

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. Кореляції в одновимірних системах з лужноземельними
та їм подібними атомами. Метод матричних множників.
англ. Correlations in one-dimensional systems with alkaline-earth-like atoms.
Matrix product states 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 В.О. _____
(особистий підпис)

Керівник д.ф.-м.н., ст. досл.

Сотніков А.Г. _____
(особистий підпис)

Рецензент к.ф.-м.н., с.н.с.

Пелетминський О.С. _____
(особистий підпис)

АНОТАЦІЯ

Роботу присвячено дослідженню багатой природи кореляцій в основному стані ультрахолодних атомів, захоплених станозалежними оптичними ґратками. Зокрема, ми розглядаємо взаємодійні фермі-гази атомів ітербію та стронцію, що дають змогу реалізувати двоорбітальну модель Габбарда з двома спіновими компонентами. Модель проаналізовано у випадку одновимірної системи з експериментально релевантною ієрархією амплітуд тунелювання та взаємодій за допомогою підходів точної діагоналізації та методу матричних множників. Крім того, нами обраховано кореляційні функції в секторі густини, спіновому та орбітальному секторах як функції змінної густини атомів в основному та метастабільному збуджених станах. Це дає змогу зробити ряд важливих висновків, що в певних діапазонах густин ці атомні системи мають сильні густинно-хвильові, феро- та антиферромагнітні, а також антифероорбітальні кореляції.

ABSTRACT

We explore the rich nature of correlations in the ground state of ultracold atoms trapped in state-dependent optical lattices. In particular, we consider interacting fermionic ytterbium or strontium atoms, realizing a two-orbital Hubbard model with two spin components. We analyze the model in one-dimensional setting with the experimentally relevant hierarchy of tunneling and interaction amplitudes by means of exact diagonalization and matrix product states approaches, and study the correlation functions in density, spin, and orbital sectors as functions of variable densities of atoms in the ground and metastable excited states. We show that in certain ranges of densities these atomic systems demonstrate strong density-wave, ferro- and antiferromagnetic, as well as antiferroorbital correlations.

ЗМІСТ

ВСТУП	6
Огляд літератури	9
РОЗДІЛ 1 Лужноземельні та їм подібні атоми в оптичних ґратках	12
1.1 Атом у пастці	12
1.2 Магнітооптичні пастки	14
1.3 Взаємодії між атомами	15
1.4 Резонанс Фешбаха	17
1.5 Лужноземельні та їм подібні атоми	18
РОЗДІЛ 2 Модель Габбарда	21
2.1 Формулювання моделі Габбарда	21
2.2 Властивості моделі Габбарда	25
2.2.1 Граничні випадки	27
2.3 Двоорбітальна модель Габбарда	29
РОЗДІЛ 3 Теоретичні підходи	33
3.1 Точна діагоналізація	33
3.2 Перетворення Йордана–Вігнера	35
3.3 Метод матричних множників	39
3.3.1 Хвильова функція як добуток матричних множників	39
3.3.2 Вимірювання	42
3.3.3 Оператори матричних множників	43
3.3.4 МРО у випадку моделі Гейзенберга зі спіном 1/2	44
3.3.5 МРО у випадку двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда	46
3.3.6 Група перенормування матриці густини	47
3.4 Перетворення Шріффера-Вольфа для двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда	49
3.4.1 Основний стан з локальними спін-триплетними парами	50
3.4.2 Канонічне перетворення	51
3.4.3 Розрахунки комутатора $[\mathcal{H}_{t_\gamma}^+, \mathcal{H}_{t_\gamma}^-]$	54
3.4.4 Основний стан з парами атомів у станах g або e на вузлі	59
РОЗДІЛ 4 Результати	64
4.1 Усереднені за спіном локальні величини	65

4.2	Спінові та орбітальні корелятори між найближчими вузлами ґратки	68
4.3	Границя сильної взаємодії при половинному заповненні ґратки	72
	ВИСНОВКИ	74
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	77

ВСТУП

До кінця XIX століття фізика, як самоузгоджена та майже завершена наука того часу, спиралася на закони класичної механіки. Будь-яке природне явище підпорядковувалося механіці Ньютона, статистиці Больцмана та електродинаміці Максвелла. Тим не менш, технологічний прогрес відкрив нові можливості для реалізації серії експериментів, результати яких виходили за межі класичної механіки. Початок XX століття – час зародження революційного підходу, здатного пояснити виявлені парадокси, – час зародження квантової механіки.

З моменту свого зародження квантова механіка пройшла величезний шлях і призвела до цілої низки значних відкриттів. Її закони підпорядковують не тільки атоми та субатомні частинки, вони лежать в основі термодинаміки, фізики твердого тіла тощо. Перші задачі квантової механіки було присвячено вивченню окремих мікроскопічних складових світу, таких як електрони, фотони та атоми. Подальші експериментальні реалізації, зокрема, відкриття надпровідності, стали поштовхом для застосування квантово-механічного підходу до вивчення конденсованих фаз речовини. Таким чином, у фокусі опинилися системи, що складаються з великої кількості взаємодіючих атомів або молекул.

Сьогодні фізика конденсованого середовища – окрема широка галузь науки. Перелік конденсованих середовищ надзвичайно великий, серед них і кристали, і квантові рідини, і спінові ланцюжки тощо. Проте через складність реальних матеріалів точний опис таких систем надзвичайно проблематичний та, як правило, можливий лише для дуже простих випадків. Звідси слідує, що основний підхід фізики конденсованих середовищ – максимальне спрощення опису системи шляхом застосування певних математичних моделей, що зберігають лише основні ступені вільності. Звичайно, що усі моделі передбачають низку апроксимацій та припущень, а отже потребують як експериментальної реалізації, так і відповідних чисельних підходів для отримання максимально точних теоретичних результатів.

Задачі фізики багатьох тіл найчастіше вирішуються шляхом квантових симуляцій, зокрема, квантового моделювання з ультрахолодними атомами в оптичних ґратках. Застосування саме таких атомів обумовлюється відмінною керованістю параметрів системи та вдосконаленими методами

вимірювання. Більш того, ультрахолодні атомні гази – засіб для реалізації різних природних явищ та режимів, недоступних в інших системах, а саме кросовер Бардіна–Купера–Шріффера до конденсату Бозе–Ейнштейна або генерація сильних ефективних магнітних полів через штучні калібрувальні поля.

Ця дипломна робота присвячена теоретичному аналізу кореляцій в одновимірних системах з лужноземельними та їм подібними атомами за допомогою двоорбітальної моделі Фермі–Габбарда з двома спіновими ступенями вільності. Мотивацією до вивчення саме цієї моделі стала її нещодавня реалізація в станозалежній ґратці [1–3], яка породила низку нових питань щодо оптимальних режимів для подальшої реалізації певних сильно корельованих явищ у нових системах ультрахолодних атомів. У широкому діапазоні заселення ґратки а також із відповідними до експерименту амплітудами тунелювання та характерними взаємодіями, наша увага сфокусована безпосередньо на дослідженні властивостей основного стану систем, що складаються з атомів ^{87}Sr , ^{171}Yb та ^{173}Yb .

Структура роботи поділена на чотири основні розділи, що включають формулювання моделі та її складові частини, відомості про теоретичні методи та результати, отримані за допомогою останніх. Спочатку ми розглянемо основні положення механіки охолоджувальних пасток та оптичних ґраток, опишемо зовнішні сили, що змушують атом охолоджуватися та взаємодіяти з іншими частинками. Крім того, більш детально зосередимося на методиці контролю низькозв'язних енергетичних станів атому, а саме резонансах Фешбаха [4], а також надамо основні властивості лужноземельних та їм подібних атомів як головних об'єктів дослідження.

За допомогою математичного апарату та низки апроксимацій, починаючи від простого припущення щодо формування статичної ґратки іонами твердого тіла, ми отримаємо гамільтоніан двоорбітальної моделі Фермі–Габбарда. Крім цього, розглянемо граничні випадки моделі, її симетрії, що обумовлюють збереження певних величин, та проілюструємо усі можливі у системі взаємодії.

Особлива увага приділяється застосованим у ході роботи методам, як аналітичним, так і чисельним. Обрана нами модель досліджувалася за допомогою точної діагоналізації та методу матричних множників, що тісно

пов'язаний із одним із найбільш ефективних алгоритмів сьогодення – алгоритмом групи перенормування матриці густини. Ми детально розглянемо концепції обох підходів, обговоримо їх переваги та недоліки, а також деякі особливості, на які слід звернути увагу для спрощення реалізації алгоритмів. Для методу матричних множників, на зразку простої моделі Гейзенберга, ми пояснимо принцип побудови гамільтоніана системи у вигляді добутку матриць та наведемо відповідне розкладання для двоорбітальної моделі Фермі–Габбарда із чотирма ступенями вільності.

Результати та висновки роботи сформульовано в останньому розділі, поділеному за змістом на три окремі частини. Отримавши параметри Габбарда та варіюючи кількість атомів у ґратці, ми розрахуємо усереднені за спіном локальні величини, зокрема, подвійну заселеність вузлів та модуляцію хвилі густини. В межах аналізу ми визначимо, за якого саме відношення густин атомів система проявляє те чи інше впорядкування. Для трьох згаданих вище ізотопів (^{87}Sr , ^{171}Yb та ^{173}Yb) розглянемо спінові та орбітальні корелятори між найближчими вузлами ґратки. Спираючись на отримані результати, за умови режиму половинного заповнення системи та границі сильної взаємодії, ми виконаємо перетворення Шріффера–Вольфа [5], щоб отримати ефективну модель системи.

Огляд літератури

Сьогодні ультрахолодні квантові гази – потужна платформа для моделювання корельованих систем багатьох частинок [6]. Різноманіття реалізованих багаточастинкових квантових станів починається від ізоляторів Мотта [7–9] і ферміонних надплинних рідин [10] до антиферомагнітних квантових магнітів [11–13]. Контроль взаємодії атомів, правильний вибір геометрії ґратки та вимірності досліджуваної системи були невідмінними складовими вдалих експериментів, більшість яких проводилася із атомами лужних металів.

Лужноземельні та їм подібні атоми (AEL, атоми ітербію, стронцію, кальцію тощо) привернули до себе увагу відносно нещодавно. Інтерес до таких атомів у якості “інструменту” для вивчення фізики багатьох тіл з’явився як наслідок реалізації вироджених бозонних та ферміонних газів AEL, про що було повідомлено в роботах груп з університетів Кіото [14, 15], Інсбрука [16], Райса [17] та фізико-технічного інституту Брауншвейга [18]. Більш багата електронна структура лужноземельних та їм подібних атомів обумовлена наявністю двох валентних електронів на зовнішній оболонці. Саме ця особливість широко використовувалася для точних вимірювань з так званим годинниковим переходом [19, 20], а також у квантовій інформації та квантовій обробці [21]. Для посилення контролю квантових станів було розроблено серію механізмів, а саме оптичний резонанс Фешбаха [22–25], високоточну спектроскопію [26, 27], фотоасоціацію [28–30] тощо. Ці експериментальні розробки відкрили нове поле для дослідження квантових моделей, багато з яких не можуть бути так легко реалізовані в системах з атомами лужних металів.

Наявність у ферміонних AEL атомів $SU(N)$ симетрії – що є ще однією характерною особливістю – була виявлена за допомогою пригніченого процесу ядерної спінової релаксації в основному стані атомів ^{87}Sr [31]. У [31] було виміряно верхню межу коефіцієнта непружної спінової релаксації для різних спінових конфігурацій. Знижуючи температуру шляхом збільшення кількості спінових станів, існування $SU(N)$ симетрії також спостерігалося в $SU(N)$ ізоляторі Мотта [32]. Використовуючи переваги високоточного годинникового лазера, безпосереднє спостереження $SU(N)$ симетрії була успішно проведена за допомогою тактової спектроскопії на двоорбітальних

атомах ^{87}Sr [26].

Узагальнену модель Габбарда із $SU(N)$ симетрією початково було запропоновано для дослідження високоспінових ефектів у оксидах перехідних металів [33]. У [32] для випадку тривимірної кубічної оптичної ґратки була експериментально реалізована $SU(6)$ модель Габбарда з атомами ^{173}Yb в основному стані 1S_0 . Спостерігаючи за подвійно заселеними вузлами ґратки, був досягнутий $SU(6)$ ізолятор Мотта. Як результат, було встановлено, що температура $SU(6)$ ізолятора в 2-3 рази менша, ніж у системі з $SU(2)$ симетрією.

$SU(N)$ симетрія ферміонних лужноземельних та їм подібних атомів може бути додатково збагачена орбітальними ступенями вільності (наприклад, стани годинника 1S_0 і 3P_0) [34, 35]. Таке “розширення” дає змогу досліджувати фундаментальні орбітальні моделі оксидів перехідних металів і важких ферміонних сполук. $SU(N)$ спін-орбітальну модель експериментально реалізовано на атомах Sr та Yb. Крім того, на атомах ^{87}Sr [26] було досліджено нерівноважний двоорбітальний магнетизм за допомогою спектроскопії Рамзея та визначено довжини розсіювання для обох орбіталей. Міжорбітальні спін-обмінні взаємодії було отримано в квантово виродженому режимі атомів ^{173}Yb [36, 37].

У 1975 році було запропоновано використання лазерного світла для охолодження атомів [38], а трохи пізніше було заявлено про першу зупинку атомного пучка за допомогою лазера [39], створення оптичної пастки [40] та магніто-оптичної пастки (МОП), за допомогою якої реалізується захоплення та утримання атомів. Перша демонстрація МОП відбулася на атомному промені натрію, який був спочатку сповільнений лазерним випромінюванням з перебудовою частоти. ”За створення методів охолодження й утримання атомів лазерним променем” у 1997 році була присуджена Нобелівська премія [41].

Теоретичний підхід розв’язання задач фізики квантових систем багатьох частинок потребує сучасних наближених алгоритмів, здатних охопити якомога більше ступенів вільності. За останні десятиліття розвинулося нове покоління непертурбативних методів чисельного аналізу. Серед них тензорні мережеві методи [42–47], що забезпечують ефективний опис квантових сильно корельованих станів багатьох тіл на основі їх властивостей заплута-

ності. Одним із прикладів тензорних мереж є метод матричних множників [48–50]. Підходи з використанням MPS лежать в основі ефективного алгоритму групи перенормування матриці густини (DMRG) [43, 51], сучасного методу для чисельного квазіточного розв’язання сильнокорельованих одновимірних задач, що мінімізує енергію за набором матричних множників. Окрім застосування у фізиці багатьох тіл, тензорні мережі також можна використовувати для вивчення багатьох фундаментальних результатів квантової інформації.

РОЗДІЛ 1

Лужноземельні та їм подібні атоми в оптичних ґратках

1.1 Атом у пастці

В електромагнітному полі частинка із зарядом q та швидкістю \mathbf{v} знаходиться під дією електромагнітної сили

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

де \mathbf{E} та \mathbf{B} позначають електричне та магнітне поля відповідно. Проте атом, як нейтральна частинка, має нульовий заряд $q = 0$, а отже \mathbf{F} дорівнює нулю. Для нейтрального атому перший ненульовий внесок дає дипольний момент, який можна зіндукувати за допомогою змінного поля (досить часто використовується поле оптичного діапазону) із частотою близькою до резонансної [52]. При взаємодії зі світлом атом поглинає квант світла та збуджується. Повернення атому до основного стану супроводжується або спонтанним, або вимушеним випромінюванням. Розглянемо оптичні сили, що діють на атом під дією світла.

Радіаційні оптичні сили. В результаті поглинання кванта, атом і світловий промінь обмінюються імпульсами із силою рівною

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

Коефіцієнт збудження атомів γ_p залежить від різниці між частотою атомного резонансу та частотою лазера. У разі невисокої інтенсивності світла повернення атома до основного стану може відбуватися за допомогою спонтанного випромінювання. У цьому випадку випромінене світло з імпульсом $\hbar\mathbf{k}$ рухається у випадковому напрямі, тобто середній імпульс обміну дорівнює нулю. Вимушене випромінювання, яке присутнє за умови високої інтенсивності світла, характеризується протилежними напрямками поглиненого та випромінюваного світла. А отже загальний переданий імпульс також дорівнює нулю.

Дипольні оптичні сили. Для світлових пучків з різними \mathbf{k} -векторами, наприклад зустрічних пучків, вимушене випромінювання забезпечує ненульовий переданий імпульс, оскільки поглинене світло від одного променя

випромінюється в інший. Відбувається зсув рівнів атомної енергії, як наслідок, виникає потенціал атому.

Надамо більш детальне пояснення. Коли на атом діє лазерне світло [53], осцилююче електричне поле \mathbf{E} індукує дипольний момент \mathbf{d}

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

де $\alpha(\omega)$ – це комплексна поляризованість із частотою ω . Взаємодія індукованого диполя з електричним полем створює наступний потенціал

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

Гradient потенціалу атома породжує силу

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

із $I \propto |\mathbf{E}|^2$.

Визначимо величину розладження як $\Delta \equiv \omega - \omega_r$, тобто різницю між частотою лазера ω та резонансною частотою ω_r . Зазвичай ця різниця досить мала і $|\Delta| \ll \omega_r$. Враховуючи вище сказане, потенціал взаємодії набуває вигляду

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

Γ – коефіцієнт спонтанного розпаду збудженого рівня або коефіцієнт загасання. З рівняння (1.6) можна побачити, що у випадку $\Delta > 0$ (червоне розладжене світло) потенціал взаємодії є негативним, тобто притягальним, тоді як для $\Delta < 0$ (синє розладжене світло) він позитивний, а отже відштовхувальний. У першому випадку атоми знаходяться в мінімумах потенціалів, у другому – атоми відштовхуються максимумами інтенсивності. Два зустрічних лазерних промені з однаковою частотою та інтенсивністю разом із осцилюючим електричним полем $E(z) = E_0 \sin(kz) \cos(\omega t - \theta)$ створюють одновимірний періодичний потенціал ґратки. Розрахувавши середнє значення за часом, отримуємо:

$$V(z) = V_0 \sin^2(kz), \quad (1.7)$$

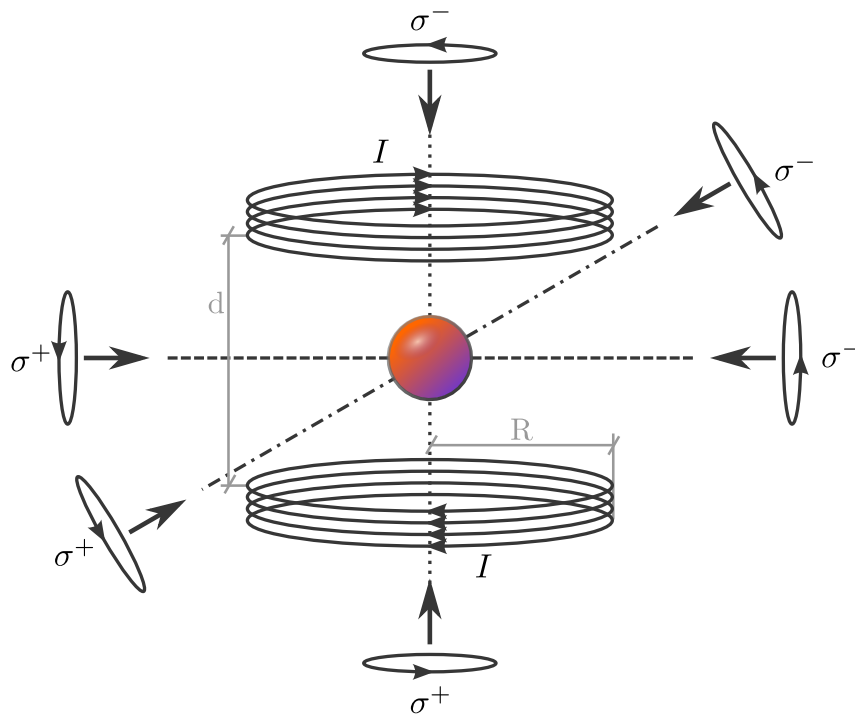


Рис. 1.1: Схема магнітооптичної пастки: пунктирні лінії – лазерні промені з позначеними поляризаціями, кола – котушки, що генерують магнітне поле.

z – напрямок, вздовж якого орієнтована вісь променя. Глибина ґратки V_0 зазвичай задають в одиницях енергії віддачі атому $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$, де $k = 2\pi/\lambda$ – хвильовий вектор. Для багатовимірного випадку потенціал можна записати наступним чином:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d V_{0,i} \sin^2(k_i x_i), \quad (1.8)$$

де d – просторова вимірність ґратки.

