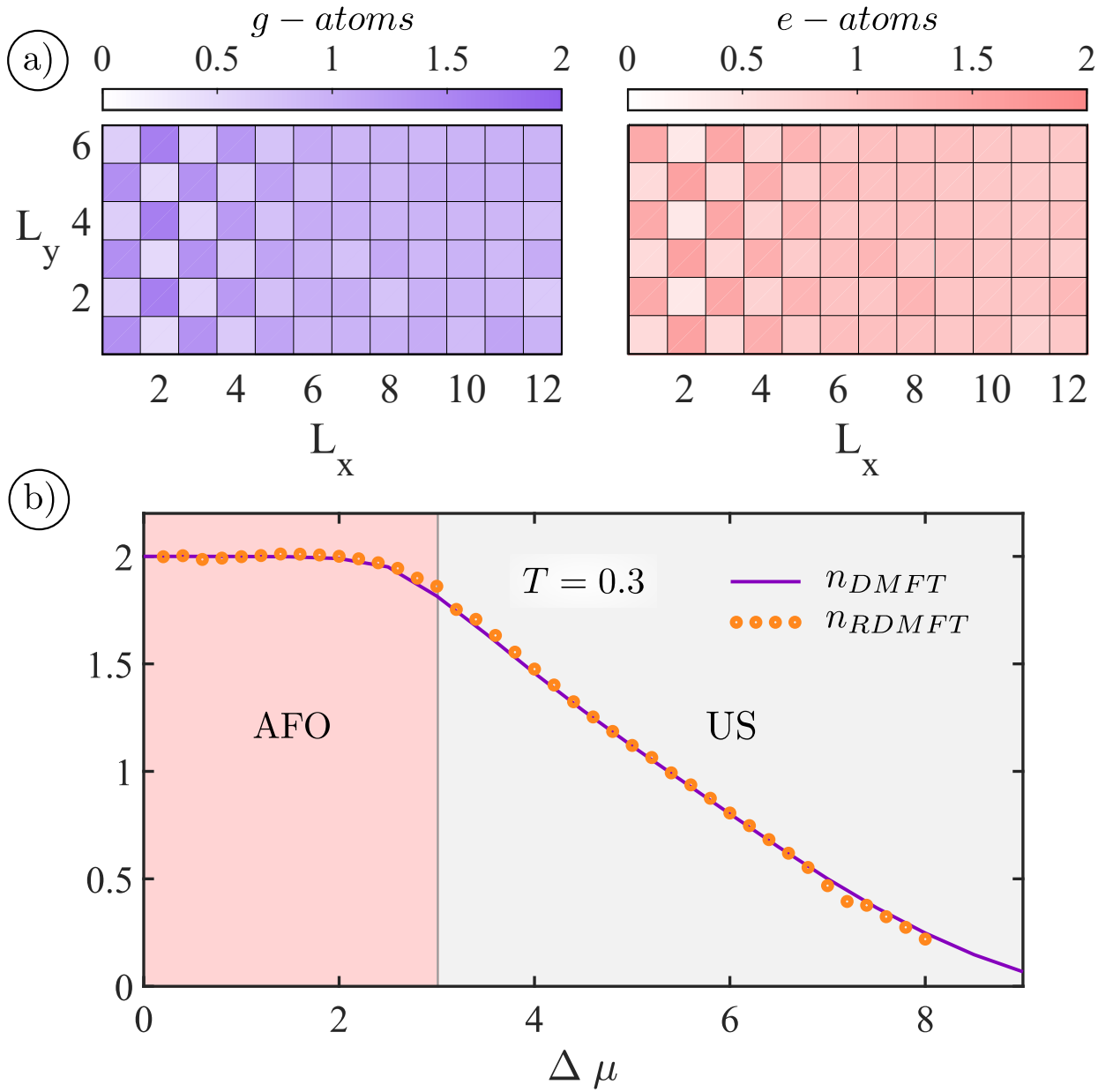


Рис. 4.8: а) Розподіл густини g та e атомів на вузлах ґратки під впливом зовнішнього потенціалу (4.4); б) порівняння залежностей загальної густини n , отриманої методами DMFT та RDMFT. Значення температури T наведені в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