1.2 Магнітооптичні пастки

Магнітооптичні пастки (МОП) є одним із найпопулярніших засобів одночасного охолодження та захоплення атомів. Для тривимірного випадку неоднорідне магнітне поле разом із шістьма лазерними променями створює силу, яка охолоджує атоми та змушує їх залишатися в центрі пастки (див. Рис. 1.1).

Для створення магнітного поля потрібні дві магнітні котушки радіусом R , розташовані на відстані d одна від одної так, що $d = R$ [54]. Оскільки струм I проходить через них у протилежних напрямках, магнітне поле між

двома котушками на лінії центрів відсутнє.

Три пари зустрічних лазерних променів напрямлені вздовж кожної з тривимірних осей і перетинаються в центрі пастки. Саме така конфігурація не дозволяє атомам покинути центр МОП. У загальному випадку не виключена взаємодія між атомами і шістьма лазерними променями, проте конфігурація пастки є такою, що основне розсіювання відбувається лише за допомогою променів, які штовхають атом до центру. Як показано на Рис. 1.1, лазери, що діють вздовж однієї осі, є протилежно поляризованими. Частоти, на яких працюють лазери, обираються трохи нижчими, ніж частота атомного переходу. Різниця в значеннях змушує атоми використовувати свою кінетичну енергію для компенсації нестачі збудження. Охолодження атомів відбувається за допомогою багаторазового обміну імпульсом між фотонами та атомами.

1.3 Взаємодії між атомами

Низькоенергетичні взаємодії між двома частинками можна описати за допомогою теорії розсіювання [55]. У системі центра мас зі зведеною масою $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ (m_1 – маса однієї частинки та m_2 – маса іншої), хвильова функція може бути записана як сума плоскої e^{ikz} та розсіяної хвиль, а саме

$$\psi = e^{ikz} + \psi_{sc}(\mathbf{r}). \quad (1.9)$$

Вище ми вважаємо, що вісь z задає напрям відносної швидкості до розсіювання. Крім того, при великих r функція $\psi_{sc}(\mathbf{r})$ представляє собою сферичну хвилю $f(\mathbf{k})e^{ikr}/r$ з хвильовим вектором \mathbf{k} і амплітудою розсіювання $f(\mathbf{k})$. Припускаючи, що потенціал має сферичну симетрію, можемо представити хвильову функцію у наступний спосіб:

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta)e^{ikr}/r. \quad (1.10)$$

У виразі (1.10) величина θ позначає кут між напрямом відносного імпульсу до і після розсіювання. Кожному стану відповідає енергія

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.11)$$

У разі низької E розсіювання може розглядатися як s -хвильове. У цьому випадку амплітуда розсіювання $f(\theta)$ визначається довжиною розсіювання a , $f(\theta) \approx -a$. Додатні значення довжини розсіювання ($a > 0$) відповідають взаємодії відштовхування, а від'ємні ($a < 0$) – взаємодії тяжіння.

За визначенням диференціальний ефективний переріз

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (1.12)$$

де $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$. Осьова симетрія хвильової функції виникає з припущення щодо сферичної симетрії потенціалу. Отже, застосовуючи розділення змінних, отримуємо ψ

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r), \quad (1.13)$$

де $R_{kl}(r)$ – радіальна хвильова функція, а $P_l(\cos \theta)$ – поліноми Лежандра. Після необхідних математичних операцій амплітуда розсіювання набуває вигляду

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{i2\delta_l} - 1)P_l(\cos \theta), \quad (1.14)$$

де δ_l позначає фазові зсуви. Отже, вираз для повного перерізу σ :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (1.15)$$

При $k \rightarrow 0$ фазові зсуви досить малі. Це призводить до того, що найбільший вплив має доданок з $l = 0$, і амплітуда розсіювання набуває спрощеного вигляду $f = \delta_0/k$. Таким чином, можна отримати співвідношення для повного поперечного перерізу

$$\sigma = 4\pi a^2. \quad (1.16)$$

Звернемо увагу, що при низьких енергіях з рівняння (1.16) можна побачити, що описати розсіювання атомів можна лише за допомогою параметра a [56]. Також варто зазначити, що для двох однакових ферміонів $\sigma = 0$, що пов'язано з принципом заборони Паулі.

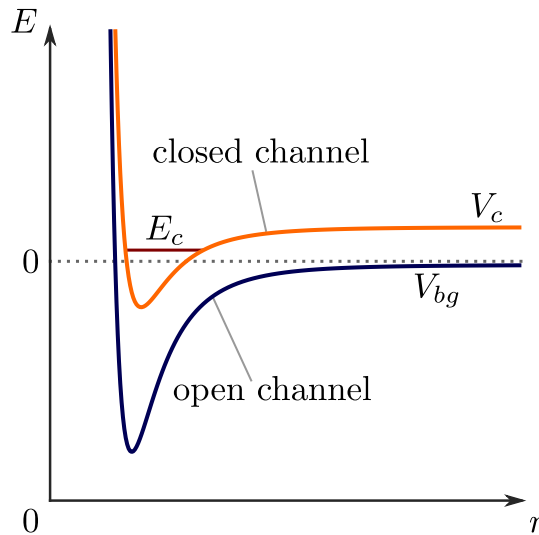


Рис. 1.2: Ілюстрація двоканальної моделі, в якій можлива реалізація резонанса Фешбаха. Пара атомів зіштовхується в енергетичному відкритому каналі V_{bg} . Утворена молекула перебуває в енергетичному закритому каналі V з енергією зв'язку E_c .

1.4 Резонанс Фешбаха

Короткодійні взаємодії між атомами можна контролювати за допомогою резонансів Фешбаха [4]. Для початку розглянемо дві потенціальні криві $V_{bg}(r)$ і $V_c(r)$ (див. Рис. 1.2). Перша відповідає фоновому потенціалу, тобто описує зв'язок між двома вільними атомами і являє собою енергетично відкритий канал (вхідний канал) [57]. Друга позначає закритий канал, який, у свою чергу, служить для підтримки низькозв'язаних енергетичних станів, близьких до відкритого каналу.

Резонанс Фешбаха виникає, коли зв'язаний молекулярний стан майже дорівнює стану розсіювання у вхідному каналі. Отже, для змішування цим двом каналам достатньо навіть слабкого зв'язку. Управління різницею енергій між каналами відбувається за допомогою магнітного поля, а відповідний резонанс називають магнітним резонансом Фешбаха. В свою чергу оптичний резонанс Фешбаха реалізується за допомогою оптичних методів.

Враховуючи тільки один закритий канал, довжину розсіювання можна представити у вигляді суми довжини розсіювання a_{bg} для відкритого каналу та довжини розсіювання $a_r(B)$, створеної магнітним полем:

$$a(B) = a_{bg} + a_r(B). \quad (1.17)$$

Загалом довжина s -хвильового розсіювання при магнітному резонансі Фешбаха задають виразом:

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (1.18)$$

Величина ΔB визначає ширину резонанса, а B_0 – резонансне значення, при якому $a \rightarrow \pm\infty$.

Для атомів із нульовим орбітальним моментом ($J = 0$), наприклад, для лужноземельних та їм подібних атомів, метод магнітного резонансу Фешбаха не застосовують. Проте, незважаючи на деякі недоліки, обумовлені спонтанним випромінюванням, використовується оптичний резонанс Фешбаха [58].

1.5 Лужноземельні та їм подібні атоми

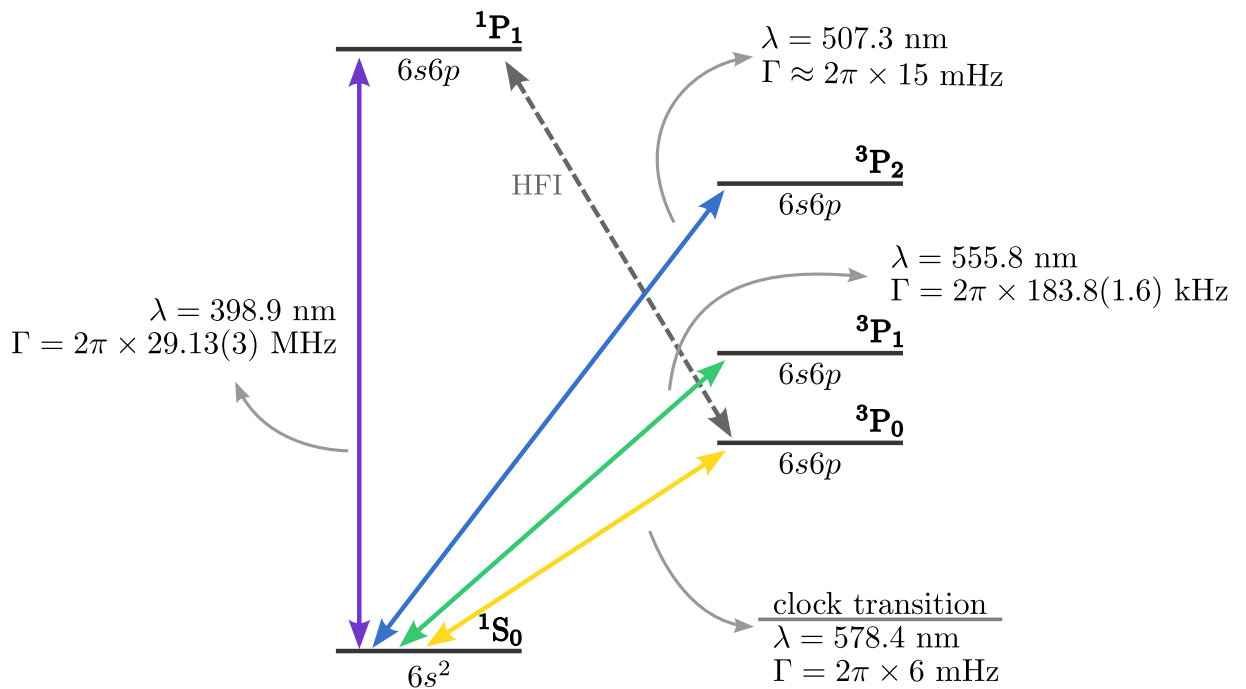


Рис. 1.3: Часткова діаграма (не в масштабі) енергетичних рівнів ^{173}Yb . Стрілками відображені можливі оптичні переходи з відповідними довжинами хвиль λ і коефіцієнтами розпаду Γ . Надтонка взаємодія відмічена пунктирною стрілкою. Усі значення λ та Γ взято з: [28] ($1S_0 \rightarrow 1P_1$), [59] ($1S_0 \rightarrow 3P_2$, $1S_0 \rightarrow 3P_0$), [60] ($1S_0 \rightarrow 3P_1$).

Оскільки ця робота присвячена вивченню систем, що складаються з

розріджених газів лужноземельних та їм подібних атомів, нижче ми наведемо деяку інформацію щодо їх основних властивостей. Група об'єднує лужноземельні елементи (Be, Mg, Ca, Sr, Ba і Ra), елементи перехідних металів з d -блоку (Zn, Cd, Hg) і f -блоку (Yb, No). Усі елементи, перелічені вище, мають подібну структуру – повністю заповнені внутрішні оболонки та зовнішню s -оболонку. Подібно до атома гелію, енергетичний спектр атомів поділяють на спін-синглетний ($S = 0$) і спін-триплетний ($S = 1$). Оскільки в дипольному наближенні переходи типу спін-фліп ($\Delta S \neq 0$) заборонені, переходи між згаданими станами дуже вузькі [61]. Крім того, однією з особливостей досліджуваних нами атомів (що відрізняє їх від лужних), є те, що всі оптичні переходи відбуваються на довжинах хвиль у видимому діапазоні електромагнітного спектра (див. Рис. 1.3).

Наявність довгоіснуючих метастабільних збуджених станів, таких як 3P_0 та 3P_2 , робить лужноземельні та їм подібні атоми унікальними кандидатами для реалізації різних моделей міжорбітальних взаємодій. Переходи між збудженими станами та основним станом 1S_0 є надвузькими, оскільки вони в 10^8 разів вузьчі за звичайні оптичні. Ці ультравузькі переходи, зокрема $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$, вважаються високоефективними оптичними стандартами частоти [19, 20, 62, 63].

Як основний стан, так і збуджений стан 3P_0 мають нульовий орбітальний момент ($J = 0$), а отже перехід між ними заборонений. Однак надтонка взаємодія (HFI), яка є типовою для ферміонних ізотопів з ненульовим ядерним спіном I , змішує стани з однаковим повним атомним орбітальним моментом F . Тому чистий стан 3P_0 змішується разом із станами 3P_1 , 3P_2 і 1P_1 :

$$|^3P_0\rangle = |^3P_0^0\rangle + \alpha_0|^3P_1\rangle + \beta_0|^1P_1\rangle + \gamma_0|^3P_2^0\rangle. \quad (1.19)$$

Коефіцієнти α_0 , β_0 , та γ_0 називають коефіцієнтами змішування HFI і більш детально розглядаються в [64]. У результаті, таке змішування уможливило перехід $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$.

Оскільки лужноземельні та їм подібні атоми мають ненульовий ядерний спін I і нульовий кутовий момент J , їх повний кутовий момент F визначається як $F = |\mathbf{J} + \mathbf{I}| = I$, а ядерні та електронні ступені вільності сильно роз'єднані. Така особливість породжує $SU(N)$ -симетрію взаємодій (Рис. 1.4). Наприклад, взаємодійний газ атомів ^{87}Sr з $I = 9/2$ може мати

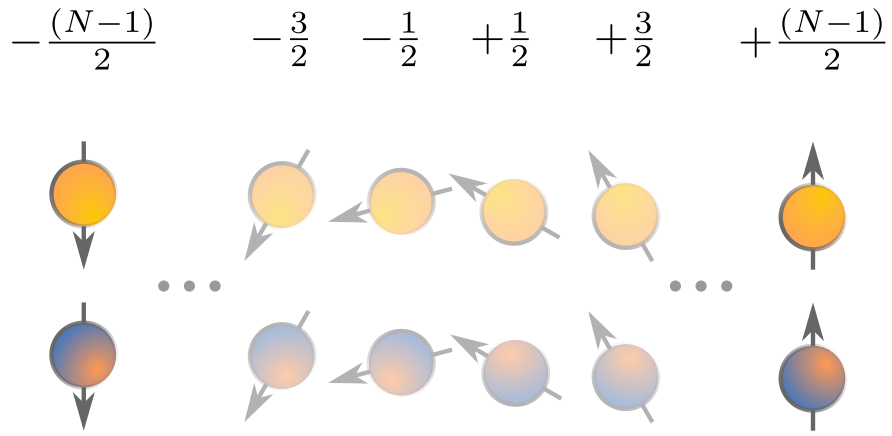


Рис. 1.4: Графічне представлення спінових та орбітальних ступенів вольності лужноземельних та їм подібних атомів з $SU(N)$ -симетрією

симетрію $SU(10)$ в якості найвищої. У цій роботі розглядаються атомні системи з симетрією $SU(2)$ у спіновому секторі, тобто відокремлюються дві компоненти з певними проєкціями спіну ядра.

РОЗДІЛ 2

Модель Габбарда

Модель Габбарда відіграє важливу роль у сучасній фізиці, особливо у вивченні сильних електронних кореляцій у теоретичній фізиці конденсованого стану. У 1963 році, незалежно один від одного, модель запропонували Дж. Габбард, М. Гуцвіллер і Й. Канаморі [65–67] для пояснення електронних кореляцій у вузьких енергетичних зонах. Хоча модель була введена для вивчення «мандрівного» ферромагнетизму в перехідних металах, сьогодні вона охоплює різноманітні фази та режими [68]. Серед них ферромагнетизм [69], антиферромагнетизм [70], хвилі зарядової густини [71], надпровідність [72], топологічно впорядковані фази та інші.

Проста, але все ж таки нетривіальна, модель Габбарда враховує дві конкуруючі сили, які впливають на електрони: відштовхувальна кулонівська взаємодія U і сила, яка змушує електрони стрибати до найближчих атомів з амплітудою t . Розв'язати модель можна у двох граничних випадках – у разі відсутності кулонівської взаємодії, $U = 0$, або відсутності тунелювання $t = 0$. Перший випадок представляє атомну границю, тоді як другий може бути описаний моделлю сильного зв'язку.

Незважаючи на простоту, точний розв'язок моделі Габбарда можна отримати лише для одновимірної однозонної моделі. Інші точні чисельні методи, наприклад точна діагоналізація, є дуже обмеженими через складність обчислень. Ця проблема стала поштовхом для створення ряду наближених методів для роботи з експоненціально зростаючим гільбертовим простором: метод Монте-Карло [73], теорія динамічного середнього поля [74], алгоритм Ланцоша [75] тощо.

2.1 Формулювання моделі Габбарда

Спираючись на велику різницю мас іонів та електронів, припустимо, що йони створюють статичну ґратку, а електрони – динаміку системи. В такому випадку система, що складається з N електронів, може бути описана гамільтоніаном

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

де $V_{ion}(\mathbf{r})$ – періодичний потенціал іонів і $V_C(\mathbf{r})$ – кулонівська сила відштовхування [76]. Застосуємо наближення середнього поля та визначимо допоміжний періодичний потенціал $V_a(\mathbf{r})$, період якого збігається з періодом потенціалу іонів. Тож рівняння (2.1) можна переписати наступним чином:

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

Скориставшись апроксимацією середнього поля, знехтуємо другим членом гамільтоніана та застосуємо вторинне квантування. Оскільки усі потенціали періодичні, для зручності запишемо хвильову функцію через функції Блоха. Для цього власні стани одночастинкового гамільтоніана

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

необхідно представити як

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

Вище плоска хвиля $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ модулюється періодичною функцією $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Період $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ збігається з періодом ґратки. Індекс α позначає зону, а \mathbf{k} – вектор імпульсу кристала.

Надалі можна ввести функції Ваньє

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

де \mathbf{R}_i позначає вектор ґратки на вузлі i , N_{ion} – число іонів. Головною перевагою цього кроку є перехід до повного набору ортогональних функцій. Таким чином, за допомогою оберненого перетворення Фур'є отримаємо ста-

ни Блоха у термінах функцій Ваньє:

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

З цього моменту ми можемо представити основні оператори методу вторинного квантування. За визначенням оператор $c_{\alpha\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$ створює частинку зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, тоді як оператор $c_{\alpha\mathbf{k},\sigma}$ зменшує кількість електронів на одиницю. $c_{\alpha\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$ та $c_{\alpha\mathbf{k},\sigma}$ називаються операторами народження та знищення відповідно. Згідно з перетвореннями Фур'є:

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

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

Нагадаємо основні властивості $\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger}$ і $\hat{c}_{\alpha i,\sigma}$. По-перше, дія добутку $\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha i,\sigma}$ на хвильову функцію не змінює кількість електронів у системі, а саме $\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha i,\sigma} = \hat{n}_{i,\sigma}$, де $\hat{n}_{i,\sigma}$ – локальний оператор густини, який діє на вузлі i . У той же час зворотна комбінація $\hat{c}_{\alpha i,\sigma} \hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger} = 1 - \hat{n}_{i,\sigma}$. Це призводить до наступного антикомутаційного співвідношення:

$$\{\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha i,\sigma}\} = 1. \quad (2.9)$$

Або у загальному випадку:

$$\{\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha j,\sigma'}\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (2.10)$$

δ_{ij} та $\delta_{\sigma\sigma'}$ – символи Кронекера. У свою чергу:

$$\{\hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha j,\sigma'}^{\dagger}\} = \{\hat{c}_{\alpha i,\sigma}, \hat{c}_{\alpha j,\sigma'}\} = 0. \quad (2.11)$$

Повертаючись до (2.6) та використовуючи математичний апарат, описаний вище, можна ввести поняття польового оператора [56]:

$$\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \psi_{\alpha\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{\alpha\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} = \sum_{\alpha i} w_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i,\sigma}^{\dagger}; \quad (2.12)$$

$$\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha i} w_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}. \quad (2.13)$$

Оператор $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ створює частинку зі спіном σ на відстані \mathbf{r} , а $\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r})$ знищує ту саму частинку.