ВИСНОВКИ

Ця робота була присвячена дослідженню сильнокорельованих фаз у газах лужноземельних та їм подібних атомів, розміщених в оптичних ґратках. У першому розділі ми приділили увагу теоретичним відомостям про захоплені пастками атоми, а саме проаналізували, які зовнішні сили діють на частинки та як останні взаємодіють між собою. В роботі була наведена інформація щодо охолодження та утримання систем за допомогою магніто-оптичних пасток, а також можливості налаштування короткодійних взаємодій з використанням резонансів Фешбаха. Крім того, ми розглянули властивості лужноземельних та їм подібних атомів та обґрунтували причини їхнього використання в експериментах з ультрахолодними газами.

Опис досліджуваної системи відбувався з використанням моделі Фермі-Габбарда. Щоб отримати повну теоретичну картину, ми почали з побудови гамільтоніану, який спершу було запроновано для опису корелюючих у вузьких енергетичних зонах електронів. Шляхом певних спрощень отримано вираз для випадку двоорбітальної системи, що вивчалась у цій роботі. Нами було розглянуто граничні випадки та симетрії, характерні для моделі Фермі-Габбарда. Крім того, ґрунтуючись на відомостях з теорії розсіювання, ми перезаписали амплітуди взаємодій, що входять до гамільтоніана в термінах довжин розсіювання.

Провідним методом, який використовувався у цій дипломній роботі, була динамічна теорія середнього поля. На початку третього розділу ми ввели поняття функції Гріна як необхідної математичної конструкції для опису систем багатьох частинок. Надалі ми зосередилися на математичному формулюванні динамічної теорії середнього поля, ввели поняття моделі домішок Андерсона задля зведення нелокальної задачі багатьох тіл на ґратці до локальної задачі з урахуванням локальних флуктуацій. Крім того, нами була описана ітераційна процедура чисельного теоретичного підходу, в якій для знаходження домішкової функції Гріна використовувався метод точної діагоналізації. Для аналізу упорядкованих систем ми розширили метод динамічної теорії середнього поля до випадку двочастинної ґратки, а для систем з додатковим потенціалом захоплення описали концепцію динамічної теорії середнього поля у реальному просторі. Додатково нами було узагальнено теоретичний підхід для багатоорбітальних систем, описаних

за допомогою мультиорбітальної моделі Фермі–Габбарда.

Ми продемонстрували, що лужноземельні та їм подібні атоми – це перспективні кандидати для експериментального спостереження явищ орбітальних та спінових впорядкувань. Вони також є гарними інструментами для покращення розуміння відповідних механізмів у твердотільних матеріалах. Зокрема ми визначили, що ієрархія амплітуд взаємодій впливає на впорядкування основного стану системи з ультрахолодними атомами. Так для ізотопу ^{171}Yb з антиферомагнітним зв'язком Гунда ($V_{\text{ex}} < 0$) при $n_g + n_e = 2$ притаманне антифероорбітальне впорядкування. У той самий час, для атомів ^{87}Sr основний стан характеризується антиферомагнітними кореляціями за тієї ж загальної густини частинок у ґратці.

Один з підрозділів було присвячено залежності критичної температури від густини частинок у стані g за сталої загальної кількості атомів у системі, тобто $n_g + n_e = 2$. Таким чином, ми виявили, за якої саме температури системи з лужноземельними та їм подібними атомами починають проявляти те чи інше впорядкування. Крім того, для різних скінченних температур нами були розраховані двовузлові середні типу $\langle \hat{T}_i^z \rangle \langle \hat{T}_{i+1}^z \rangle$ (для антифероорбітальних кореляцій) та $\langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \hat{S}_{i+1}^z \rangle$ (для антиферомагнітних кореляцій), що можуть бути виміряні експериментально. Отримані залежності демонструють послаблення кореляцій з підвищенням температури.

Окрему частину цієї роботи займав аналіз залежності густини атомів у станах g і e від хімічного потенціалу. Дослідження було мотивоване складністю утримання фіксованої кількості атомів за умови проведення реального експерименту. Отримана залежність продемонструвала, що за певних температур та певної густини частинок g і e для атомів ^{171}Yb характерне антифероорбітальне та фероорбітальне впорядкування. У той самий час, системи з ізотопом ^{87}Sr можуть проявляти як антиферомагнітні, так і антифероорбітальні (за досить низьких температур, $T \leq 0,07 t_g$) сигнали.