За допомогою (2.12) та (2.13) вираз для гамільтоніану (2.2) можна спростити:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_\sigma \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\mathcal{H}}_1 \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \sum_{\sigma, \alpha, i, j} \int w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_1 w_\beta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\beta j, \sigma} d\mathbf{r} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \\ i, j, m, n, \\ \sigma, \sigma'}} \int \int w^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger w^\beta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\beta j, \sigma'}^\dagger U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &\times w_\gamma(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) \hat{c}_{\gamma m, \sigma'} w_\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \hat{c}_{\delta n, \sigma} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Або у ще більш компактній формі

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

де матричні елементи $t_{ij}^{\alpha\beta}$ та $U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ дорівнюють

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = \int w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{\mathcal{H}}_1 w_\beta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}; \quad (2.16)$$

$$U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int \int w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_\beta^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_\gamma(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) w_\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (2.17)$$

Застосуємо деякі наближення до рівняння (2.15). Якщо поверхня Фермі розташована в одній зоні провідності, багатоорбітальна модель Габбарда перетворюється на однозонну модель і

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, i, j} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_i \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma'} \hat{c}_{i, \sigma}. \quad (2.18)$$

Оскільки $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, тоді

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, i, j} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}. \quad (2.19)$$

Інше поширене спрощення рівняння (2.19) походить від наближення моделі сильного зв'язку. Це означає, що функції Ваньє сильно локалізовані навколо \mathbf{R}_i , а отже можливі лише ті стрибки, що відбуваються між сусідніми вузлами

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma, i} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1, \sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}. \quad (2.20)$$

Враховуючи, що тунелювання можливе в обох напрямках, запишемо

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma, i} \left(\hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1, \sigma} + \hat{c}_{i+1, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}. \quad (2.21)$$

Отриманий гамільтоніан є найпоширенішим способом запису одноорбітальної моделі Фермі-Габбарда з відштовхуючою кулонівською взаємодією U та амплітудою тунелювання t .

2.2 Властивості моделі Габбарда

Визначимо базис моделі Габбарда. Існує чотири варіанти заселення вузла i . Усі вони зазначені в Табл. 1. Отже, розмірність гільбертового простору для системи з L вузлами дорівнює 4^L .

$ 0\rangle$	$ \uparrow\rangle$	$ \downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$
порожній вузол	заселеність \uparrow -електроном	заселеність \downarrow -електроном	подвійна заселеність
$ 0\rangle_i$	$\hat{c}_{i, \uparrow}^\dagger 0\rangle_i$	$\hat{c}_{i, \downarrow}^\dagger 0\rangle_i$	$\hat{c}_{i, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{i, \downarrow}^\dagger 0\rangle_i$

Табл. 1: Базисні стани одноорбітальної моделі Фермі-Габбарда.

Дотримуючись позначень з Табл. 1, довільний стан, що складається з N електронів, визначається ланцюжком N операторів народження

$$|\mathbf{i}, \boldsymbol{\sigma}\rangle = \hat{c}_{i_N, \sigma_N}^\dagger \hat{c}_{i_{N-1}, \sigma_{N-1}}^\dagger \cdots \hat{c}_{i_2, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{i_1, \sigma_1}^\dagger |0\rangle, \quad (2.22)$$

де $\mathbf{i} = \{i_1, i_2, \dots, i_{N-1}, i_N\}$ і $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N-1}, \sigma_N\}$, i_s – позиція s -го електрона. Крім того, оскільки система підкоряється принципу Паулі, вузол i не може бути заселено двома електронами з однаковим спіном σ . У результаті $(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger)^2 = 0$.

Для обчислення кількості частинок на одному вузлі, можна визначити оператор числа частинок для електронів зі спіном $\sigma = \uparrow$,

$$\hat{N}_\uparrow = \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i,\uparrow}, \quad (2.23)$$

та зі спіном $\sigma = \downarrow$,

$$\hat{N}_\downarrow = \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (2.24)$$

Звідси маємо, що $\hat{N} = \hat{N}_\uparrow + \hat{N}_\downarrow$, де \hat{N} – оператор загального числа частинок. Для $\hat{n}_{i,\sigma}$ в термінах операторів народження та знищення справедливі такі співвідношення: $[\hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger] = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger$ та $[\hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}] = -\delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{j,\sigma'}$. Виконавши підсумовування за вузлами, отримуємо

$$[\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger, \quad [\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{j,\sigma'}] = -\delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{j,\sigma'}. \quad (2.25)$$

Згідно з комутаційною властивістю, а саме $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$:

$$[\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{i,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'}] = [\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{i,\sigma'}^\dagger] \hat{c}_{j,\sigma'} + \hat{c}_{i,\sigma'}^\dagger [\hat{N}_\sigma, \hat{c}_{j,\sigma'}] = 0. \quad (2.26)$$

Таким чином, повний гамільтоніан моделі Габбарда комутує з оператором числа частинок \hat{N}_σ . Оскільки оператор загального числа частинок є сумою \hat{N}_\uparrow і \hat{N}_\downarrow , можна отримати

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{N}] = 0. \quad (2.27)$$

Отже, у системі зберігається загальна кількість частинок.

Враховуючи усе вище сказане, неважко перевірити, що

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}^z] = 0, \quad (2.28)$$

де за визначенням $\hat{S}^z = \frac{1}{2} (\hat{N}_\uparrow - \hat{N}_\downarrow)$.

На ґратці з двома підґратками (ґратку розділено на дві підґратки A і B

так, що кожен вузол A оточений вузлами B) для половинного заповнення відбувається збереження ще однієї симетрії, а саме симетрії частинка-дірка. У цьому випадку справедливе наступне перетворення:

$$\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \rightarrow \eta_i \hat{c}_{i,\sigma}, \quad \hat{c}_{i,\sigma} \rightarrow \eta_i \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \quad (2.29)$$

де

$$\eta_i = \begin{cases} 1, & i \in A; \\ -1, & i \in B. \end{cases} \quad (2.30)$$

Варто зазначити, що загальна форма моделі Габбарда такого типу симетрії не проявляє, оскільки перетворення (2.29) змінює доданок, що відповідає за тунелювання.

2.2.1 Граничні випадки

Наприкінці розділу розглянемо два граничні випадки одноорбітальної моделі Габбарда.

Невзаємодійна система

У випадку, коли кулонівська взаємодія відсутня, а саме $U = 0$, модель Габбарда (2.20) має вигляд

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -t \sum_{\sigma,i} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \hat{c}_{i+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right). \quad (2.31)$$

Наразі можна перевизначити оператори народження та знищення

$$\begin{aligned} \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{\frac{2\pi i}{L} k R_j} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger; \\ \hat{c}_{k,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{-\frac{2\pi i}{L} R_j} \hat{c}_{j,\sigma}; \end{aligned} \quad (2.32)$$

а потім виконати обернені перетворення Фур'є

$$\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-\frac{2\pi i}{L} R_j k} \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger; \quad (2.33)$$

$$\hat{c}_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{\frac{2\pi i}{L} R_j k} \hat{c}_{k,\sigma}, \quad \text{де } j = 1, 2, \dots, L-1, L$$

і замінити $\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma}$ на описані вище співвідношення. В результаті отримаємо гамільтоніан системи

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_k \sum_\sigma \epsilon(k) \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma}, \quad (2.34)$$

де

$$\epsilon(k) = -t \sum_i e^{ik(R_i - R_{i+1})} + e^{ik(R_{i+1} - R_i)} = -2t \sum_i \cos(ka) \quad (2.35)$$

з $a = R_i - R_{i+1}$.

Безстрибкова система

За границі $t \rightarrow 0$ енергетичний спектр системи є сильно виродженим. Наприклад, якщо кількість електронів менша за кількість вузлів ґратки, кратність виродження сягає $2^N C_L^N$, де 2^N обумовлене спіновими ступенями вільності, а C_L^N – кількість способів заповнення ґратки N електронами.

Зауважимо, що гамільтоніан системи

$$\hat{\mathcal{H}} = U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (2.36)$$

вже має діагональну форму. Це дозволяє нам розглядати $\hat{\mathcal{H}}$ як суму незалежних вузлів, тобто $\hat{\mathcal{H}} = \sum_i^L \hat{\mathcal{H}}_i$. З повного набору вузлів можна вибрати дві підмножини A і B так, щоб одна з них була заселена електронами зі спіном \uparrow , а друга – електронами зі спіном \downarrow . Враховуючи таку заселенність, у загальному випадку хвильова функція представлена як

$$\Psi = \left(\prod_{i \in L_1} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{i \in L_2} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle, \quad (2.37)$$

що призводить до наступного виразу для власних значень:

$$E = \sum_{i \in L_1 \cup L_2} U_i. \quad (2.38)$$

Очевидно, що для системи з $N < L$ подвійно заселених вузлів немає і енергія основного стану дорівнює нулю.

2.3 Двоорбітальна модель Габбарда

У підрозділі 2.1 ми отримали співвідношення (2.16) та (2.17), які описують амплітуди тунелювання та кулонівської взаємодії відповідно. Наразі наша увага буде зосереджена на двоорбітальній моделі Фермі-Габбарда.

Така система має чотири внутрішні ступені вільності – дві орбітальні і дві спінові. У порівнянні з одноорбітальною моделлю Габбарда, двоорбітальна модель передбачає більше різноманіття взаємодій, характерних матеріалам з мультиорбітальною структурою. Більш точно, цей підрозділ присвячено двоорбітальній моделі Фермі-Габбарда, реалізованій на лужноземельних та їм подібних атомах. Електронний основний стан 1S_0 і метастабільний збуджений стан 3P_0 представляють орбітальні ступені вільності $|g\rangle$ і $|e\rangle$ відповідно.

Крім того, зробимо деякі спрощення моделі. По-перше, припустимо, що в системі немає таких стрибкових процесів, які можуть змінити заселеність орбіталі γ , проте амплітуди $t_{ij}^{\gamma\gamma'}$ для атомів з різних орбіталей різні. Таким чином, досліджуваний гамільтоніан не враховує парні стрибки. По-друге, зменшимо варіативність дозволених стрибків до стрибків між сусідніми вузлами.

Враховуючи усі перелічені спрощення та використовуючи (2.17), можна отримати амплітуди всіх можливих взаємодій. Оскільки нас цікавлять лише локальні взаємодії, амплітуда $U_{\gamma\gamma}$ для двох частинок з однієї орбіталі набуває вигляду:

$$\begin{aligned} U_{\gamma\gamma} &= \int \int w_{\gamma}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\gamma}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\gamma}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int \int |w_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2 U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |w_{\gamma}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Тоді для частинок з різних орбіталей, $\gamma \neq \gamma'$:

$$\begin{aligned} U_{\gamma\gamma'} &= \int \int w_{\gamma}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\gamma'}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\gamma'}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int \int |w_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2 U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |w_{\gamma'}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Варто зазначити, що для частинок з однаковими спінами, але з різних орбіталей зв'язок Гунда зменшує кулонівську взаємодію на $J_{\gamma\gamma'}$, а саме

$$J_{\gamma\gamma'} = \int \int w_{\gamma'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_{\gamma}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_{\gamma'}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) w_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (2.41)$$

Звернемо увагу, що в нашій моделі $J_{\gamma\gamma'}$ також описує обмінну взаємодію між частинками з різними спінами та з різних орбіталей, так званий спін-фліп. Згідно з усіма симетріями системи $U_{\gamma\gamma'} = U_{\gamma'\gamma}$ і $J_{\gamma\gamma'} = J_{\gamma'\gamma}$, можна записати гамільтоніан

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_i \sum_{\gamma, \sigma} t_{\gamma} \hat{c}_{i, \gamma \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i+1, \gamma \sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \gamma} U_{\gamma\gamma} \hat{n}_{i, \gamma \sigma} \hat{n}_{i, \gamma \sigma'} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma, \gamma \neq \gamma'} (U_{\gamma\gamma'} - J_{\gamma\gamma'}) \hat{n}_{i, \gamma \sigma} \hat{n}_{i, \gamma' \sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \gamma \neq \gamma'} U_{\gamma\gamma'} \hat{n}_{i, \gamma \sigma} \hat{n}_{i, \gamma' \sigma'} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\sigma \neq \sigma', \gamma \neq \gamma'} J_{\gamma\gamma'} \hat{c}_{i, \gamma \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i, \gamma' \sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{i, \gamma \sigma} \hat{c}_{i, \gamma' \sigma}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Для кращого поєднання теорії з експериментом, рівняння (2.42) можна переписати в термінах довжин хвиль розсіювання (див. [61] для більш детальної інформації). Точніше, нас цікавлять експерименти, реалізовані з лужноземельними та їм подібними атомами, що характеризуються $SU(\mathcal{N})$ симетрією; $\mathcal{N} = 2I + 1$, а I — ядерний спін. Зокрема, орбітальні ступені вільності, $|g\rangle$ і $|e\rangle$, представлені електронним основним станом 1S_0 і метастабільним збудженим станом 3P_0 відповідно.

Для двох електронних станів, з двома спіновими і двома орбітальними ступенями вільності, необхідно враховувати чотири довжини s -хвильового розсіювання, щоб описати всі можливі зіткнення в системі. Зіткнення між двома частинками з орбіталі g визначаються довжиною розсіювання a_{gg} . Аналогічно a_{ee} позначає взаємодію e -атомів. На відміну від одноорбітальної моделі Габбарда, зіткнення можуть відбуватися двома додатковими каналами. Так довжини розсіювання a_{eg}^+ та a_{eg}^- характеризують симетричний $(|eg\rangle + |ge\rangle) / \sqrt{2}$ та антисиметричний $(|eg\rangle - |ge\rangle) / \sqrt{2}$ канали відповідно.

Таким чином, співвідношення амплітуд взаємодії задано формулами:

$$U_{\gamma\gamma} = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_{\gamma\gamma} \int |w_{\gamma}(\mathbf{r})|^4 d\mathbf{r}; \quad (2.43)$$

$$U_{eg}^{\pm} = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_{eg}^{\pm} \int |w_e(\mathbf{r})|^2 |w_g(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}. \quad (2.44)$$

де w_{γ} – функція Ваньє (2.5) в орбітальному стані γ . Звідси взаємодія внутрішнього міжорбітального обміну V_{ex} і пряма взаємодія V :

$$V_{\text{ex}} = \frac{U_{eg}^{+} + U_{eg}^{-}}{2} \quad (2.45)$$

та

$$V = \frac{U_{eg}^{+} - U_{eg}^{-}}{2}. \quad (2.46)$$

Усі можливі типи взаємодій зображено на Рис. 2.1

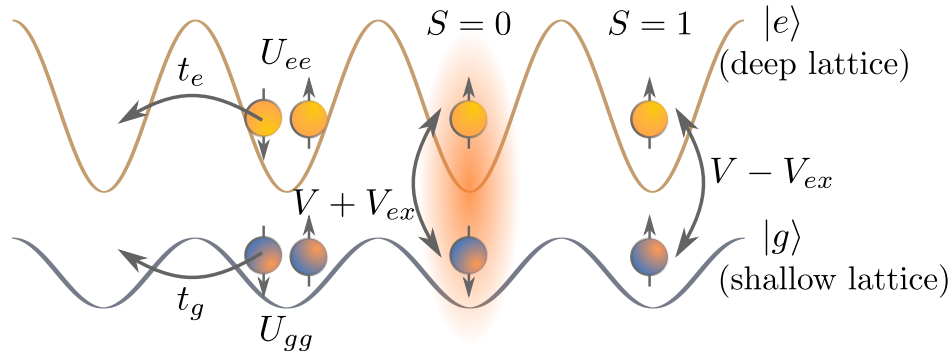


Рис. 2.1: Схематичне зображення усіх можливих взаємодій у двоорбітальній моделі Фермі-Габбарда.

Враховуючи усі зазначені деталі, гамільтоніан для двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда представлено наступною формулою:

$$\mathcal{H} = \sum_i \sum_{\gamma, \sigma} t_{\gamma} (c_{i\gamma\sigma}^{\dagger} c_{i+1\gamma\sigma} + \text{H.c.}) - \sum_{i, \gamma} \mu_{\gamma} n_{i\gamma} + \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (2.47)$$

де другий доданок $\sum_{i, \gamma} \mu_{\gamma} n_{i\gamma}$, що містить хімічний потенціал μ_{γ} , визначає загальну кількість частинок у системі та

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} = & \sum_{i, \gamma} U_{\gamma\gamma} \sum_{\sigma < \sigma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma\sigma'} + V \sum_{i, \sigma < \sigma', \gamma < \gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma'} \\ & + (V - V_{\text{ex}}) \sum_{i, \sigma, \gamma < \gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma} \\ & + V_{\text{ex}} \sum_{i, \sigma < \sigma', \gamma < \gamma'} c_{i\gamma\sigma}^{\dagger} c_{i\gamma'\sigma'}^{\dagger} c_{i\gamma\sigma'} c_{i\gamma'\sigma}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Вище обмінна взаємодія V_{ex} поділяється на дві складові – густина-густина та спін-фліп.

Варто зазначити, що в розділі 4 усі результати отримані в рамках дво-орбітальної моделі Фермі-Габбарда з гамільтініаном (2.47).

РОЗДІЛ 3

Теоретичні підходи

За останні десятиліття методи тензорних мереж [42–47] зазнали значного розвитку, що допомогло вивести на новий рівень чисельний аналіз сильно корельованих квантових систем багатьох тіл. Завдяки певним обчислюваним перевагам тензорні мережі дозволяють вивчати поведінку систем за низьких температур, а саме ефективно отримувати основний стан та виконувати подальші розрахунки усіх відповідних фізичних спостережуваних величин. Перш за все, проблема експоненційного зростання гільбертового простору (характерна точній діагоналізації) вирішується методом повузлової декомпозиції. Крім того, тензорні мережеві методи не мають проблеми зі знаком, що є ключовим моментом вивчення ферміонних систем.

3.1 Точна діагоналізація

Метод точної діагоналізації гамільтоніана (ED) – один із найкращих способів дослідити дискретну скінченну систему й отримати доступ до всіх її власних станів і власних значень. Згідно з алгоритмом, гамільтоніан системи представляється у матричній формі, а потім діагоналізується. На жаль, точна діагоналізація застосовна лише для невеликих систем, що пов'язано з експоненціальним зростанням гільбертового простору зі зростанням ступенів вільності для квантових систем.

Зокрема для двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда, описаної гамільтоніаном (2.47), з двома спіновими та двома орбітальними ступенями вільності, існує чотири внутрішні стани, а саме $g_{\uparrow}, g_{\downarrow}, e_{\uparrow}, e_{\downarrow}$. Кожен окремий вузол може бути порожнім або заповненим ферміоном відповідного сорту. Таким чином, ґратка, що складається з L вузлів, описується матрицею розміру $16^L \times 16^L$. Це означає, що прямий числовий аналіз без застосування додаткової оптимізації можна виконати для $L \approx 5$ вузлів.