Ми також розглянули залежності густини атомів у станах g і e за наявності додаткового потенціалу захоплення, що змінюється лінійно вздовж однієї з осей ґратки зі збільшенням номеру вузла. Для цього була використана динамічна теорія середнього поля у реальному просторі, результати якої цілком відповідають залежності густини від хімічного потенціалу, отриманої з використанням наближення локальної густини для нескінчен-

ної системи.

Отримані результати є актуальними та важливими для експериментів з ультрахолодними газами нейтральних атомів у оптичних ґратках, а саме з газами лужноземельних та їм подібних атомів. Насамперед, результати вказують на можливість спостереження декількох впорядкованих фаз та узгоджуються з результатами, зафіксованими в праці [125] для іншої розмірності ґратки та в праці [123] при дослідженні системи з ізотопом ^{173}Yb . Аналіз, проведений в цій роботі, може бути розширено шляхом зміни глибини ґратки та співвідношення поляризованості між різними орбітальними станами, а також зміни зовнішнього неоднорідного потенціалу, що діє на систему.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, “Quantum simulations with ultracold quantum gases,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 267–276, Apr 2012.
2. F. Schäfer, T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu, and Y. Takahashi, “Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices,” *Nature Reviews Physics*, vol. 2, pp. 411–425, jul 2020.
3. C. Gross and I. Bloch, “Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices,” *Science*, vol. 357, no. 6355, pp. 995–1001, 2017.
4. D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, “Cold bosonic atoms in optical lattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pp. 3108–3111, Oct 1998.
5. M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms,” *Nature*, vol. 415, pp. 39–44, jan 2002.
6. M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), and U. Sen, “Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond,” *Advances in Physics*, vol. 56, no. 2, pp. 243–379, 2007.
7. L.-M. Duan, E. Demler, and M. D. Lukin, “Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 090402, Aug 2003.
8. L. Riegger, N. Darkwah Oppong, M. Höfer, D. R. Fernandes, I. Bloch, and S. Fölling, “Localized magnetic moments with tunable spin exchange in a gas of ultracold fermions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 143601, Apr 2018.
9. Heinz, A. and Park, A. J. and Šantić, N. and Trautmann, J. and Porsev, S. G. and Safronova, M. S. and Bloch, I. and Blatt, S., “State-Dependent Optical Lattices for the Strontium Optical Qubit,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 203201, May 2020.
10. K. Ono, Y. Amano, T. Higomoto, Y. Saito, and Y. Takahashi, “Observation of spin-exchange dynamics between itinerant and localized ^{171}Yb atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 103, p. L041303, Apr 2021.
11. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor,” *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.

12. C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, “Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 1687–1690, Aug 1995.
13. K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, Nov 1995.
14. B. DeMarco and D. S. Jin, “Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas,” *Science*, vol. 285, no. 5434, pp. 1703–1706, 1999.
15. F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon, “Quasipure Bose-Einstein Condensate Immersed in a Fermi Sea,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 080403, Aug 2001.
16. A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, “Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms,” *Science*, vol. 291, no. 5513, pp. 2570–2572, 2001.
17. T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu, and Y. Takahashi, “All-optical formation of quantum degenerate mixtures,” *Phys. Rev. A*, vol. 79, p. 021601, Feb 2009.
18. I. M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, “Quantum simulation,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 86, pp. 153–185, Mar 2014.
19. S. Fölling, F. Gerbier, A. Widera, O. Mandel, T. Gericke, and I. Bloch, “Spatial quantum noise interferometry in expanding ultracold atom clouds,” *Nature*, vol. 434, pp. 481–4, 04 2005.
20. T. Rom, T. Best, D. van Oosten, U. Schneider, S. Fölling, B. Paredes, and I. Bloch, “Free fermion antibunching in a degenerate atomic Fermi gas released from an optical lattice,” *Nature*, vol. 444, pp. 733–736, dec 2006.
21. G. K. Campbell, J. Mun, M. Boyd, P. Medley, A. E. Leanhardt, L. G. Marcassa, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, “Imaging the Mott Insulator Shells by Using Atomic Clock Shifts,” *Science*, vol. 313, pp. 649–652, aug 2006.
22. S. Fölling, A. Widera, T. Müller, F. Gerbier, and I. Bloch, “Formation of spatial shell structure in the superfluid to mott insulator transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, p. 060403, Aug 2006.
23. P. T. Ernst, S. Götze, J. S. Krauser, K. Pyka, D.-S. Lühmann, D. Pfannkuche, and K. Sengstock, “Probing superfluids in optical lattices by

- momentum-resolved Bragg spectroscopy,” *Nature Physics*, vol. 6, pp. 56–61, Jan 2010.
24. J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, and S. Kuhr, “Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator,” *Nature*, vol. 467, pp. 68–72, Sep 2010.
 25. W. Bakr, A. Peng, M. Tai, R. Ma, J. Simon, J. Gillen, S. Fölling, L. Pollet, and M. Greiner, “Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level,” *Science (New York, N.Y.)*, vol. 329, pp. 547–50, 07 2010.
 26. C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr, “Single-spin addressing in an atomic Mott insulator,” *Nature*, vol. 471, pp. 319–324, mar 2011.
 27. U. Schneider, L. Hackermüller, S. Will, T. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch, and A. Rosch, “Metallic and Insulating Phases of Repulsively Interacting Fermions in a 3D Optical Lattice,” *Science*, vol. 322, no. 5907, pp. 1520–1525, 2008.
 28. R. Jördens, N. Strohmaier, K. Günter, H. Moritz, and T. Esslinger, “A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice,” *Nature*, vol. 455, pp. 204–207, Sep 2008.
 29. M. W. Zwierlein, J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle, “Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas,” *Nature*, vol. 435, pp. 1047–1051, Jun 2005.
 30. D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, L. Tarruell, and T. Esslinger, “Short-range quantum magnetism of ultracold fermions in an optical lattice,” *Science*, vol. 340, no. 6138, pp. 1307–1310, 2013.
 31. R. A. Hart, P. M. Duarte, T.-L. Yang, X. Liu, T. Paiva, E. Khatami, R. T. Scalettar, N. Trivedi, D. A. Huse, and R. G. Hulet, “Observation of antiferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms,” *Nature*, vol. 519, pp. 211–214, Mar 2015.
 32. A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, M. F. Parsons, M. Kanász-Nagy, R. Schmidt, F. Grusdt, E. Demler, D. Greif, and M. Greiner, “A cold-atom Fermi–Hubbard antiferromagnet,” *Nature*, vol. 545, pp. 462–466, May 2017.
 33. W. Hofstetter, J. I. Cirac, P. Zoller, E. Demler, and M. D. Lukin, “High-temperature superfluidity of fermionic atoms in optical lattices,” *Phys. Rev.*

- Lett.*, vol. 89, p. 220407, Nov 2002.
34. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, “Doping a mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 78, pp. 17–85, Jan 2006.
 35. K. L. Hur and T. M. Rice, “Superconductivity close to the Mott state: From condensed-matter systems to superfluidity in optical lattices,” *Annals of Physics*, vol. 324, pp. 1452–1515, jul 2009.
 36. R. Micnas, J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz, “Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 62, pp. 113–171, Jan 1990.
 37. B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides,” *Nature*, vol. 518, pp. 179–186, Feb 2015.
 38. E. Fradkin, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, “Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 87, pp. 457–482, May 2015.
 39. C. Becker, P. Soltan-Panahi, J. Kronjäger, S. Dörscher, K. Bongs, and K. Sengstock, “Ultracold quantum gases in triangular optical lattices,” *New Journal of Physics*, vol. 12, p. 065025, jun 2010.
 40. P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke, A. Bick, W. Plenkers, G. Meineke, C. Becker, P. Windpassinger, M. Lewenstein, and K. Sengstock, “Multi-component quantum gases in spin-dependent hexagonal lattices,” *Nature Physics*, vol. 7, pp. 434–440, feb 2011.
 41. L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger, “Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice,” *Nature*, vol. 483, pp. 302–305, mar 2012.
 42. G.-B. Jo, J. Guzman, C. K. Thomas, P. Hosur, A. Vishwanath, and D. M. Stamper-Kurn, “Ultracold Atoms in a Tunable Optical Kagome Lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 045305, Jan 2012.
 43. M. Takamoto, F.-L. Hong, R. Higashi, and H. Katori, “An optical lattice clock,” *Nature*, vol. 435, pp. 321–324, May 2005.
 44. Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki, and Y. Takahashi, “Spin-Singlet Bose-Einstein Condensation of Two-Electron Atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 040404, Jul 2003.