Варто зазначити, що для найбільш ефективної реалізації точної діагоналізації слід враховувати характерні для системи симетрії. Як можна побачити з рівняння (2.27), гамільтоніан системи комутує з оператором загальної кількості частинок ($\hat{N} = \sum_{i,\sigma,\gamma} \hat{n}_{i\sigma\gamma}$). Крім того, у досліджуваній системі зберігаються загальні кількості частинок кожного з сортів, тобто, \hat{N}_g ,

$\hat{N}_e, \hat{N}_\uparrow, \hat{N}_\downarrow$, що дає можливість записати гамільтоніан у матричній формі з блочно-діагональною структурою [77, 78] (див. Рис. 3.1):

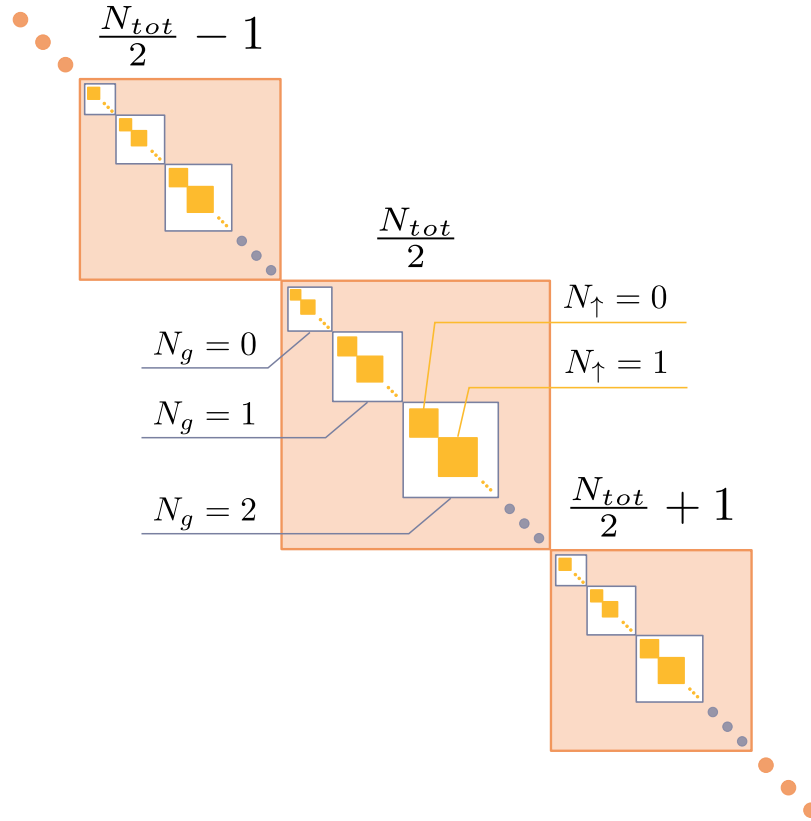


Рис. 3.1: Блочно-діагональна структура матричної форми гамільтоніана. Кожний колір відповідає величині, що зберігається.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{B-1} \oplus \mathcal{H}_B, \quad (3.1)$$

де \mathcal{H}_B – матрична форма гамільтоніана, яка описує систему з фіксованою кількістю частинок g і e , а також частинок зі спіном \uparrow і \downarrow .

Пояснимо детальніше деякі особливості конструкції \mathcal{H}_B . Для реалізації точної діагоналізації важливим кроком є вибір усіх станів, що формують базис \mathcal{H}_B . Базисні вектори зручно записати за допомогою «0» та «1» (див. Рис. 3.2). Оскільки система має чотири внутрішні ступені вільності, окремий вузол можна подати як набір із чотирьох позицій, так що кожна позиція відповідає певному виду частинок. Відсутність частинки позначається «0», тоді як її наявність – «1». Знаючи, як саме діють оператори на базис усієї системи, для кожного \mathcal{H}_B можна побудувати та діагоналізувати матрицю. Зазначимо, що всі математичні операції виконуються для кожної

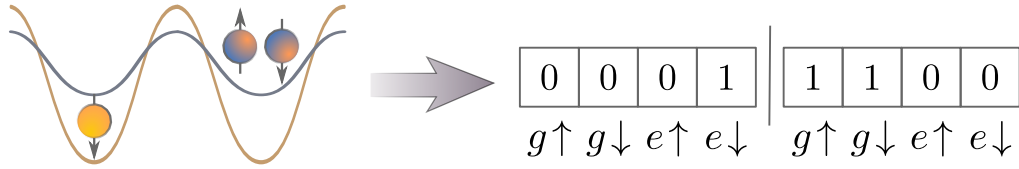


Рис. 3.2: Приклад представлення заселення двох вузлів ґратки за допомогою бінарного коду.

матриці окремо. У результаті набір власних векторів і власних значень усіх гамільтоніанів \mathcal{H}_B дає повну інформацію про досліджувану систему.

Доступ до всіх власних векторів і власних значень гамільтоніана надає можливість обчислити математичне очікування будь-якої спостережуваної величини \hat{O} за скінченної температури T ,

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_n e^{-\beta \epsilon_n} \langle v_n | \hat{O} | v_n \rangle, \quad (3.2)$$

де $\mathcal{Z} = \sum_n e^{-\beta \epsilon_n}$ – це статистична сума з $\beta = 1/k_B T$. У границі $T \rightarrow 0$ статистичну суму і рівняння (3.2) можна переписати наступним чином:

$$\mathcal{Z} \approx e^{-\beta \epsilon_0}, \quad (3.3)$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle v_0 | \hat{O} | v_0 \rangle. \quad (3.4)$$

Хоча метод точної діагоналізації дає змогу досліджувати лише невеликі системи, він є надійною перевіркою результатів, отриманих за допомогою інших наближених алгоритмів обчислення.

3.2 Перетворення Йордана–Вігнера

Оскільки обчислювальні можливості точної діагоналізації не перевищують $L \approx 5$ (ця межа незначно залежить від обчислювальних ресурсів), для подальшого вивчення моделі Фермі–Габбарда слід застосувати альтернативні чисельні методи. Зокрема, тут ми зосередимось на використанні підходу матричних множників (MPS). Для цього, як варіант, гамільтоніан системи можна залишити у формі (2.47), але зазвичай більш зручним є виконати перехід від ферміонних операторів до спінових за допомогою перетворень Йордана–Вігнера [79].

Визначимо оператори народження (знищення) в термінах спінових операторів:

$$\hat{c}_j = \prod_{n' < n} (-\hat{\sigma}_{n'}^z) \hat{\sigma}_n^-, \quad (3.5)$$

$$\hat{c}_j^\dagger = \prod_{n' < n} (-\hat{\sigma}_{n'}^z) \hat{\sigma}_n^+, \quad (3.6)$$

де $\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z$ – матриці Паулі і $\hat{\sigma}^\pm = \hat{\sigma}^x \pm i\hat{\sigma}^y$. Тут n – узагальнений індекс: $n = 4i + 2\gamma + \sigma$ із $\sigma = \{0, 1\}$, $\gamma = \{0, 1\}$, $i = \{0, \dots, N - 1\}$. Корисно пригадати наступні співвідношення для матричних добутків:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^z &= -\hat{\sigma}_j^+, & \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_j^+ &= \hat{\sigma}_j^+, \\ \hat{\sigma}_j^- \hat{\sigma}_j^z &= \hat{\sigma}_j^-, & \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_j^- &= -\hat{\sigma}_j^-. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Застосуємо (3.5) і (3.6) почергово до усіх доданків гамільтоніана (2.47). Спершу виконаємо перетворення доданку, що відповідає за тунелювання в системі:

$$\begin{aligned} -t \sum_{i\gamma\sigma} \hat{c}_{i\gamma\sigma}^\dagger \hat{c}_{(i+1)\gamma\sigma} &= -t \sum_n \hat{c}_{4i+2\gamma+\sigma}^\dagger \hat{c}_{4(i+1)+2\gamma+\sigma} \\ &= -t \sum_n \hat{c}_{4i+2\gamma+\sigma}^\dagger \hat{c}_{4i+2\gamma+\sigma+4} \\ &= -t \sum_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+4} \\ &= -t \sum_n (-\hat{\sigma}_1^z) (-\hat{\sigma}_2^z) \dots (-\hat{\sigma}_{n-1}^z) \hat{\sigma}_n^+ \times (-\hat{\sigma}_1^z) (-\hat{\sigma}_2^z) \dots \\ &\quad \times (-\hat{\sigma}_{n-1}^z) (-\hat{\sigma}_n^z) (-\hat{\sigma}_{n+1}^z) (-\hat{\sigma}_{n+2}^z) (-\hat{\sigma}_{n+3}^z) \hat{\sigma}_{n+4}^- \\ &= -t \sum_n \hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_n^z \hat{\sigma}_{n+1}^z \hat{\sigma}_{n+2}^z \hat{\sigma}_{n+3}^z \hat{\sigma}_{n+4}^- \\ &= t \sum_n \hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^z \hat{\sigma}_{n+2}^z \hat{\sigma}_{n+3}^z \hat{\sigma}_{n+4}^-. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Аналогічно ермітово-спряжена частина набуває вигляду:

$$-t \sum_{i\gamma\sigma} \hat{c}_{(i+1)\gamma\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\gamma\sigma} = -t \sum_n \hat{c}_{4(i+1)+2\gamma+\sigma}^\dagger \hat{c}_{4i+2\gamma+\sigma} = t \sum_n \hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_{n+1}^z \hat{\sigma}_{n+2}^z \hat{\sigma}_{n+3}^z \hat{\sigma}_{n+4}^+. \quad (3.9)$$

Враховуючи, що $\sigma = 0 = \downarrow$, $\sigma = 1 = \uparrow$, локальну взаємодію з амплітудою

U можна записати як

$$\begin{aligned}
\sum_{\gamma} U_{\gamma} \sum_i \hat{n}_{i\gamma\uparrow} \hat{n}_{i\gamma\downarrow} &= \sum_{\gamma} U_{\gamma} \sum_i \hat{c}_{i\gamma\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{i\gamma\uparrow} \hat{c}_{i\gamma\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{i\gamma\downarrow} \\
&= \sum_{\gamma} U_{\gamma} \sum_i \hat{c}_{4i+2\gamma+1}^{\dagger} \hat{c}_{4i+2\gamma+1} \hat{c}_{4i+2\gamma}^{\dagger} \hat{c}_{4i+2\gamma} \\
&= \sum_{\gamma} U_{\gamma} \sum_i \hat{\sigma}_{4i+2\gamma+1}^+ \hat{\sigma}_{4i+2\gamma+1}^- \hat{\sigma}_{4i+2\gamma}^+ \hat{\sigma}_{4i+2\gamma}^- \\
&= U \sum_n \sigma_n^+ \hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_{n-1}^+ \hat{\sigma}_{n-1}^-.
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Звернемо увагу, що амплітуда U залежить від орбіталі, тобто $U = \{U_g(\gamma = 0), U_e(\gamma = 1)\}$. Крім того, для спрощення запису можна ввести оператор проектування $\hat{\pi}_j^0 = \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ і переписати (3.10):

$$U \sum_n \hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_n^- \hat{\sigma}_{n-1}^+ \hat{\sigma}_{n-1}^- = U \sum_n \hat{\pi}_n^0 \hat{\pi}_{n-1}^0. \tag{3.11}$$

Міжорбітальна взаємодія $(V - V_{\text{ex}})$ для частинок з однаковими спінами має вигляд

$$\begin{aligned}
&\sum_{i,\sigma,\gamma<\gamma'} (V - V_{\text{ex}}) \hat{n}_{i\gamma\sigma} \hat{n}_{i\gamma'\sigma} \\
&= (V - V_{\text{ex}}) \sum_i (\hat{n}_{ie\uparrow} \hat{n}_{ig\uparrow} + \hat{n}_{ie\downarrow} \hat{n}_{ig\downarrow}) \\
&= (V - V_{\text{ex}}) \sum_i (\hat{c}_{4i+3}^{\dagger} \hat{c}_{4i+3} \hat{c}_{4i+1}^{\dagger} \hat{c}_{4i+1} + \hat{c}_{4i+2}^{\dagger} \hat{c}_{4i+2} \hat{c}_{4i}^{\dagger} \hat{c}_{4i}) \\
&= (V - V_{\text{ex}}) \sum_i (\hat{\sigma}_{4i+3}^+ \hat{\sigma}_{4i+3}^- \hat{\sigma}_{4i+1}^+ \hat{\sigma}_{4i+1}^- + \hat{\sigma}_{4i+2}^+ \hat{\sigma}_{4i+2}^- \hat{\sigma}_{4i}^+ \hat{\sigma}_{4i}^-) \\
&= (V - V_{\text{ex}}) \sum_i (\hat{\pi}_{4i+3}^0 \hat{\pi}_{4i+1}^0 + \hat{\pi}_{4i+2}^0 \hat{\pi}_{4i}^0).
\end{aligned} \tag{3.12}$$

У той самий час пряма взаємодія V для частинок з різними спінами:

$$\begin{aligned}
\sum_{i,\sigma<\sigma',\gamma<\gamma'} V \hat{n}_{i\gamma\sigma} \hat{n}_{i\gamma'\sigma'} &= V \sum_i (\hat{n}_{ie\uparrow} \hat{n}_{ig\downarrow} + \hat{n}_{ie\downarrow} \hat{n}_{ig\uparrow}) \\
&+ V \sum_i (\hat{c}_{4i+3}^{\dagger} \hat{c}_{4i+3} \hat{c}_{4i}^{\dagger} \hat{c}_{4i} + \hat{c}_{4i+2}^{\dagger} \hat{c}_{4i+2} \hat{c}_{4i+1}^{\dagger} \hat{c}_{4i+1})
\end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned}
& + V \sum_i (\hat{\sigma}_{4i+3}^+ \hat{\sigma}_{4i+3}^- \hat{\sigma}_{4i}^+ \hat{\sigma}_{4i}^- + \hat{\sigma}_{4i+2}^+ \hat{\sigma}_{4i+2}^- \hat{\sigma}_{4i+1}^+ \hat{\sigma}_{4i+1}^-) \\
& + V \sum_i (\hat{\pi}_{4i+3}^0 \hat{\pi}_{4i}^0 + \hat{\pi}_{4i+2}^0 \hat{\pi}_{4i+1}^0).
\end{aligned}$$

Доданок, що описує взаємодію типу спін-фліп, перетворюється наступним чином:

$$\begin{aligned}
V_{\text{ex}} \sum_{i, \sigma \neq \sigma', \gamma < \gamma'} \hat{c}_{i\gamma\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\gamma'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\gamma\sigma} \hat{c}_{i\gamma'\sigma} &= V_{\text{ex}} \sum_i \hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ie\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{c}_{ie\uparrow} \quad (3.14) \\
&= V_{\text{ex}} \sum_i (\hat{c}_{4i}^\dagger \hat{c}_{4i+3}^\dagger \hat{c}_{4i+1} \hat{c}_{4i+2} + \hat{c}_{4i+1}^\dagger \hat{c}_{4i+2}^\dagger \hat{c}_{4i} \hat{c}_{4i+3}) \\
&= -V_{\text{ex}} \sum_i (\hat{\sigma}_{4i}^+ \hat{\sigma}_{4i+1}^- \hat{\sigma}_{4i+2}^- \hat{\sigma}_{4i+3}^+ + \hat{\sigma}_{4i}^- \hat{\sigma}_{4i+1}^+ \hat{\sigma}_{4i+2}^+ \hat{\sigma}_{4i+3}^-).
\end{aligned}$$

Останній член гамільтоніана, що містить хімічний потенціал μ_γ можна переписати так:

$$\begin{aligned}
\sum_{i\gamma\sigma} \mu_\gamma \hat{n}_{i\gamma\sigma} &= \sum_{i\gamma\sigma} \mu_\gamma \hat{c}_{i\gamma\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\gamma\sigma} \quad (3.15) \\
&= \sum_{i\sigma} (\mu_g \hat{\sigma}_{4i+\sigma}^+ \hat{\sigma}_{4i+\sigma}^- + \mu_e \hat{\sigma}_{4i+\sigma+2}^+ \hat{\sigma}_{4i+\sigma+2}^-) \\
&= \sum_{i\sigma} (\mu_g \hat{\pi}_{4i+\sigma}^0 + \mu_e \hat{\pi}_{4i+\sigma+2}^0).
\end{aligned}$$

Враховуючи вирази (3.9) і (3.12)–(3.15), остаточна форма двоорбітального гамільтоніана моделі Фермі-Габбарда набуває форми

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= t \sum_n (\hat{\sigma}_n^+ \hat{\sigma}_{n+1}^z \hat{\sigma}_{n+2}^z \hat{\sigma}_{n+3}^z \hat{\sigma}_{n+4}^- + H.c.) + U \sum_n \hat{\pi}_n^0 \hat{\pi}_{n-1}^0 \quad (3.16) \\
&+ (V - V_{\text{ex}}) \sum_i (\hat{\pi}_{4i+3}^0 \hat{\pi}_{4i+1}^0 + \hat{\pi}_{4i+2}^0 \hat{\pi}_{4i}^0) + V \sum_i (\hat{\pi}_{4i+3}^0 \hat{\pi}_{4i}^0 + \hat{\pi}_{4i+2}^0 \hat{\pi}_{4i+1}^0) \\
&- V_{\text{ex}} \sum_i (\hat{\sigma}_{4i}^+ \hat{\sigma}_{4i+1}^- \hat{\sigma}_{4i+2}^- \hat{\sigma}_{4i+3}^+ + \hat{\sigma}_{4i}^- \hat{\sigma}_{4i+1}^+ \hat{\sigma}_{4i+2}^+ \hat{\sigma}_{4i+3}^-) \\
&+ \sum_{i\sigma} (\mu_g \hat{\pi}_{4i+\sigma}^0 + \mu_e \hat{\pi}_{4i+\sigma+2}^0).
\end{aligned}$$

3.3 Метод матричних множників

Одним з найбільш відомих методів вирішування задач фізики багатьох частинок є група перенормування матриці густини (DMRG) [43, 51]. У поєднанні з хвильовою функцією у вигляді матричних множників (MPS) [48–50] остання стає надійним та потужним інструментом. Як правило, алгоритм DMRG використовується для отримання основного стану системи шляхом знаходження домінуючого власного вектора гамільтоніану у вигляді матричних множників.

3.3.1 Хвильова функція як добуток матричних множників

Щоб полегшити розуміння наступних математичних співвідношень, розпочнемо з графічного представлення тензорів [80]. Мовою тензорних мереж, як правило, тензор зображується у вигляді геометричної фігури з “ніжками”. Кількість ніжок відповідає рангу тензора, а отже дорівнює кількості індексів. З цього зрозуміло, що скаляр (тензор рангу 0), вектор (тензор рангу 1) та матриця (тензор рангу 2) мають нуль, одну і дві ніжки відповідно. Приклади представлення тензорів див. на Рис. 3.3.

$$\begin{array}{l}
 \text{а) } \quad \boxed{a} \quad \boxed{a} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{A} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } j \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \\
 \quad \quad \quad a \quad \quad a_i \quad \quad A_{ij} \\
 \\
 \text{б) } \quad \boxed{a} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{b} \quad \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{A} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } j \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{a} \quad \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{A} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } j \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{B} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } k \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \boxed{A} \begin{array}{l} \text{\scriptsize } i \\ \text{\scriptsize } | \end{array} \\
 \quad \quad \quad a_i b^i \quad \quad A_j^i a^j \quad \quad A_j^i B_k^j \quad \quad A_i^i
 \end{array}$$

Рис. 3.3: Приклади тензорних позначень. Зліва направо: скаляр, вектор, матриця; б) приклади згортки тензорів. Зліва направо: скалярний добуток, множення матриці на вектор, множення матриці на матрицю, слід матриці.

Математичні операції над тензорами, такі як скалярний добуток, множення матриці на вектор, множення матриці на матрицю, графічно зображуються у вигляді поєднаних ніжок. Слід матриці – ніжка, що замикається сама на себе.

Тепер розглянемо систему, представлену ґраткою з L вузлами, кожному з яких відповідає d -мірний гільбертовий простір. Таким чином, у загаль-

ному вигляді довільний стан описують формулою

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_L} \psi_{i_1 \dots i_L} |i_1 \dots i_L\rangle, \quad (3.17)$$

де $\psi_{i_1 \dots i_L}$ – d^L -мірний тензор і $|i_s\rangle$ – базисні стани одиничного вузла. Наприклад, хвильова функція системи, що описується моделлю Гейзенберга, може бути представлена 2^L -мірним тензором; у разі моделі Габбарда ранг дорівнює 4^L .

Основна ідея підходу матричних множників полягає у відокремленні фізичних ступенів вільності кожного вузла ґратки та записі хвильової функції у вигляді добутку L -матриць так, щоб кожна матриця відповідала лише одному вузлу, як показано на Рис. 3.4. Уся процедура складається із серії перетворень та сингулярних розкладань матриці (SVD) [43].