45. A. J. Daley, M. M. Boyd, J. Ye, and P. Zoller, “Quantum computing with alkaline-earth-metal atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 170504, Oct 2008.
46. W. Yi, A. J. Daley, G. Pupillo, and P. Zoller, “State-dependent, addressable subwavelength lattices with cold atoms,” *New Journal of Physics*, vol. 10, p. 073015, jul 2008.
47. K. Shibata, S. Kato, A. Yamaguchi, S. Uetake, and Y. Takahashi, “A scalable quantum computer with ultranarrow optical transition of ultracold neutral atoms in an optical lattice,” *Applied Physics B*, vol. 97, pp. 753–758, sep 2009.
48. A. V. Gorshkov, A. M. Rey, A. J. Daley, M. M. Boyd, J. Ye, P. Zoller, and M. D. Lukin, “Alkaline-earth-metal atoms as few-qubit quantum registers,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 110503, Mar 2009.
49. M. A. Cazalilla, A. F. Ho, and M. Ueda, “Ultracold gases of ytterbium: ferromagnetism and Mott states in an SU(6) Fermi system,” *New Journal of Physics*, vol. 11, p. 103033, oct 2009.
50. M. Hermele, V. Gurarie, and A. M. Rey, “Mott insulators of ultracold fermionic alkaline earth atoms: Underconstrained magnetism and chiral spin liquid,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 135301, Sep 2009.
51. A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey, “Two-orbital SU(N) magnetism with ultracold alkaline-earth atoms,” *Nature Physics*, vol. 6, pp. 289–295, feb 2010.
52. M. Foss-Feig, M. Hermele, and A. M. Rey, “Probing the Kondo lattice model with alkaline-earth-metal atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 81, p. 051603, May 2010.
53. M. Foss-Feig, M. Hermele, V. Gurarie, and A. M. Rey, “Heavy fermions in an optical lattice,” *Phys. Rev. A*, vol. 82, p. 053624, Nov 2010.
54. M. Hermele and V. Gurarie, “Topological liquids and valence cluster states in two-dimensional SU(N) magnets,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 174441, Nov 2011.
55. M. A. Cazalilla and A. M. Rey, “Ultracold Fermi gases with emergent SU(N) symmetry,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 77, p. 124401, nov 2014.
56. F. Gerbier and J. Dalibard, “Gauge fields for ultracold atoms in optical

- superlattices,” *New Journal of Physics*, vol. 12, p. 033007, mar 2010.
57. T. Fukuhara, Y. Takasu, M. Kumakura, and Y. Takahashi, “Degenerate Fermi Gases of Ytterbium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 030401, Jan 2007.
 58. S. Kraft, F. Vogt, O. Appel, F. Riehle, and U. Sterr, “Bose-Einstein Condensation of Alkaline Earth Atoms: ^{40}Ca ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 130401, Sep 2009.
 59. S. Stellmer, M. K. Tey, B. Huang, R. Grimm, and F. Schreck, “Bose-Einstein Condensation of Strontium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 200401, Nov 2009.
 60. Y. N. M. de Escobar, P. G. Mickelson, M. Yan, B. J. DeSalvo, S. B. Nagel, and T. C. Killian, “Bose-Einstein Condensation of ^{84}Sr ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 200402, Nov 2009.
 61. B. J. DeSalvo, M. Yan, P. G. Mickelson, Y. N. Martinez de Escobar, and T. C. Killian, “Degenerate Fermi Gas of ^{87}Sr ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 030402, Jul 2010.
 62. S. Taie, Y. Takasu, S. Sugawa, R. Yamazaki, T. Tsujimoto, R. Murakami, and Y. Takahashi, “Realization of a $\text{SU}(2) \times \text{SU}(6)$ System of Fermions in a Cold Atomic Gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 190401, Nov 2010.
 63. S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, “An $\text{SU}(6)$ Mott insulator of an atomic Fermi gas realized by large-spin Pomeranchuk cooling,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 825–830, sep 2012.
 64. G. Cappellini, M. Mancini, G. Pagano, P. Lombardi, L. Livi, M. Siciliani de Cumis, P. Cancio, M. Pizzocaro, D. Calonico, F. Levi, C. Sias, J. Catani, M. Inguscio, and L. Fallani, “Direct observation of coherent interorbital spin-exchange dynamics,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 120402, Sep 2014.
 65. F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch, and S. Fölling, “Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold $\text{SU}(N)$ -symmetric fermions,” *Nat. Phys.*, vol. 10, pp. 779–784, Oct 2014.
 66. E. L. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu, and D. E. Pritchard, “Trapping of Neutral Sodium Atoms with Radiation Pressure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 59, pp. 2631–2634, Dec 1987.
 67. C. Monroe, W. Swann, H. Robinson, and C. Wieman, “Very cold trapped atoms in a vapor cell,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 1571–1574, Sep 1990.

68. J. Zachorowski, T. Pałasz, and G. Wojciech, “Magneto-optical trap for cold rubidium atoms,” *Optica Applicata*, vol. 28, p. 239, 01 1998.
69. S. G. Miranda, S. R. Muniz, G. D. Telles, L. G. Marcassa, K. Helmerson, and V. S. Bagnato, “"Dark-spot" atomic-beam slowing for on-axis loading of traps,” *Phys. Rev. A*, vol. 59, pp. 882–885, Jan 1999.
70. K. Dieckmann, R. J. C. Spreeuw, M. Weidemüller, and J. T. M. Walraven, “Two-dimensional magneto-optical trap as a source of slow atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 58, pp. 3891–3895, Nov 1998.
71. J. Schoser, A. Batär, R. Löw, V. Schweikhard, A. Grabowski, Y. B. Ovchinnikov, and T. Pfau, “Intense source of cold Rb atoms from a pure two-dimensional magneto-optical trap,” *Phys. Rev. A*, vol. 66, p. 023410, Aug 2002.
72. M. S. Santos, P. Nussenzveig, L. G. Marcassa, K. Helmerson, J. Flemming, S. C. Zilio, and V. S. Bagnato, “Simultaneous trapping of two different atomic species in a vapor-cell magneto-optical trap,” *Phys. Rev. A*, vol. 52, pp. R4340–R4343, Dec 1995.
73. J. Goldwin, S. B. Papp, B. DeMarco, and D. S. Jin, “Two-species magneto-optical trap with ^{40}K and ^{87}Rb ,” *Phys. Rev. A*, vol. 65, p. 021402, Jan 2002.
74. M.-O. Mewes, G. Ferrari, F. Schreck, A. Sinatra, and C. Salomon, “Simultaneous magneto-optical trapping of two lithium isotopes,” *Phys. Rev. A*, vol. 61, p. 011403, Dec 1999.
75. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, “Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, pp. 13–125, Jan 1996.
76. B. Schmidt, M. R. Bakhtiari, I. Titvinidze, U. Schneider, M. Snoek, and W. Hofstetter, “Dynamical arrest of ultracold lattice fermions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 075302, Feb 2013.
77. T. Qin, A. Schnell, K. Sengstock, C. Weitenberg, A. Eckardt, and W. Hofstetter, “Charge density wave and charge pump of interacting fermions in circularly shaken hexagonal optical lattices,” *Phys. Rev. A*, vol. 98, p. 033601, Sep 2018.
78. K. Sandholzer, Y. Murakami, F. Görg, J. Minguzzi, M. Messer, R. Desbuquois, M. Eckstein, P. Werner, and T. Esslinger, “Quantum Simulation Meets Nonequilibrium Dynamical Mean-Field Theory: Exploring