Припустимо, що процедура декомпозиції відбувається з лівого боку. В цілому, сингулярне розкладання матриці можна починати як зліва, так і справа або ж використовувати змішану форму декомпозиції. Відокремлення першого індексу i_1 , тобто індексу, який описує фізичні ступені вільності першого вузла, досягається шляхом перетворення тензора $\psi_{i_1 \dots i_L}$ як наведено нижче [81]:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_L} \psi_{i_1 \dots i_L} |i_1 \dots i_L\rangle = \sum_{i_1 \dots i_L} \psi_{(i_2 \dots i_L)}^{i_1} |i_1 \dots i_L\rangle. \quad (3.18)$$

У цьому записі i_1 – індекс рядка, а $(i_2 \dots i_L)$ – індекс стовпця. Виконуючи декомпозицію хвильової функції, маємо

$$\psi_{(i_2 \dots i_L)}^{i_1} = \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1}^{i_1} \psi_{(i_2 \dots i_L)}^{\alpha_1} \quad (3.19)$$

або

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_L} \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1}^{i_1} \psi_{(i_2 \dots i_L)}^{\alpha_1} |i_1 i_2 \dots i_L\rangle. \quad (3.20)$$

Матриця $A_{\alpha_1}^{i_1}$ містить інформацію про перший вузол ґратки; $\alpha_1 = 1, \dots, d$.

Відокремлення другого вузла відбувається за аналогічною схемою, тоб-

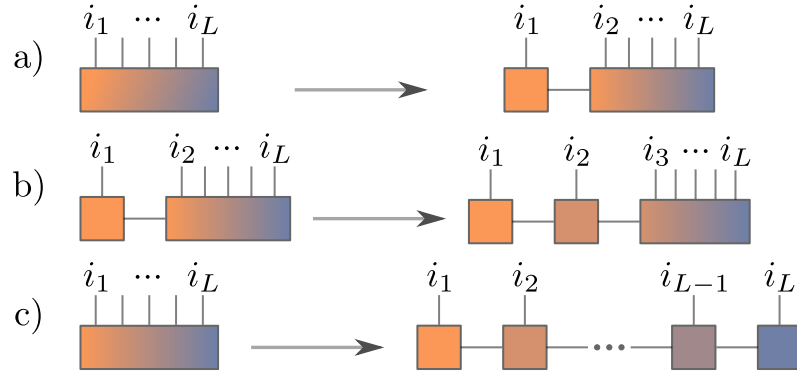


Рис. 3.4: Графічне зображення відокремлення фізичних індексів. а) Відокремлення першого вузла; б) відокремлення другого вузла; в) усі вузли відокремлені та представлені у вигляді матриць.

то шляхом зміни форми та сингулярного розкладання матриці $\psi_{(i_2 \dots i_L)}^{i_1}$:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{i_1 \dots i_L} \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1}^{i_1} \psi_{(i_3 \dots i_L)}^{(\alpha_1 i_2)} |i_1 \dots i_L\rangle \\ &= \sum_{i_1 \dots i_L} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} A_{\alpha_1}^{i_1} A_{\alpha_1 \alpha_2}^{i_2} \psi_{(i_3 \dots i_L)}^{\alpha_2} |i_1 \dots i_L\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Дотримуючись цих кроків, зрештою $|\Psi\rangle$ можна переписати як добуток матриць, а саме

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_L} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_{L-1}} A_{\alpha_1}^{i_1} A_{\alpha_1 \alpha_2}^{i_2} \dots A_{\alpha_{L-2} \alpha_{L-1}}^{i_{L-1}} A_{\alpha_{L-1}}^{i_L} |i_1 \dots i_L\rangle. \quad (3.22)$$

Звернемо увагу, що у загальному випадку $\alpha_s = 1, \dots, D$; D називається розмірністю зв'язку. Як було зазначено вище, максимальне значення α_1 дорівнює d , а α_2 дорівнює d^2 . Оскільки діапазон α_k залежить від рангу відповідного SVD, $\alpha_{L-2} = 1, \dots, d^2$ та $\alpha_{L-1} = 1, \dots, d$. Отже, максимальне значення розмірності зв'язку D дорівнює $d^{L/2}$ та відповідає середньому вузлу ґратки.

Для визначення дуального MPS кожену матрицю A необхідно замінити на A^\dagger . Отже,

$$\langle \Psi | = \sum_{i'_1 \dots i'_L} \sum_{\alpha'_1 \dots \alpha'_{L-1}} A_{\alpha'_1}^{*i'_1} A_{\alpha'_1 \alpha'_2}^{*i'_2} \dots A_{\alpha'_{L-2} \alpha'_{L-1}}^{*i'_{L-1}} A_{\alpha'_{L-1}}^{*i'_L} \langle i'_1 \dots i'_L |, \quad (3.23)$$

де $*$ – символ комплексного спряження. Варто зазначити, що графічне представлення дуального MPS дуже схоже. Різниця полягає у положенні ніжок, що зображаються знизу.

Підбиваючи підсумки, будь-яка хвильова функція може бути представлена у вигляді добутку матриць, так що кожна матриця цього добутку відповідає лише одному вузлу. Таке представлення не є унікальним, тобто кілька різних матричних добутків можуть характеризувати один і той же квантовий стан.

3.3.2 Вимірювання

Як було згадано раніше, представлення хвильової функції у вигляді добутку матриць передбачає неодноразове виконання SVD процедури. Припустимо, що декомпозиція виконується ліворуч до вузла s і праворуч до вузла $s+2$. Вважається, що хвильова функція знаходиться у змішаній канонічній формі, а вузол s є ортогональним центром [82]. За визначенням сингулярного розкладу, довільну матрицю можна представити у вигляді добутку трьох матриць ($M = UDV^\dagger$), де U і V^\dagger – нормовані зліва та справа відповідно. Діагональні елементи матриці D містять сингулярні значення матриці M . Крім того, результатом згортки двох нормованих зліва або справа тензорів є одиничний тензор. Усі ці властивості полегшують вимірювання, що застосовуються до MPS [83].

Для проведення локальних вимірювань на вузлі s необхідно обчислити $\langle \Psi | \hat{O}^{[i_s]} | \Psi \rangle$. Без урахування жодних спрощень оператор $\hat{O}^{[i_s]}$ слід записати у вигляді $\hat{O}^{[i_s]} = \hat{I}^{[i_1]} \otimes \hat{I}^{[i_2]} \otimes \dots \otimes \hat{I}^{[i_{s-1}]} \otimes \hat{O}^{[i_s]} \otimes \hat{I}^{[i_{s+1}]} \otimes \dots \otimes \hat{I}^{[i_L]}$. Вважаємо, що зліва від вузла s усі тензори, які представлені добутком матриць, нормовані зліва, а всі тензори праворуч від вузла s – нормовані справа. У цьому випадку в результаті згортки залишаться лише дві матриці, що відповідають вузлу s (див. Рис. 3.5).

У разі нелокальних вимірювань (наприклад, $\langle \Psi | \hat{O}^{[i_s]} \hat{O}^{[i_{s+2}]} | \Psi \rangle$), як зображено на Рис. 3.6) дія оператора на вузол, відмінного від ортогонального центру, призводить до порушення ортогональності. Як наслідок, згортка тензорів між вузлами s і $s+2$ неможлива. Проте, як і раніше, згортка застосовна до усіх тензорів ліворуч від вузла s і праворуч від вузла $s+2$.

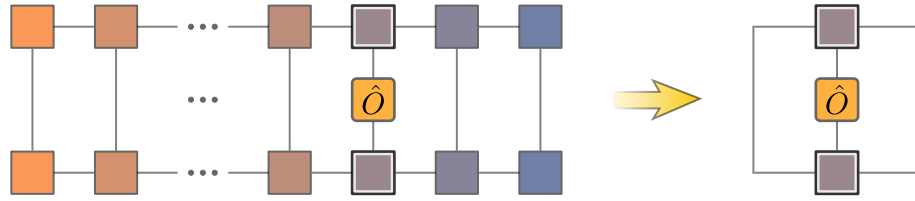


Рис. 3.5: Ілюстрація вимірювання локальних спостережуваних величин.

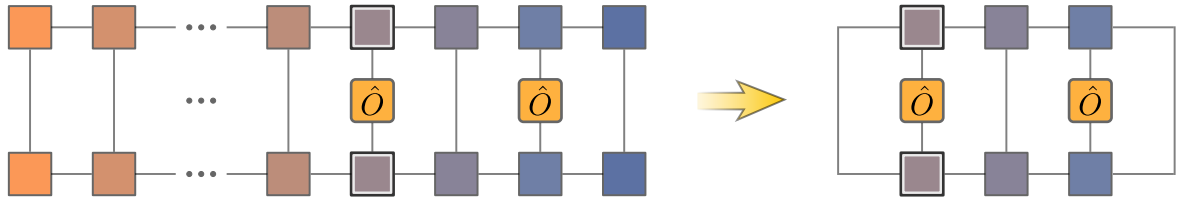


Рис. 3.6: Ілюстрація нелокальних вимірювань.

3.3.3 Оператори матричних множників

У попередньому розділі ми розглянули основні положення представлення хвильової функції у вигляді добутку матриць. Аналогічну процедуру можна виконати також по відношенню до гамільтоніана системи та записати його як оператор матричних множників (МРО). Низка сингулярних розкладань разом зі зміною розміру матриці приводить до наступного результату:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i_1 \dots i_L} \sum_{i'_1 \dots i'_L} \sum_{\beta_1 \dots \beta_{L-1}} H_{\beta_1}^{i_1 i'_1} H_{\beta_1 \beta_2}^{i_2 i'_2} \dots H_{\beta_{L-1}}^{i_L i'_L} |i_1 \dots i_L\rangle \langle i'_1 \dots i'_L|. \quad (3.24)$$

Тут індекс β_s має те саме значення, що і α_s в рівнянні (3.22). Зауважимо, що відтепер слід враховувати два фізичні індекси i_s і i'_s . Графічне представлення МРО продемонстровано на Рис. 3.7, де вертикальні лінії відповідають i_s і i'_s . У разі відкритих граничних умов крайні матричні оператори є тензорами рангу 3, інші – рангу 4.

Для кращого розуміння поняття оператора матричних множників наведемо декілька прикладів.

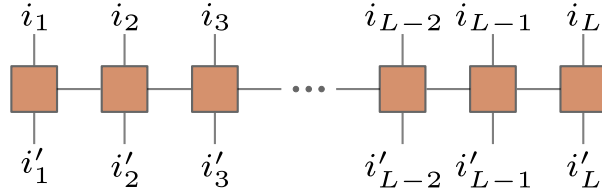


Рис. 3.7: Графічне представлення оператора матричних множників.

3.3.4 МРО у випадку моделі Гейзенберга зі спіном 1/2

Моделі Гейзенберга відповідає наступний гамільтоніан:

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{i=1}^{L-1} (\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z) - h \sum_{i=1}^L \hat{S}_i^z, \quad (3.25)$$

де J і h – стала зв'язку та зовнішнє магнітне поле відповідно, а $\hat{\mathbf{S}}_i = \{\hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y, \hat{S}_i^z\}$ – оператор спіну 1/2. Зрозуміло, що рівняння (3.25) можна переписати:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & J \hat{S}_1^x \otimes \hat{S}_2^x \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} + J \hat{S}_1^y \otimes \hat{S}_2^y \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} \quad (3.26) \\ & + J \hat{S}_1^z \otimes \hat{S}_2^z \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} + h \hat{S}_1^z \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} \\ & + J \hat{I} \otimes \hat{S}_1^x \otimes \hat{S}_2^x \otimes \hat{I} \otimes \dots \otimes \hat{I} + \dots \end{aligned}$$

Щоб побудувати МРО [84], зосередимося на структурі довільного члена виразу (3.26). Починаючи з правого боку, усі доданки містять одиничні оператори до моменту, коли з'являється один із спінових операторів. Так члени, що описують магнітне поле, мають лише один нетривіальний оператор. У доданках зі взаємодією кожному спіновому оператору передують такі самі оператори, а усі інші – одиничні. За цією логікою розрізняють п'ять сигналів (див. Рис. 3.8). Сигнал “1” відповідає результату дії одиничного оператора, сигнали “2”, “3”, “4” – діям \hat{S}^x , \hat{S}^y , \hat{S}^z відповідно, а “5” – або завершенню взаємодії, або прикладеному магнітному полю.

Особливу увагу слід приділити порядку сформованих сигналів. Очевидно, що дозволено лише кілька переходів. Перехід “1” \rightarrow “1” означає послідовну дію двох одиничних операторів. Переходи “1” \rightarrow “2”, “1” \rightarrow “3”, “1” \rightarrow “4” відбуваються, коли за одиничним оператором слідує оператор

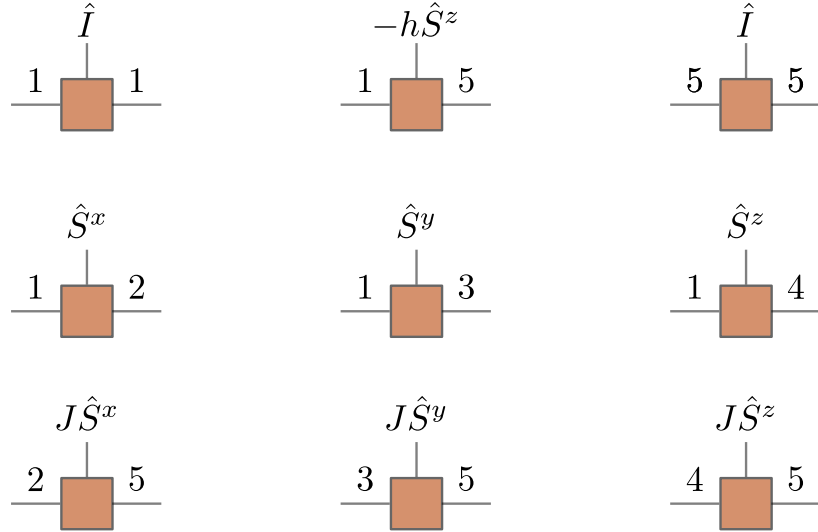


Рис. 3.8: Графічне подання сигналів моделі Гейзенберга для подальшого формування гамільтоніана як оператора матричних множників.

ри \hat{S}^x , \hat{S}^y , \hat{S}^z , відповідно, а "1" \rightarrow "5" з'являється, коли після I надходить $-h\hat{S}^z$. У разі доданка зі взаємодією існує три можливі варіанти: "2" \rightarrow "5" (дія $J\hat{S}^x$), "3" \rightarrow "5" (дія $J\hat{S}^y$), "4" \rightarrow "5" (дія $J\hat{S}^z$). Перехід "5" \rightarrow "5" означає, що взаємодія вже відбулася, а магнітне поле враховано, отже застосовано \hat{I} .

Таким чином, гамільтоніан моделі Гейзенберга(3.25) у формі МРО:

$$\hat{H}^{[i_s]} = \begin{pmatrix} \hat{I} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{S}^x & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{S}^y & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hat{S}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -h\hat{S}^z & J\hat{S}^x & J\hat{S}^y & J\hat{S}^z & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

де " \cdot " позначають 0 з метою компактності. Відзначимо, що першому вузлу відповідає вектор-рядок, а останньому – вектор-стовпець, а саме

$$\hat{H}^{[i_1]} = \begin{pmatrix} -h\hat{S}^z & J\hat{S}^x & J\hat{S}^y & J\hat{S}^z & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad \hat{H}^{[i_L]} = \begin{pmatrix} \hat{I} \\ \hat{S}^x \\ \hat{S}^y \\ \hat{S}^z \\ -h\hat{S}^z \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Перевірити коректність побудови гамільтоніана у вигляді оператора матричних множників можна за допомогою звичайного матричного множення.

3.3.5 МРО у випадку двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда

Дотримуючись тієї ж логіки, що у випадку моделі Гейзенберга, можна побудувати МРО для двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда з гамільтоніаном (3.16). Оскільки система має чотири внутрішні ступені вільності ($k = 1, 2, 3, 4$), вигляд матричних множників залежатиме від сорту частинок:

$$H^{[i_s, k]} = \begin{pmatrix} \hat{I} & \hat{\sigma}^+ & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^- & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\pi}_{j,1}^0 & \hat{\pi}_{j,3}^0 & \hat{\pi}_{j,2}^0 & \hat{\sigma}_{j,1}^+ & \hat{\sigma}_{j,1}^- & H_{(0,14)} \\ \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & t\hat{\sigma}^- \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}^z & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & t\hat{\sigma}^+ \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{(9,14)} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & U\hat{\pi}_{j,4}^0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{(11,14)} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}_{j,\{1,3\}}^- & \cdot & -\tilde{V}_{\text{ex}}\hat{\sigma}_{j,4}^+ \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{\sigma}_{j,\{1,3\}}^+ & -\tilde{V}_{\text{ex}}\hat{\sigma}_{j,4}^- \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

де застосовано наступні позначення:

$$H_{(0,14)} = -\sum_{k=1}^4 \mu_k \hat{\pi}_{j,k}^0 \quad (3.30)$$

$$H_{(9,14)} = U\hat{\pi}_{j,2}^0 + [(V - V_{\text{ex}})\hat{\pi}_{j,3}^0 + V\hat{\pi}_{j,4}^0]$$

$$H_{(11,14)} = [V\hat{\pi}_{j,3}^0 + (V - V_{\text{ex}})\hat{\pi}_{j,4}^0].$$

Як було зазначено раніше, матриця першого вузла ґратки є вектором-рядком. Наприклад, для $k = 1$ це можна записати:

$$H^{[1,1]} = \left(\hat{I} \quad \hat{\sigma}^+ \quad \dots \quad \hat{\sigma}^- \quad \dots \quad \hat{\pi}_{1,1}^0 \quad 0 \quad 0 \quad \hat{\sigma}_{1,1}^+ \quad \hat{\sigma}_{1,1}^- \quad H_{(0,14)}^{k=1} \right). \quad (3.31)$$

Тоді як для останнього вузла при $k = 4$:

$$H^{[L,4]} = \left(H_{(0,14)}^{k=4} \cdots \cdots H_{(9,14)}^{k=4} U \hat{\pi}_{L,4}^0 H_{(11,14)}^{k=4} - \tilde{V}_{\text{ex}} \hat{\sigma}_{L,4}^+ - \tilde{V}_{\text{ex}} \hat{\sigma}_{L,4}^- \hat{I} \right)^T. \quad (3.32)$$

Для гамільтоніана і хвильової функції, записаних в термінах МРО і MPS відповідно, можна застосувати алгоритм групи перенормування матриці густини та отримати енергію основного стану системи.

3.3.6 Група перенормування матриці густини

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (3.33)$$

де E – енергія системи. Аби визначити енергію основного стану, необхідно знайти таку хвильову функцію $|\Psi\rangle$ (у формі матричних множників, див. Рис. 3.9), яка мінімізує значення

$$\langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle - E\langle\Psi|\Psi\rangle = 0. \quad (3.34)$$

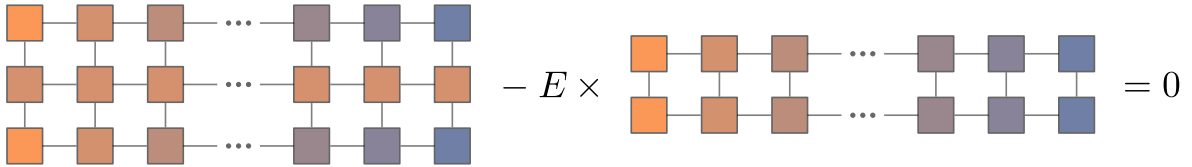


Рис. 3.9: Ілюстрація рівняння Шредінгера. Гамільтоніан \mathcal{H} та хвильова функція $|\Psi\rangle$ представлені у вигляді матричних множників (MPS та МРО відповідно).