- the Periodically Driven, Strongly Correlated Fermi-Hubbard Model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, p. 193602, Nov 2019.
79. J. E. Hirsch and R. M. Fye, “Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, pp. 2521–2524, Jun 1986.
 80. M. Snoek, I. Titvinidze, C. Toke, K. Byczuk, and W. Hofstetter, “Antiferromagnetic order of strongly interacting fermions in a trap: real-space dynamical mean-field analysis,” *New Journal of Physics*, vol. 10, p. 093008, sep 2008.
 81. H. Metcalf and P. van der Straten, “Laser cooling and trapping,” *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 20, 05 2003.
 82. R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, “Optical dipole traps for neutral atoms,” vol. 42 of *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, pp. 95–170, Academic Press, 2000.
 83. F. Scazza, *Probing $SU(N)$ -symmetric orbital interactions with ytterbium Fermi gases in optical lattices*. PhD thesis, February 2015.
 84. C. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, 2002.
 85. L. Landau and E. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Course of Theoretical Physics, Elsevier Science, 1981.
 86. H. Feshbach, “Unified theory of nuclear reactions,” *Annals of Physics*, vol. 5, no. 4, pp. 357–390, 1958.
 87. R. Freytag, *Simultaneous magneto-optical trapping of Ytterbium and Caesium*. PhD thesis, July 2015.
 88. T. Tiecke, *Feshbach resonances in ultracold mixtures of the fermionic quantum gases ${}^6\text{Li}$ and ${}^{40}\text{K}$* . PhD thesis, December 2009.
 89. I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 80, pp. 885–964, Jul 2008.
 90. T. L. Nicholson, S. Blatt, B. J. Bloom, J. R. Williams, J. W. Thomsen, J. Ye, and P. S. Julienne, “Optical Feshbach resonances: Field-dressed theory and comparison with experiments,” *Phys. Rev. A*, vol. 92, p. 022709, Aug 2015.
 91. Y. Takasu, K. Komori, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki, and Y. Takahashi, “Photoassociation Spectroscopy of Laser-Cooled Ytterbium Atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 123202, Sep 2004.

92. S. G. Porsev and A. Derevianko, “Hyperfine quenching of the metastable $^3P_{0,2}$ states in divalent atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 69, p. 042506, Apr 2004.
93. K. Pandey, A. K. Singh, P. V. K. Kumar, M. V. Suryanarayana, and V. Natarajan, “Isotope shifts and hyperfine structure in the 555.8-nm $^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ line of Yb,” *Phys. Rev. A*, vol. 80, p. 022518, Aug 2009.
94. A. Derevianko and H. Katori, “Colloquium: Physics of optical lattice clocks,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 331–347, May 2011.
95. A. D. Ludlow, M. M. Boyd, J. Ye, E. Peik, and P. O. Schmidt, “Optical atomic clocks,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 87, pp. 637–701, Jun 2015.
96. B. J. Bloom, T. L. Nicholson, J. R. Williams, S. L. Campbell, M. Bishof, X. Zhang, W. Zhang, S. L. Bromley, and J. Ye, “An optical lattice clock with accuracy and stability at the 10^{-18} level,” *Nature*, vol. 506, pp. 71–75, jan 2014.
97. N. Hinkley, J. A. Sherman, N. B. Phillips, M. Schioppo, N. D. Lemke, K. Beloy, M. Pizzocaro, C. W. Oates, and A. D. Ludlow, “An atomic clock with 10^{-18} instability,” *Science*, vol. 341, pp. 1215–1218, sep 2013.
98. M. M. Boyd, T. Zelevinsky, A. D. Ludlow, S. Blatt, T. Zanon-Willette, S. M. Foreman, and J. Ye, “Nuclear spin effects in optical lattice clocks,” *Phys. Rev. A*, vol. 76, p. 022510, Aug 2007.
99. J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A*, vol. 276, 11 1963.
100. M. C. Gutzwiller, “Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 159–162, Mar 1963.
101. J. Kanamori, “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, pp. 275–289, 09 1963.
102. L. M. Roth, “Simple narrow-band model of ferromagnetism due to intra-atomic exchange,” *Phys. Rev.*, vol. 149, pp. 306–308, Sep 1966.
103. A. M. Oleś, “Antiferromagnetism and correlation of electrons in transition metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 28, pp. 327–339, Jul 1983.
104. S. Robaszkiewicz and B. R. Bułka, “Superconductivity in the Hubbard model with pair hopping,” *Physical Review B*, vol. 59, pp. 6430–6437, mar 1999.
105. 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.
106. “The Hubbard model at half a century,” *Nature Physics*, vol. 9, pp. 523–523, Sep 2013.
 107. W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal, “Quantum Monte Carlo simulations of solids,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 73, pp. 33–83, Jan 2001.
 108. C. Lanczos, “A Precision Approximation of the Gamma Function,” *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics Series B Numerical Analysis*, vol. 1, no. 1, pp. 86–96, 1964.
 109. F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 2005.
 110. P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. EBL-Schweitzer, World Scientific, 1999.
 111. H. Tasaki, “The hubbard model: Introduction and selected rigorous results,” 1997.
 112. E. Pavarini, E. Koch, A. Lichtenstein, and D. Vollhardt, eds., *DMFT: From Infinite Dimensions to Real Materials*, vol. 8 of *Schriften des Forschungszentrums Jülich. Reihe modeling and simulation*, (Jülich), Autumn School on Correlated Electrons, Jülich (Germany), 17 Sep 2018 - 21 Sep 2018, Forschungszentrum Jülich GmbH Zentralbibliothek, Verlag, Sep 2018.
 113. A. Georges, “Strongly Correlated Electron Materials: Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure,” in *Lectures on the Physics of Highly Correlated Electron Systems VIII* (A. Avella and F. Mancini, eds.), Proceedings of the Eighth Training Course in the Physics of Correlated Electron Systems and High-Tc Superconductors, p. 3, American Institute of Physics Conference Proceedings vol.715, 2004. 71 pages, 24 figures.
 114. W. Metzner and D. Vollhardt, “Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 62, pp. 324–327, Jan 1989.
 115. M. Caffarel and W. Krauth, “Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, pp. 1545–1548, Mar 1994.
 116. C. J. A. Polachic, *A Multiorbital DMFT Analysis of the Dynamic Hubbard Model*. PhD thesis, spring 2015.