З обчислювальної точки зору задача є досить складною, оскільки $|\Psi\rangle$ визначена добутком матриць. Тим не менш, завдяки ітераційному підходу можна уникнути нелінійних обчислень. Згідно з основною ідеєю методу [43, 81, 84], усі матриці $|\Psi\rangle$ вважаються сталими, за винятком тієї, що відповідає вузлу s . Елементи цієї матриці розглядають як змінні. Розв'язуючи рівняння (3.34) варіаційно, можна отримати енергію, меншу за початкову. Варто зазначити, що нижча енергія не означає енергію основного стану.

Для знаходження останньої необхідно проваріювати усі матриці у записі хвильової функції.

Нижче ми наведемо основні кроки алгоритму.

1. Робиться припущення щодо початкової хвильової функції системи $|\Psi\rangle$ у формі MPS. У найзагальнішому випадку матриці можуть бути заповнені випадковими числами. На цьому кроці доцільно вибрати малий розмір зв'язку D .
2. Починаючи із матриці першого вузла $s = 1$ у якості змінної (решта – константи) і використовуючи початкове припущення щодо $|\Psi\rangle$, здійснюється варіаційна мінімізація енергії. Поступово переходячи від вузла $s = 1$ до $s = L - 1$, мінімізація повторюється.
3. Подібно до кроку 2, мінімізація відбувається у зворотному напрямі, тобто від вузла $s = L$ до $s = 2$.
4. Кроки 2 – 3 повторюються до збіжності алгоритму. Вважається, що енергію основного стану знайдено, якщо зменшення енергії E більше не відбувається.

Під час застосування алгоритму слід враховувати декілька можливих складнощів. Перш за все, абсолютно випадкове припущення початкового вигляду хвильової функції може призвести до великої кількості ітерацій, а отже час розрахунку може різко збільшитися. Більш того, не виключено, що алгоритм «застрягне» в локальному мінімумі системи. Щоб уникнути цього, можна включити до системи випадковий «шум» або реалізувати алгоритм на двох вузлах, який, власне, і є оригінальним формулюванням DMRG. Незважаючи на те, що останній чисельно складніший у d разів, він дає більш точні результати розрахунків глобального мінімуму.

Іншим питанням, на яке слід звернути увагу, є розмір зв'язку D . Оскільки D змінюється від одного вузла MPS до іншого, для середніх вузлів його значення можуть бути занадто великими. На жаль, зберегти розмір зв'язку достатньо великим вдається не завжди, оскільки експоненціальне зростання D призводить до тієї ж проблеми, що й у випадку точної діагоналізації. Для ефективного виконання обчислень розмір зв'язку може бути скороче-

но під час сингулярного розкладання матриці, так як виключення малих власних значень суттєво не впливає на значення енергії основного стану E .

3.4 Перетворення Шріффера-Вольфа для двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда

Як можна помітити, за відсутності процесу тунелювання ($t_\gamma = 0$) відбувається виродження енергетичних рівнів. Зокрема, для атомних систем, що складаються з атомів ^{171}Yb , існує два вироджених основних стани. У той же час для атомів ^{87}Sr або ^{173}Yb існує потрійне виродження, яке формується локальними спін-триплетними станами. Усі ці стани зображено на Рис. 3.10.

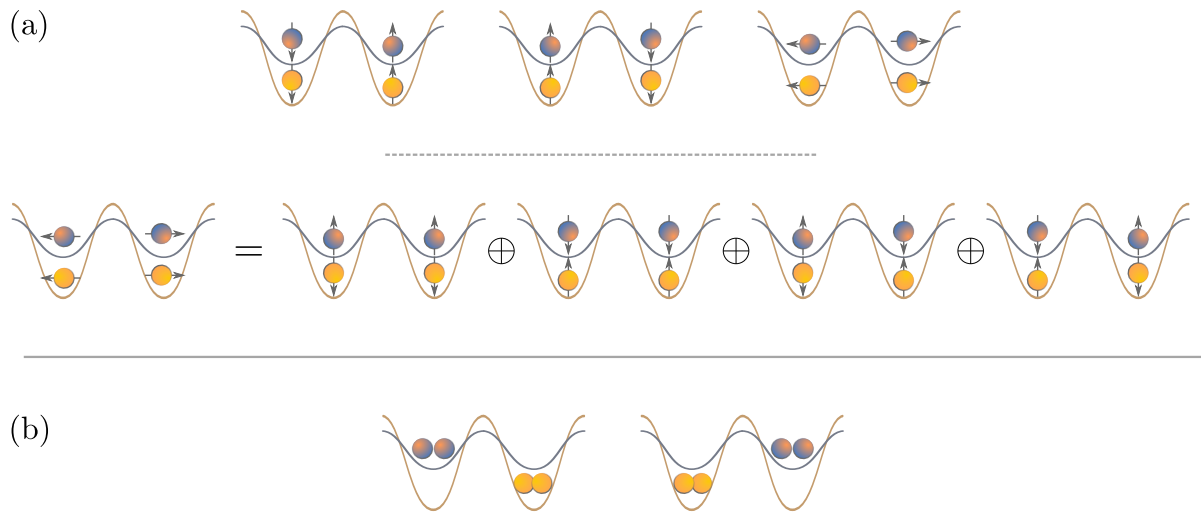


Рис. 3.10: Графічне зображення можливих основних станів для систем з атомів а) ^{87}Sr та ^{173}Yb , б) ^{171}Yb .

За наявності тунелювання, але за умови, що $U_{\gamma\gamma} \gg t_\gamma$, відбувається розширення атомних рівнів, що викликане змішуванням енергетичних станів [5]. Відокремлення низькоенергетичних і високоенергетичних підпросторів можливе за умови виконання канонічного перетворення. Забігаючи наперед, доцільним є розділення процедури на два окремих випадки в залежності від типу основного стану (антиферромагнітний або антифероорбітальний). Зауважимо, що через спінову симетрію та через те, що тунелювання d -частинок значно більше впливає на зміни енергії в системі, ми надаємо детальний опис процесів, які відбуваються за наявності стрибків атомів у d стані.

3.4.1 Основний стан з локальними спін-триплетними парами

Класифікація стрибкових процесів

Ми обмежуємося випадком половинного заповнення, тобто $n_g = n_e = 1$, і розкладаємо доданок гамільтоніана (2.47), що відповідає за тунелювання, на процеси, які зменшують енергію ($\mathcal{H}_{t_\gamma}^-$) і ті, що збільшують енергію ($\mathcal{H}_{t_\gamma}^+$), $\mathcal{H}_t = \sum(\mathcal{H}_{t_\gamma}^- + \mathcal{H}_{t_\gamma}^+)$.

- Процеси, що знижують енергію

Розглянемо стрибки g -частинок. З урахуванням спінових ступенів вільності можливі два випадки: тунелювання частинок $g \uparrow$ або $g \downarrow$. Оскільки система є просторово-симетричною, ми надаємо покроковий опис у випадку, якщо частинки стрибають з вузла i до вузла j .

Припускаючи, що зменшення енергії відбувається через стрибок $g \uparrow$, можна описати процес у термінах локальних операторів проектування таким чином:

$$\hat{P}_{ig}\hat{P}_{jg}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ie}\hat{P}_{je}\hat{P}_{ig\downarrow}. \quad (3.35)$$

За визначенням

$$\begin{aligned} \hat{P}_{i\gamma\sigma} &= \hat{n}_{i\gamma\sigma}(1 - \hat{n}_{j\gamma\sigma'}); \\ \hat{P}_{i\gamma} &= \hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\sigma'}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Таким чином, рівняння (3.35) у термінах операторів густини має вигляд

$$\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig\downarrow}. \quad (3.37)$$

У той же час, тунелювання частинки $g\downarrow$ може бути описане як

$$\hat{P}_{ig}\hat{P}_{jg}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{P}_{ie}\hat{P}_{je}\hat{P}_{ig\uparrow} = \hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig\uparrow}. \quad (3.38)$$

Отже, враховуючи перестрибування з вузла j на вузол i , гамільтоніан $H_{t_g}^-$, який описує процеси, що зменшують енергію внаслідок тунелювання g -

частинки, набуває вигляду:

$$\mathcal{H}_{t_g}^- = -t_g \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma} \{ \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \hat{c}_{jg\sigma}^\dagger \hat{c}_{ig\sigma} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig\sigma'} + \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{c}_{ig\sigma}^\dagger \hat{c}_{jg\sigma} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{ig\sigma'} \}. \quad (3.39)$$

• Процеси, що підвищують енергію

Подібним чином можна побудувати гамільтоніан $\mathcal{H}_{t_g}^+$, який описує процеси, що призводять до зростання енергії. Перестрибування частинки $g \uparrow$ з вузла i на вузол j можна виразити таким чином:

$$\hat{P}_{jg\downarrow} \hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ig\uparrow} \hat{P}_{ie} \hat{P}_{je} \hat{P}_{ig} \hat{P}_{jg} = \hat{n}_{jg\downarrow} \hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ig\uparrow} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}. \quad (3.40)$$

Подібним чином, тунелювання частинки $g \downarrow$:

$$\hat{P}_{jg\uparrow} \hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{P}_{ie} \hat{P}_{je} \hat{P}_{ig} \hat{P}_{jg} = \hat{n}_{jg\uparrow} \hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}. \quad (3.41)$$

Отже, вираз для гамільтоніана $\mathcal{H}_{t_g}^+$ у термінах операторів густини має вигляд

$$\mathcal{H}_{t_g}^+ = -t_g \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma} \{ \hat{n}_{jg\sigma'} \hat{c}_{jg\sigma}^\dagger \hat{c}_{ig\sigma} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} + \hat{n}_{jg\sigma} \hat{c}_{jg\sigma'}^\dagger \hat{c}_{ig\sigma'} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \}. \quad (3.42)$$

Підсумовуючи, кінетичну енергію g -частинок можна розділити на два доданки, а саме $\mathcal{H}_{t_g} = \mathcal{H}_{t_g}^- + \mathcal{H}_{t_g}^+$. Беручи до уваги можливість тунелювання e -частинок, гамільтоніан, що описує двоорбітальну модель Фермі-Габбарда, можна представити як

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^+ + \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (3.43)$$

де \mathcal{H}_{int} визначений у рівнянні (2.48).

3.4.2 Канонічне перетворення

Як було зазначено вище, гамільтоніан (3.43) містить доданки, які змішують стани з двох підзон. «Розміщування» піддіапазонів може бути реалізовано

шляхом введення генератора S і повороту базису до нового, в якому доданки \mathcal{H}_t^+ і \mathcal{H}_t^- виключено. За допомогою канонічних перетворень можна отримати ефективний гамільтоніан \mathcal{H}_{eff}

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{eff}} &= e^{iS}\mathcal{H}e^{-iS} = \mathcal{H} + i[S, \mathcal{H}] + \frac{i^2}{2}[S, [S, \mathcal{H}]] + \dots \\ &= \mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^+ + \mathcal{H}_{\text{int}} + i[S, \mathcal{H}_{\text{int}}] + i[S, \mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^+] + \frac{i^2}{2}[S, [S, \mathcal{H}]] + \dots\end{aligned}\quad (3.44)$$

Отже, нашою метою є такий вибір форми генератора S , щоб змішані піддіапазони більше не були поєднані. Оскільки у (3.44) найбільший внесок має другий доданок, він має скасовувати $\mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^+$. Тож щоб побудувати S , потрібно комутувати $\mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^+$ з іншими членами гамільтоніана (2.47).

Розрахуємо комутатор $[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{U_{gg}}]$ для частин гамільтоніанів \mathcal{H}_t^- і \mathcal{H}_t^+ , враховуючи, що $n_g = n_e = 1$.

$$\begin{aligned}[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{U_{gg}}] &= (\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig\downarrow} + \hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig\uparrow})\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow} \\ &\quad - \hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow}(\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig\downarrow} + \hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig\uparrow}) \\ &= U_{gg}\mathcal{H}_{t_g}^-.\end{aligned}\quad (3.45)$$

$$\begin{aligned}[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{U_{gg}}] &= (\hat{n}_{jg\downarrow}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg} + \hat{n}_{jg\uparrow}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg})\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow} \\ &\quad - \hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow}(\hat{n}_{jg\downarrow}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg} + \hat{n}_{jg\uparrow}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ie}\hat{n}_{je}\hat{n}_{ig}\hat{n}_{jg}) \\ &= -U_{gg}\mathcal{H}_{t_g}^+.\end{aligned}\quad (3.46)$$

Розрахунок комутатора $[\mathcal{H}_{t_g}^\pm, \mathcal{H}_{V_{ex}}]$ вимагає дещо іншого підходу. Оскільки взаємодія можлива лише у випадку, коли вузол займають частинки g і e з різними спінами, комутатор може бути спрощено:

$$\begin{aligned}[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{V_{ex}}] &= \mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{V_{ex}} - \mathcal{H}_{V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^- = -\mathcal{H}_{V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^-; \\ [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{V_{ex}}] &= \mathcal{H}_{t_g}^+ \mathcal{H}_{V_{ex}} - \mathcal{H}_{V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^+ = \mathcal{H}_{t_g}^+ \mathcal{H}_{V_{ex}}.\end{aligned}\quad (3.47)$$

Наступним кроком розглянемо дію $\mathcal{H}_{V_{ex}}$ на окремі стани, які мають можливість взаємодії типу спін-фліп,

$$\mathcal{H}_{V_{ex}}|g\uparrow, e\downarrow\rangle = \mathcal{H}_{V_{ex}}|0, 1, 1, 0\rangle = V_{ex}\hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ie\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{c}_{ie\uparrow}|0, 1, 1, 0\rangle \quad (3.48)$$

$$+ V_{ex} \hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ie\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ig\uparrow} \hat{c}_{ie\downarrow} |0, 1, 1, 0\rangle = -V_{ex} |1, 0, 0, 1\rangle,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{V_{ex}} |g \downarrow, e \uparrow\rangle &= \mathcal{H}_{V_{ex}} |1, 0, 0, 1\rangle = V_{ex} \hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ie\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{c}_{ie\uparrow} |1, 0, 0, 1\rangle \quad (3.49) \\ &+ V_{ex} \hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ie\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ig\uparrow} \hat{c}_{ie\downarrow} |1, 0, 0, 1\rangle = -V_{ex} |0, 1, 1, 0\rangle. \end{aligned}$$

З урахуванням (3.48) та (3.49) обчислення комутатора $[\mathcal{H}_{t_g}^\pm, \mathcal{H}_{V_{ex}}]$ дає результат:

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{V_{ex}}] &= \mathcal{H}_{V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^-; \quad (3.50) \\ [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{V_{ex}}] &= -\mathcal{H}_{t_g}^+ \mathcal{H}_{V_{ex}}. \end{aligned}$$

Зауважимо, що усі інші частини гамільтоніана (2.47) комутують з \mathcal{H}_t^- і \mathcal{H}_t^+ , а отже

$$[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_V] = [\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{V-V_{ex}}] = [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_V] = [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{V-V_{ex}}] = 0. \quad (3.51)$$

Тож генератор канонічного перетворення S має мати вигляд:

$$S = -\frac{i}{U_{gg} + V_{ex}} (\mathcal{H}_{t_g}^+ - \mathcal{H}_{t_g}^-). \quad (3.52)$$

Тепер (3.44) може бути спрощене шляхом заміни S на (3.52). Спочатку ми розглянемо комутатор $i[S, \mathcal{H}_{\text{int}}]$. Описані вище розрахунки комутаторів свідчать про те, що $i[S, \mathcal{H}_{\text{int}}] = i[S, \mathcal{H}_{U_{gg}} + \mathcal{H}_V + \mathcal{H}_{V-V_{ex}} + \mathcal{H}_{V_{ex}}] = \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^+ - \mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{U_{gg}} + \mathcal{H}_V + \mathcal{H}_{V-V_{ex}} + \mathcal{H}_{V_{ex}}] = -\mathcal{H}_{t_g}^+ - \mathcal{H}_{t_g}^-$. Це означає, що частини гамільтоніана, які збільшують і зменшують енергію, скасовуються після канонічного перетворення.

Щодо комутатора $i[S, \mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^+]$, його можливо переписати наступним чином:

$$\begin{aligned} i[S, \mathcal{H}_{t_g}^+ + \mathcal{H}_{t_g}^-] &= i[S, \mathcal{H}_{t_g}^+] + i[S, \mathcal{H}_{t_g}^-] \quad (3.53) \\ &= \left[\frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} (\mathcal{H}_{t_g}^+ - \mathcal{H}_{t_g}^-), \mathcal{H}_{t_g}^+ \right] \\ &+ \left[\frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} (\mathcal{H}_{t_g}^+ - \mathcal{H}_{t_g}^-), \mathcal{H}_{t_g}^- \right] = \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^+] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{t_g}^+] + \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] \\
& - \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{t_g}^-] = - \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+ \\
& + \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^+ \mathcal{H}_{t_g}^- + \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^+ \mathcal{H}_{t_g}^- \\
& - \frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} \mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+ = \frac{2}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-].
\end{aligned}$$

З виразу (3.53) видно, що $i[S, \mathcal{H}_{t_g}^+ + \mathcal{H}_{t_g}^-] \propto \frac{t_g^2}{U_{gg} + V_{ex}}$.

Проаналізуємо останній доданок у рівнянні (3.44), а саме $\frac{i^2}{2}[S, [S, \mathcal{H}]]$. Оскільки ми вважаємо, що $t_\gamma \ll U_{\gamma\gamma}$, то достатньо врахувати лише доданки порядку $t_\gamma^2/(U_{\gamma\gamma} + V_{ex})$. Отже,

$$\begin{aligned}
\frac{i^2}{2}[S, [S, \mathcal{H}]] &= \frac{i^2}{2}[S, [S, \mathcal{H}_{t_g}^+ + \mathcal{H}_{t_g}^-] + [S, \mathcal{H}_{U_{gg}} + \mathcal{H}_V + \mathcal{H}_{V-V_{ex}} + \mathcal{H}_{V_{ex}}]] \quad (3.54) \\
&= \frac{i^2}{2}[S, [S, \mathcal{H}_{U_{gg}} + \mathcal{H}_V + \mathcal{H}_{V-V_{ex}} + \mathcal{H}_{V_{ex}}]] = \frac{i}{2}[S, -(\mathcal{H}_{t_g}^+ + \mathcal{H}_{t_g}^-)] \\
&= -\frac{1}{U_{gg} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-].
\end{aligned}$$

Беручи до уваги тунелювання e -частинок, ефективний гамільтоніан можна переписати наступним чином:

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_{int} + \sum_{\gamma} \frac{1}{U_{\gamma\gamma} + V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_\gamma}^+, \mathcal{H}_{t_\gamma}^-]. \quad (3.55)$$

Тож щоб отримати \mathcal{H}_{eff} , слід виконати обчислення $[\mathcal{H}_{t_\gamma}^+, \mathcal{H}_{t_\gamma}^-]$. Зауважимо, що ми не обчислюємо комутатори $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_e}^-]$ і $[\mathcal{H}_{t_e}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-]$, оскільки вони не дозволяють системі залишатися в основному стані.

3.4.3 Розрахунки комутатора $[\mathcal{H}_{t_\gamma}^+, \mathcal{H}_{t_\gamma}^-]$

Як зрозуміло з попереднього підрозділу, одним із основних етапів перетворення Шріффера–Вольфа є обчислення $[\mathcal{H}_{t_\gamma}^+, \mathcal{H}_{t_\gamma}^-]$. Звернемо увагу, що ми знову зосереджуємось лише на процесах для частинок g .

За визначенням комутатора $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] = \mathcal{H}_{t_g}^+ \mathcal{H}_{t_g}^- - \mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+$. Оскільки система знаходиться в основному стані, то $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] = -\mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+$. Варто за-

значити, що ненульовий внесок комутатора виникає лише за умови, що $\mathcal{H}_{t_g}^+$ і $\mathcal{H}_{t_g}^-$ мають два спільні вузли, а саме $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] = \sum_{\langle i,j \rangle} [\mathcal{H}_{t_g,i,j}^+, \mathcal{H}_{t_g,i,j}^-] = -\mathcal{H}_{t_g,i,j}^- \mathcal{H}_{t_g,i,j}^+$.

Розглянемо чотири можливі варіанти, враховуючи, що збільшення енергії відбувається, коли g частинка перескакує з вузла i на вузол j . Для кращого розуміння кожен випадок супроводжується ескізами процесів тунелювання (див. Рис. 3.11 – Рис. 3.14).

- $g \uparrow$ частинка тунелює та повертається

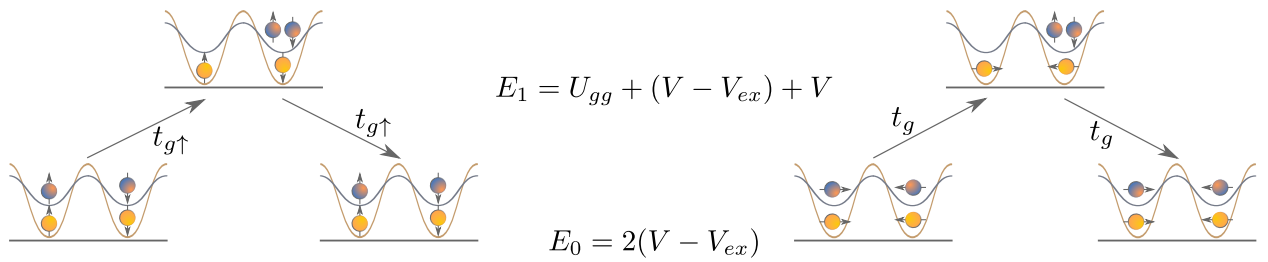


Рис. 3.11: Для можливого основного стану, ілюстрація тунелювання $g \uparrow$ частинки з вузла i на вузол j , а також її повернення.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{t_{g\uparrow}}^- \mathcal{H}_{t_{g\uparrow}}^+ &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger \hat{c}_{jg\uparrow} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{jg\downarrow} \hat{n}_{jg\downarrow} \hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ig\uparrow} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \quad (3.56) \\
 &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} (1 - \hat{n}_{jg\uparrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
 &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} (1 - \hat{n}_{jg\uparrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}
 \end{aligned}$$

- $g \downarrow$ частинка тунелює та повертається

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{t_{g\downarrow}}^- \mathcal{H}_{t_{g\downarrow}}^+ &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger \hat{c}_{jg\downarrow} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{jg\uparrow} \hat{n}_{jg\uparrow} \hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \quad (3.57) \\
 &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow} (1 - \hat{n}_{jg\downarrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
 &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow} (1 - \hat{n}_{jg\downarrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}
 \end{aligned}$$

- Тунелювання $g \uparrow$ частинки та повернення $g \downarrow$ частинки

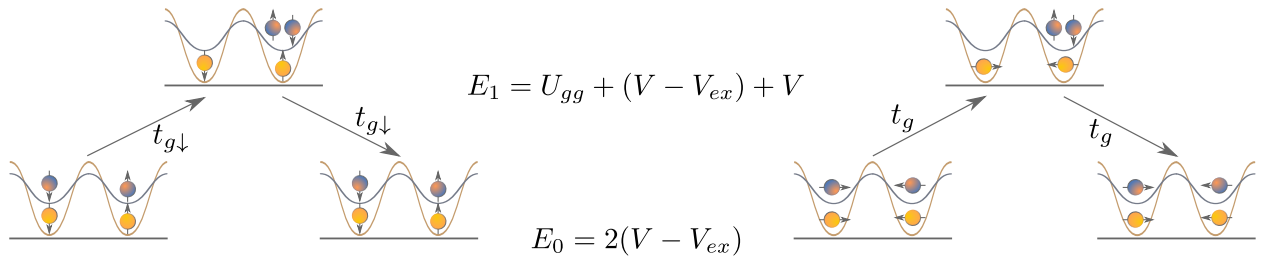


Рис. 3.12: Для можливого основного стану, ілюстрація тунелювання $g \downarrow$ частинки з вузла i на вузол j , а також її повернення.

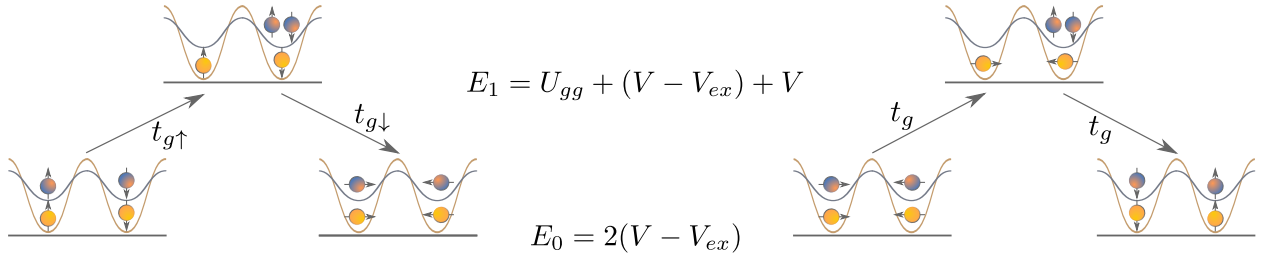


Рис. 3.13: Для можливого основного стану, ілюстрація тунелювання $g \uparrow$ частинки з вузла i на вузол j та наступне тунелювання $g \downarrow$ частинки на вузол i .

$$\mathcal{H}_{t_{g\downarrow}}^- \mathcal{H}_{t_{g\uparrow}}^+ = t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger \hat{c}_{jg\downarrow} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{jg\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} \hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger \hat{c}_{ig\uparrow} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \quad (3.58)$$

За визначенням, у термінах операторів народження та знищення, спінові оператори виглядають наступним чином:

$$\begin{aligned} \hat{S}_{ig}^- &= \hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger \hat{c}_{jg\uparrow}; \\ \hat{S}_{ig}^+ &= \hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger \hat{c}_{jg\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Тож вираз може бути переписаний як

$$\mathcal{H}_{t_{g\downarrow}}^- \mathcal{H}_{t_{g\uparrow}}^+ = -t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{S}_{ig}^- \hat{S}_{jg}^+ \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} = -t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^- \hat{S}_{jg}^+ \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}. \quad (3.60)$$

- **Тунелювання $g \downarrow$ частинки та повернення $g \uparrow$ частинки**

$$\mathcal{H}_{t_{g\uparrow}}^- \mathcal{H}_{t_{g\downarrow}}^+ = t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{jg} \hat{n}_{ig} \hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger \hat{c}_{jg\uparrow} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{jg\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow} \hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \quad (3.61)$$

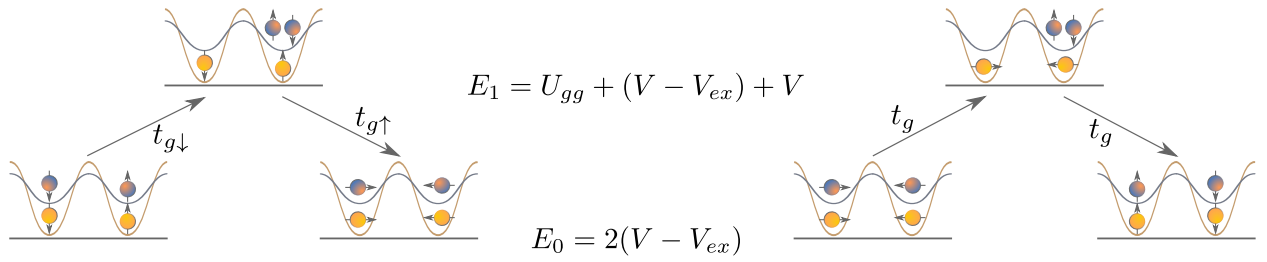


Рис. 3.14: Для можливого основного стану, ілюстрація тунелювання $g \downarrow$ частинки з вузла i на вузол j та наступне тунелювання $g \uparrow$ частинки на вузол i .

або

$$\mathcal{H}_{t_{g\uparrow}}^- \mathcal{H}_{t_{g\downarrow}}^+ = -t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^+ \hat{S}_{jg}^- \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}. \quad (3.62)$$

Підсумовуючи, комутатор $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-]$ має вигляд

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{S}_{ig}^+ \hat{S}_{jg}^- + \hat{S}_{ig}^- \hat{S}_{jg}^+) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&- t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} (1 - \hat{n}_{jg\uparrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&- t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow} (1 - \hat{n}_{jg\downarrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{S}_{ig}^+ \hat{S}_{jg}^- + \hat{S}_{ig}^- \hat{S}_{jg}^+) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} - t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&+ t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\uparrow} + \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\downarrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}.
\end{aligned} \quad (3.63)$$

Для подальшого спрощення розглянемо вираз $t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^z \hat{S}_{jg}^z \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}$,

де $\hat{S}_{ig}^z = \frac{1}{2}(\hat{n}_{ig\uparrow} - \hat{n}_{ig\downarrow})$:

$$\begin{aligned}
t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^z \hat{S}_{jg}^z \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} &= \frac{t_g^2}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} - \hat{n}_{ig\downarrow}) (\hat{n}_{jg\uparrow} - \hat{n}_{jg\downarrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&= \frac{t_g^2}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\uparrow} + \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\downarrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&- \frac{t_g^2}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} + \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}. \quad (3.64)
\end{aligned}$$

Тож вираз (3.63) приймає вигляд

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{S}_{ig}^+ \hat{S}_{jg}^- + \hat{S}_{ig}^- \hat{S}_{jg}^+) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&- t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} + 4t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^z \hat{S}_{jg}^z \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&+ t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} + \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow}) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}.
\end{aligned} \tag{3.65}$$

Як можна побачити,

$$\begin{aligned}
2t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_{ig} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{jg} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{S}_{ig}^+ \hat{S}_{jg}^- + \hat{S}_{ig}^- \hat{S}_{jg}^+) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&+ 4t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^z \hat{S}_{jg}^z \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}.
\end{aligned} \tag{3.66}$$

У свою чергу,

$$\begin{aligned}
&2t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{ig}^z \hat{S}_{jg}^z \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} + t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{jg\downarrow} + \hat{n}_{ig\downarrow} \hat{n}_{jg\uparrow} - 1) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} [(\hat{n}_{ig\uparrow} + \hat{n}_{ig\downarrow})(\hat{n}_{jg\uparrow} + \hat{n}_{jg\downarrow}) - 2] \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg} \\
&= -2t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{4} \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je} \hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}.
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Враховуючи все, кінцевий вираз для $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-]$ має вигляд:

$$[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] = 2t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\mathbf{S}}_{ig} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{jg} - \frac{\hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}}{4} \right) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je}. \tag{3.68}$$

Як зазначалося вище, ми розглядали лише випадок, коли перший стрибок був з вузла i на вузол j . Отже, включаючи стрибки від j до i , можна отримати

$$[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{t_g}^-] = 4t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\mathbf{S}}_{ig} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{jg} - \frac{\hat{n}_{ig} \hat{n}_{jg}}{4} \right) \hat{n}_{ie} \hat{n}_{je}. \tag{3.69}$$

Повертаючись до форми ефективного гамільтоніана \mathcal{H}_{eff} (3.55) і беручи

до уваги тунелювання e -частинок, ми отримуємо

$$\mathcal{H}_{eff}^{AFM} = \sum_{\gamma \neq \gamma'} \frac{4t_\gamma^2}{U_{\gamma\gamma} + V_{ex}} \left(\hat{\mathbf{S}}_{i\gamma} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j\gamma'} - \frac{\hat{n}_{i\gamma}\hat{n}_{j\gamma'}}{4} \right) \hat{n}_{i\gamma'}\hat{n}_{j\gamma'} + \mathcal{H}_{int}, \quad (3.70)$$

де \mathcal{H}_{int} визначено у (2.48).

3.4.4 Основний стан з парами атомів у станах g або e на вузлі

Повторимо перетворення для системи з антифероорбітальним упорядкуванням. Заповнення ґратки, яке нас цікавить, залишається половинним ($n_g = n_e = 1$). Оскільки більшість кроків збігається з попереднім випадком, здебільшого ми будемо зосереджені лише на тих моментах, які відрізняються від 3.4.1.

• Процеси, що знижують енергію

Дві спінові і дві орбітальні ступені вільності обумовлюють чотири можливі варіанти стрибків. Усі вони в термінах локальних операторів проектування мають вигляд:

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger\hat{c}_{jg\downarrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{jg\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{ig\downarrow}^\dagger\hat{c}_{jg\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow}\hat{n}_{je\uparrow}\hat{n}_{je\downarrow}, \quad (3.71)$$

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{je\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ie\downarrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{ie\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow} = \hat{c}_{je\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ie\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\uparrow}, \quad (3.72)$$

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger\hat{c}_{jg\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{jg\uparrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{ig\uparrow}^\dagger\hat{c}_{jg\uparrow}\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\uparrow}\hat{n}_{je\downarrow}, \quad (3.73)$$

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{je\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ie\uparrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{ie\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{je\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ie\uparrow}\hat{n}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\downarrow}. \quad (3.74)$$

Узагальнюючи всі згадані вище випадки та включаючи просторово-симетричні конфігурації, можна записати гамільтоніан $H_{t_\gamma}^-$

$$H_{t_\gamma}^- = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma} \{ \hat{c}_{i\gamma\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma\sigma} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'} + \hat{c}_{j\gamma\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma\sigma} \hat{n}_{i\gamma'\sigma} \hat{n}_{i\gamma'\sigma'} \}. \quad (3.75)$$

• Процеси, що підвищують енергію

Процеси, які збільшують енергію системи, є зворотними до тих, що описані рівняннями (3.71) - (3.74). Точніше кажучи, їх можна записати

ЯК

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{jg\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{jg\downarrow}^\dagger\hat{c}_{ig\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow}\hat{n}_{je\uparrow}\hat{n}_{je\downarrow}, \quad (3.76)$$

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{ie\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{c}_{ie\downarrow}^\dagger\hat{c}_{je\downarrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{ie\downarrow}^\dagger\hat{c}_{je\downarrow}\hat{n}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\uparrow}, \quad (3.77)$$

$$\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{jg\uparrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{jg\uparrow}^\dagger\hat{c}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\uparrow}\hat{n}_{je\downarrow}, \quad (3.78)$$

$$\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{ie\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow}\hat{c}_{ie\uparrow}^\dagger\hat{c}_{je\uparrow}\hat{P}_{ig\uparrow}\hat{P}_{ig\downarrow}\hat{P}_{je\uparrow}\hat{P}_{je\downarrow} = \hat{c}_{ie\uparrow}^\dagger\hat{c}_{je\uparrow}\hat{n}_{ig\uparrow}\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\downarrow}. \quad (3.79)$$

Таким чином, можна визначити гамільтоніан, що описує процеси, які підвищують енергію,

$$H_{t_\gamma}^+ = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma} \{ \hat{c}_{j\gamma\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma\sigma} \hat{n}_{j\gamma'\sigma} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'} + \hat{c}_{i\gamma\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma\sigma} \hat{n}_{i\gamma'\sigma} \hat{n}_{i\gamma'\sigma'} \}. \quad (3.80)$$

Рівняння (3.75), (3.80) і (2.48) утворюють гамільтоніан двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда (3.43).

Аналогічно до випадку AFM, для розділення підзон необхідно побудувати генератор канонічного перетворення S . Нижче ми знову зосереджуємо свою увагу на процесах, пов'язаних з тунелюванням g -частинок, у той час як узагальнення для e -частинок буде зроблене наприкінці перетворень. Тож комутаційні співвідношення для доданків $\mathcal{H}_{t_g}^-$ та $\mathcal{H}_{t_g}^+$ набувають вигляду

$$[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{U_{gg}}] = -U_{gg} \mathcal{H}_{t_g}^-; \quad [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{U_{gg}}] = U_{gg} \mathcal{H}_{t_g}^+; \quad (3.81)$$

$$[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_V] = V \mathcal{H}_{t_g}^-; \quad [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_V] = -V \mathcal{H}_{t_g}^+;$$

$$[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{V-V_{ex}}] = (V - V_{ex}) \mathcal{H}_{t_g}^-; \quad [\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{V-V_{ex}}] = -(V - V_{ex}) \mathcal{H}_{t_g}^+.$$

Зауважимо, що обчислення комутаторів $[\mathcal{H}_{t_g}^-, \mathcal{H}_{V_{ex}}]$ і $[\mathcal{H}_{t_g}^+, \mathcal{H}_{V_{ex}}]$ відбуваються аналогічно до випадку AFM, тобто як у (3.47)–(3.50). У результаті генератор S може бути побудований наступним чином:

$$S = -\frac{i}{2V - U_{gg} - V_{ex}} (H_{t_g}^+ - H_{t_g}^-). \quad (3.82)$$

Як можна побачити, вираз є схожим на рівняння (3.52) за винятком множника. Це означає, що запис ефективного гамільтоніана може бути спро-

щено до вигляду

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{eff} &= \mathcal{H}_{int} + \sum_{\gamma} \frac{1}{2V - U_{\gamma\gamma} - V_{ex}} [\mathcal{H}_{t_{\gamma}}^{+}, \mathcal{H}_{t_{\gamma}}^{-}] \\ &= \mathcal{H}_{int} - \sum_{\gamma} \frac{1}{2V - U_{\gamma\gamma} - V_{ex}} \mathcal{H}_{t_{\gamma},ij}^{-} \mathcal{H}_{t_{\gamma},ij}^{+}.\end{aligned}\quad (3.83)$$

Варто зазначити, що енергія як основного, так і збудженого станів не залежить від спіну g -частинки. Тому для спрощення ми опускаємо стрілки на Рис. 3.15.

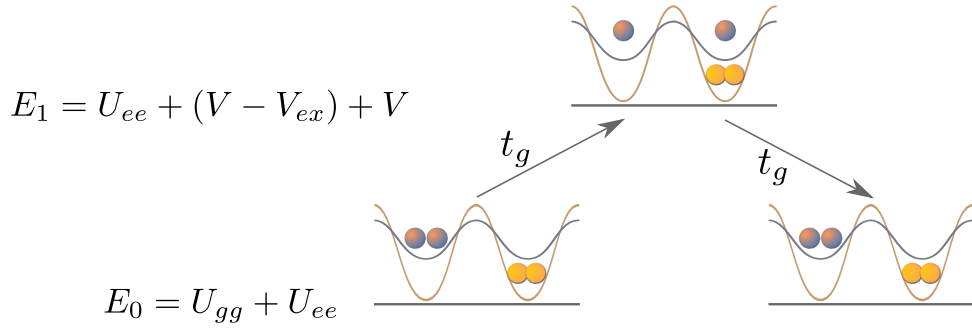


Рис. 3.15: Для можливого основного стану з антифероорбітальним упорядкуванням, ілюстрація тунелювання g частинки з вузла i на вузол j та її повернення.