117. X. Zhang, M. Bishof, S. L. Bromley, C. V. Kraus, M. S. Safronova, P. Zoller, A. M. Rey, and J. Ye, “Spectroscopic observation of SU(N)-symmetric interactions in Sr orbital magnetism,” *Science*, vol. 345, no. 6203, pp. 1467–1473, 2014.
118. A. Goban, R. B. Hutson, G. E. Marti, S. L. Campbell, M. A. Perlin, P. S. Julienne, J. P. D’Incao, A. M. Rey, and J. Ye, “Emergence of multi-body interactions in a fermionic lattice clock,” *Nature (London)*, vol. 563, no. 7731, pp. 369–373, 2018.
119. M. Kitagawa, K. Enomoto, K. Kasa, Y. Takahashi, R. Ciuryło, P. Naidon, and P. S. Julienne, “Two-color photoassociation spectroscopy of ytterbium atoms and the precise determinations of s -wave scattering lengths,” *Phys. Rev. A*, vol. 77, p. 012719, Jan 2008.
120. O. Bettermann, N. D. Oppong, G. Pasqualetti, L. Riegger, I. Bloch, and S. Fölling, “Clock-line photoassociation of strongly bound dimers in a magic-wavelength lattice,” 2020.
121. K. Ono, Y. Amano, T. Higomoto, Y. Saito, and Y. Takahashi, “Observation of spin-exchange dynamics between itinerant and localized ^{171}Yb atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 103, p. L041303, Apr 2021.
122. L. Riegger, N. Darkwah Oppong, M. Höfer, D. R. Fernandes, I. Bloch, and S. Fölling, “Localized magnetic moments with tunable spin exchange in a gas of ultracold fermions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 143601, Apr 2018.
123. A. Sotnikov, N. Darkwah Oppong, Y. Zambrano, and A. Cichy, “Orbital ordering of ultracold alkaline-earth atoms in optical lattices,” *Phys. Rev. Res.*, vol. 2, p. 023188, May 2020.
124. M. S. Safronova, Z. Zuhrianda, U. I. Safronova, and C. W. Clark, “Extracting transition rates from zero-polarizability spectroscopy,” *Phys. Rev. A*, vol. 92, p. 040501, Oct 2015.
125. V. Bilokon, E. Bilokon, M. C. Bañuls, A. Cichy, and A. Sotnikov, “Many-body correlations in one-dimensional optical lattices with alkaline-earth(-like) atoms,” *arXiv preprint, 2302.10854*, 2023.