Використовуючи явну форму $\mathcal{H}_{t_g}^{-}$ (3.75) і $\mathcal{H}_{t_g}^{+}$ (3.80), стрибок g -частинки зі спіном $\sigma = \uparrow$ з вузла i на вузол j і назад набуває вигляду

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{t_g}^{-} \mathcal{H}_{t_g}^{+} &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{ig\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{jg\downarrow} \hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{je\uparrow} \hat{n}_{je\downarrow} \hat{c}_{jg\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{je\uparrow} \hat{n}_{je\downarrow} \\ &= t_g^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{ig\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{jg\downarrow} \hat{c}_{jg\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{ig\downarrow} \hat{n}_{ig\uparrow} \hat{n}_{je\uparrow} \hat{n}_{je\downarrow}.\end{aligned}\quad (3.84)$$

Отже, комутатор для g -частинки з довільною проекцією спіну має вигляд

$$\begin{aligned}[\mathcal{H}_{t_g}^{-}, \mathcal{H}_{t_g}^{+}] &= -\frac{t_g^2}{2V - U_{gg} - V_{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma} (\hat{c}_{ig\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{jg\sigma'} \hat{c}_{jg\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{ig\sigma'} \hat{n}_{ig\sigma} \hat{n}_{je\sigma} \hat{n}_{je\sigma'}) \\ &\quad + \hat{c}_{ig\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{jg\sigma} \hat{c}_{jg\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{ig\sigma} \hat{n}_{ig\sigma'} \hat{n}_{je\sigma} \hat{n}_{je\sigma'}) \\ &= -\frac{t_g^2}{2V - U_{gg} - V_{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma} (\hat{n}_{ig\sigma'} (1 - \hat{n}_{jg\sigma'}) \hat{n}_{ig\sigma} \hat{n}_{je\sigma} \hat{n}_{je\sigma'})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \hat{n}_{ig\sigma}(1 - \hat{n}_{jg\sigma})\hat{n}_{ig\sigma'}\hat{n}_{je\sigma}\hat{n}_{je\sigma'} \\
& = -\frac{t_g^2}{2V - U_{gg} - V_{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} \hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\sigma'}\hat{n}_{j\gamma'\sigma}\hat{n}_{j\gamma'\sigma'}. \quad (3.85)
\end{aligned}$$

Для подальшого перетворення необхідно ввести оператори \hat{T}_{ig}^z та \hat{T}_{ie}^z , а саме

$$\begin{aligned}
\hat{T}_{i\uparrow}^z &= \frac{1}{2}(\hat{n}_{ig\uparrow} - \hat{n}_{ie\uparrow}), \\
\hat{T}_{i\downarrow}^z &= \frac{1}{2}(\hat{n}_{ig\downarrow} - \hat{n}_{ie\downarrow}). \quad (3.86)
\end{aligned}$$

Розглянемо наступний вираз:

$$\begin{aligned}
& 4 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{T}_{i\uparrow}^z \hat{T}_{j\uparrow}^z (\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\downarrow} + \hat{n}_{ie\downarrow}\hat{n}_{jg\downarrow}) \quad (3.87) \\
& = \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{ig\uparrow} - \hat{n}_{ie\uparrow})(\hat{n}_{jg\uparrow} - \hat{n}_{je\uparrow})\hat{n}_{ig\downarrow}\hat{n}_{je\downarrow} + (\hat{n}_{ie\uparrow} - \hat{n}_{ig\uparrow})(\hat{n}_{je\uparrow} - \hat{n}_{jg\uparrow})\hat{n}_{ie\downarrow}\hat{n}_{jg\downarrow} \\
& = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\gamma' \neq \gamma} (\hat{n}_{i\gamma\uparrow} - \hat{n}_{i\gamma'\uparrow})(\hat{n}_{j\gamma\uparrow} - \hat{n}_{j\gamma'\uparrow})\hat{n}_{i\gamma\downarrow}\hat{n}_{j\gamma'\downarrow} \\
& = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\gamma' \neq \gamma} [(\hat{n}_{i\gamma\uparrow}\hat{n}_{j\gamma\uparrow} + \hat{n}_{i\gamma'\uparrow}\hat{n}_{j\gamma'\uparrow})\hat{n}_{i\gamma\downarrow}\hat{n}_{j\gamma'\downarrow} - (\hat{n}_{i\gamma\uparrow}\hat{n}_{j\gamma'\uparrow} + \hat{n}_{i\gamma'\uparrow}\hat{n}_{j\gamma\uparrow})\hat{n}_{i\gamma\downarrow}\hat{n}_{j\gamma'\downarrow}] \\
& = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\gamma' \neq \gamma} [2\hat{n}_{i\gamma\uparrow}\hat{n}_{j\gamma\uparrow}\hat{n}_{i\gamma\downarrow}\hat{n}_{j\gamma'\downarrow} - 2\hat{n}_{i\gamma\uparrow}\hat{n}_{j\gamma'\uparrow}\hat{n}_{i\gamma\downarrow}\hat{n}_{j\gamma'\downarrow}].
\end{aligned}$$

Беручи до уваги всі ступені вільності, у найзагальнішому випадку рівняння (3.87) можна переписати, як показано нижче

$$\begin{aligned}
2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} \hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\sigma'}\hat{n}_{j\gamma'\sigma}\hat{n}_{j\gamma'\sigma'} &= 2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} \hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{j\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\sigma'}\hat{n}_{j\gamma'\sigma'} \\
&- 4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} \hat{T}_{i\sigma}^z \hat{T}_{j\sigma'}^z \hat{n}_{i\gamma\sigma'}\hat{n}_{j\gamma'\sigma'}. \quad (3.88)
\end{aligned}$$

Це дозволяє нам замінити один із членів у виразі $[\mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+]$:

$$[\mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+] = -\frac{2t_g^2}{2V - U_{gg} - V_{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} (\hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{j\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\sigma'}\hat{n}_{j\gamma'\sigma'} \quad (3.89)$$

$$\begin{aligned}
& - 4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} \hat{T}_{i\sigma}^z \hat{T}_{j\sigma'}^z \hat{n}_{i\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'} \\
& = \frac{4t_g^2}{2V - U_{gg} - V_{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} (\hat{T}_{i\sigma}^z \hat{T}_{j\sigma'}^z - \frac{1}{2} \hat{n}_{i\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'}) \hat{n}_{i\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'}.
\end{aligned}$$

Зауважимо, що другим доданком можна знехтувати, оскільки він описує конфігурації з $n_\gamma > 1$, тому

$$[\mathcal{H}_{t_g}^- \mathcal{H}_{t_g}^+] = \frac{4t_g^2}{2V - U_{gg} - V_{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma' \neq \sigma, \gamma' \neq \gamma} \hat{T}_{i\sigma}^z \hat{T}_{j\sigma'}^z \hat{n}_{i\gamma\sigma'} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'} \quad (3.90)$$

Усі кроки, описані вище, є актуальними і для випадку тунелювання частинок у стані e . Отже, ефективний гамільтоніан для основного стану з антифероорбітальним упорядкуванням набуває вигляду

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{AFO}} & = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma \neq \sigma', \gamma \neq \gamma'} \frac{4t_\gamma^2}{2V - U_{\gamma\gamma} - V_{\text{ex}}} \hat{T}_{i\sigma}^z \hat{T}_{j\sigma'}^z \hat{n}_{i\gamma\sigma} \hat{n}_{j\gamma'\sigma'} \\
& + \mathcal{H}_{\text{int}}.
\end{aligned} \quad (3.91)$$

РОЗДІЛ 4

Результати

Дана робота зосереджена на дослідженнях охолоджених квантових газів лужноземельних та їм подібних атомів, а саме ферміонних ізотопів атомів ^{87}Sr , ^{171}Yb та ^{173}Yb , що перебувають у двох орбітальних станах $|g\rangle$, $|e\rangle$ та двох спінових станах $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ проєкції спіну ядра. У Таблиці 2 наведені експериментально отримані амплітуди s -хвильового розсіювання для внутрішньо- та міжорбітальних взаємодій усіх трьох ізотопів [26, 36, 85–89]. Варто відзначити, що для різних ізотопів притаманна різна ієрархія

	a_{gg}	a_{ee}	a_{eg}^+	a_{eg}^-	Refs.
^{173}Yb	199.4	306.2	1878	220	[36, 86, 89]
^{171}Yb	≈ 0	104	240	389	[86–88]
^{87}Sr	96.2	176.0	169	68	[26, 85]

Табл. 2: Довжини s -хвильового розсіювання (внутрішньо- та міжорбітального) ферміонних лужноземельних та їм подібних атомів в одиницях радіуса Бора a_0 з посиланнями на джерела.

амплітуд взаємодій (значення a_{eg}^+ та a_{eg}^- різняться для кожного типу атомів). Ураховуючи таку особливість, кожна система атомів є унікальною та важливою для дослідження різних фаз у задачах багатьох частинок.

У загальному випадку близьке до резонансу електромагнітне поле оптичного діапазону з довжиною хвилі λ утворює оптичну ґратку та по-різному взаємодіє з атомами в станах $|g\rangle$ і $|e\rangle$. Саме тому створена ґратка є залежною від стану (SDL). Для трьох ізотопів, згаданих раніше, можна визначити відповідну “магічну” довжину хвилі λ_m , за якої атоми, що знаходяться в двох різних станах, мають однакову поляризованість – глибина ґратки стає однаковою для обох орбітальних компонентів. Зокрема, ми вважаємо, що ґратка з помірною амплітудою створена вздовж одного просторового напрямку, тоді як в поперечних напрямках діють сильні обмеження на рух атомів. У зв’язку з цим, систему можна розглядати як квазіодно-вимірну. Для визначеності припустимо, що станозалежну ґратку утворено вздовж осі x з амплітудою $V_x = 5E_r$, де $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$ – енергія віддачі атома з масою m , \hbar – стала Планка, та $k = 2\pi/\lambda$. Усі розрахунки, наве-

дені у роботі, відповідають поляризованості $p = 2.1$ (для ізотопів ітербію $\lambda_{\text{SDL}} \approx 690$ нм [90] стронцію – $\lambda_{\text{SDL}} \approx 739$ нм [91]). У інших просторових напрямках $V_y = V_z = 18E_r$ (з $\lambda_m \approx 759$ нм [92] та $\lambda_m \approx 813$ нм [93] для ізотопів Yb і Sr, відповідно).

Варто відзначити, що нижче ми зосереджуємось на однорідних (але скінченних) системах, нехтуючи всіма ефектами, що походять від зовнішнього потенціалу пастки. Їх можна включити в теоретичний формалізм, але аналіз ефектів, пов'язаних з додатковими неоднорідностями, виходить за рамки поточного дослідження.

У межах наближення сильного зв'язку система може бути описана за допомогою двоорбітальної моделі Фермі-Габбарда (2.47), (2.48). Параметри Габбарда, отримані за допомогою рівнянь (2.43), (2.44), (2.46) та (2.45), наведені в Таблиці 3. Звернемо увагу, що амплітуди міжорбітальної взаємодії

	t_e	U_{gg}	U_{ee}	V	V_{ex}
^{173}Yb	0.2591	9.238	18.13	37.031	25.646
^{171}Yb	0.2591	0	6.157	15.005	-3.363
^{87}Sr	0.2591	4.16	9.727	5.724	2.439

Табл. 3: Амплітуди параметрів Габбарда для атомів ^{173}Yb , ^{171}Yb та ^{87}Sr в одиницях амплітуди тунелювання t_g .

V та V_{ex} для ізотопів атому ^{173}Yb додатково перенормовані через те, що «чиста» амплітуда U_{eg}^+ перевищує заборонену зону (див. також працю [90] для деталей), тоді як для інших атомів всі амплітуди є помірними і отримані безпосередньо за допомогою рівнянь (2.43), (2.44), (2.46) та (2.45).

Ієрархія амплітуд взаємодії у випадку атомарного газу, складеного з ізотопів ^{173}Yb , є подібною до ієрархій, використаних в останніх теоретичних дослідженнях (підхід динамічної теорії середнього поля) квазі-двовимірних та тривимірних геометрій станозалежних ґраток [90, 94].

4.1 Усереднені за спіном локальні величини

У зв'язку з обчислювальними обмеженнями, зазначеними у розділі 3.1, усі розрахунки, проведені методом точної діагоналізації, були виконані для системи з розміром $L = 4$ або $L = 5$. Незважаючи на обмежений розмір, результати вже вказують на кілька важливих особливостей досліджуваної

системи. Залежно від співвідношення густин g та e атомів у ґратці, різні кореляції можуть бути ефективно посилені у секторі густини (або «густина заряду», якщо використовувати аналогію до твердотільних реалізацій), спінового та орбітального станів. Метод точної діагоналізації також дозволяє проводити прямий аналіз за умови скінченних температур та контролює результати, отримані методом матричних множників.

Для того, щоб знайти компроміс між часом обчислення та можливістю охопити всі можливі характеристики, притаманні системі, усі розрахунки, отримані за допомогою MPS, відповідають системі з розміром $L = 20$ ($D = 260$). Варто відзначити, що обчислення були виконані за фіксованої кількості частинок g та e . Це було реалізовано шляхом використання відповідних множників Лагранжа під час мінімізації енергії основного стану гамільтоніана (3.16). Зауважимо, що надалі ми зосереджуємося здебільшого на спін-збалансованих конфігураціях із відповідною умовою $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$ для загальної кількості частинок $N_{\sigma} = \sum_{i\gamma} n_{i\gamma\sigma}$ в кожному спіновому стані σ . Варто зазначити, що для непарної загальної кількості $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ атомів у системі, N_{\uparrow} встановлюється як округлення $N/2$ вниз до найближчого цілого значення.

Ми починаємо наш аналіз з локальної подвійної заселеності D_{gg} вузлів атомами у стані g , яку можна розглядати як глобальне спостережуване, легко доступне в експериментах з ультрахолодними багатокомпонентними ферміонними сумішами в ґратці (див. [32]). За визначенням,

$$D_{gg} = \frac{1}{L} \sum_i \langle n_{ig\uparrow} n_{ig\downarrow} \rangle. \quad (4.1)$$

Як ми побачимо нижче, D_{gg} можна розглядати як добрий індикатор виникнення магнітних кореляцій між найближчими вузлами ґратки у газах атомів ^{173}Yb або ^{87}Sr , тоді як для ^{171}Yb такої відповідності немає.

Залежність подвійного заповнення вузлів атомами g від густин n_g та n_e зображена на Рис. 4.1. Принцип заборони Паулі накладає обмеження на подвійне заповнення $D_{gg} \leq 1$ та густини $n_{g,e} \leq 2$. Варто відзначити, що ми додатково обмежуємо діапазон густини атомів e , $n_e \leq 1$. Це пов'язано з експериментальними обмеженнями, а саме зі збільшенням зіткнень із втратами з подальшим зростанням n_e [34]. Неважко помітити, що для ізотопу

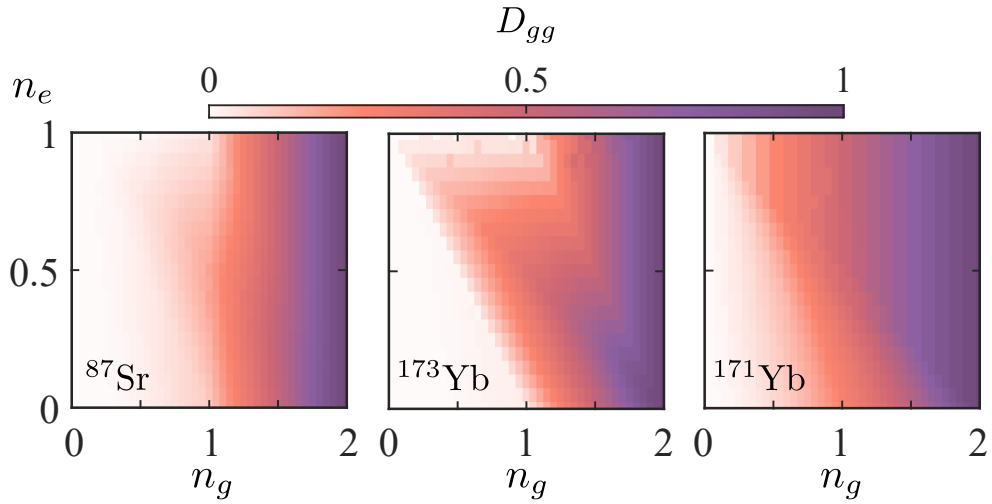


Рис. 4.1: Усереднене за вузлами подвійне заповнення g атомів D_{gg} в залежності від густини атомів у станах g (вісь x) і e (вісь y) для трьох ізотопів: ^{87}Sr , ^{173}Yb і ^{171}Yb (зліва направо) і $L = 20$ вузлів. Амплітуда D_{gg} відображається кольором.

^{173}Yb при $n_g \approx n_e \approx 1$ наявне сильне пригнічення значень D_{gg} . Причиною такої поведінки полягає в ієрархії взаємодій на вузлі. У порівнянні з ^{171}Yb , у якого внутрішньоорбітальна амплітуда взаємодії для атомів g дорівнює нулю ($U_{gg} \approx 0$), у ^{173}Yb подвійно зайняті вузли значно збільшують енергію основного стану системи. Спостережуване зменшення D_{gg} в околі $n_g \approx n_e \approx 1$ також пов'язане з посиленням магнітних кореляцій на сусідніх вузлах (див. розділ 4.2). Аналогічно до ^{173}Yb , у газі атомів стронцію-87 можна спостерігати якісно подібну поведінку подвійної заселеності.

На Рис.4.2 зображена модуляція хвилі густини, аналіз якої був отриманий шляхом усередненої за вузлами амплітуди, тобто

$$\Delta n = \frac{1}{L} \sum_{i,\gamma} |\langle n_{i\gamma} \rangle - n_\gamma|. \quad (4.2)$$

Ця величина демонструє іншу поведінку в порівнянні з подвійним заповненням. Як ми побачимо нижче, її посилення можна використовувати як додатковий індикатор орбітальних кореляцій (^{171}Yb та ^{173}Yb), тоді як її пригнічення можна віднести до появи антиферомагнітних кореляцій в режимах ізолятора Мотта з $n = 1$ або $n = 2$ (^{87}Sr та ^{173}Yb).

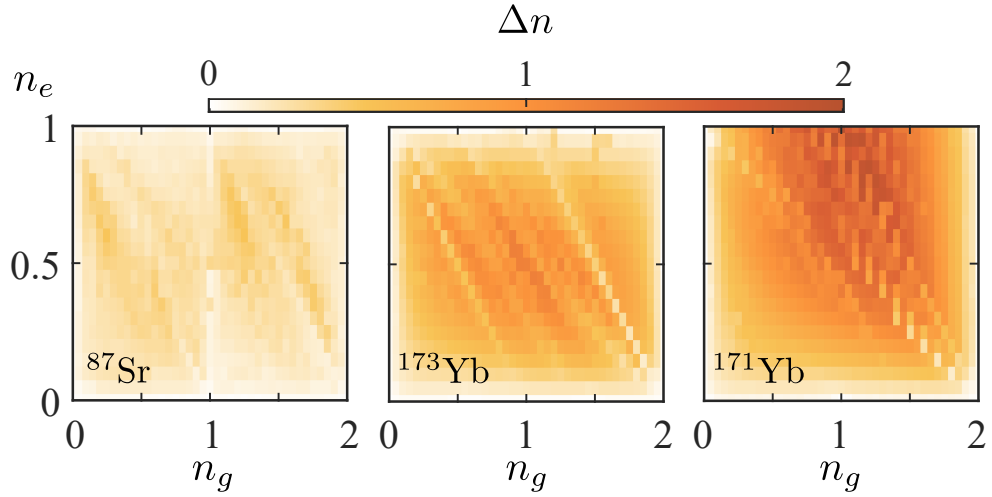


Рис. 4.2: Усереднена за вузлами модуляція густини Δn в залежності від густини атомів у станах g (вісь x) і e (вісь y) для трьох ізотопів: ^{87}Sr , ^{173}Yb і ^{171}Yb (зліва направо) і $L = 20$ вузлів. Амплітуда Δn відображається кольором.

4.2 Спінові та орбітальні корелятори між найближчими вузлами ґратки

У цьому підрозділі ми обговоримо особливості поведінки кореляторів між найближчими вузлами, тобто кореляторів типу спін-спін $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ та орбіталь-орбіталь $\langle \hat{T}_i^z \hat{T}_{i+1}^z \rangle$. Локальний спіновий оператор містить внески обох орбітальних станів $\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_{ig} + \mathbf{S}_{ie}$, де орбітальні компоненти $\mathbf{S}_{i\gamma} = (\hat{S}_{i\gamma}^x, \hat{S}_{i\gamma}^y, \hat{S}_{i\gamma}^z)$ виражають у термінах звичайних матриць Паулі зі спіном $1/2$, а саме як

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

для $r = (x, y, z)$. У свою чергу, орбітальний корелятор визначають як

$$\hat{T}_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\tau=\uparrow,\downarrow} c_{i\gamma\tau}^\dagger \sigma_{\gamma\gamma'}^z c_{i\gamma'\tau}. \quad (4.4)$$

На Рис. 4.3 наведено залежність усереднених за вузлами спінових кореляторів $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ та $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ від густин g та e атомів. Можна помітити, що у випадку ^{173}Yb корелятор $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ вказує на антиферомагнітне впорядкування вздовж діагоналей $n_g + n_e = 1$ та $n_g + n_e = 2$ (конфігурації AFM-1 та AFM-2 відповідно, див. також Рис. 4.4), що характеризується від'ємним значенням $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$. Варто зауважити, що саме в цих режи-

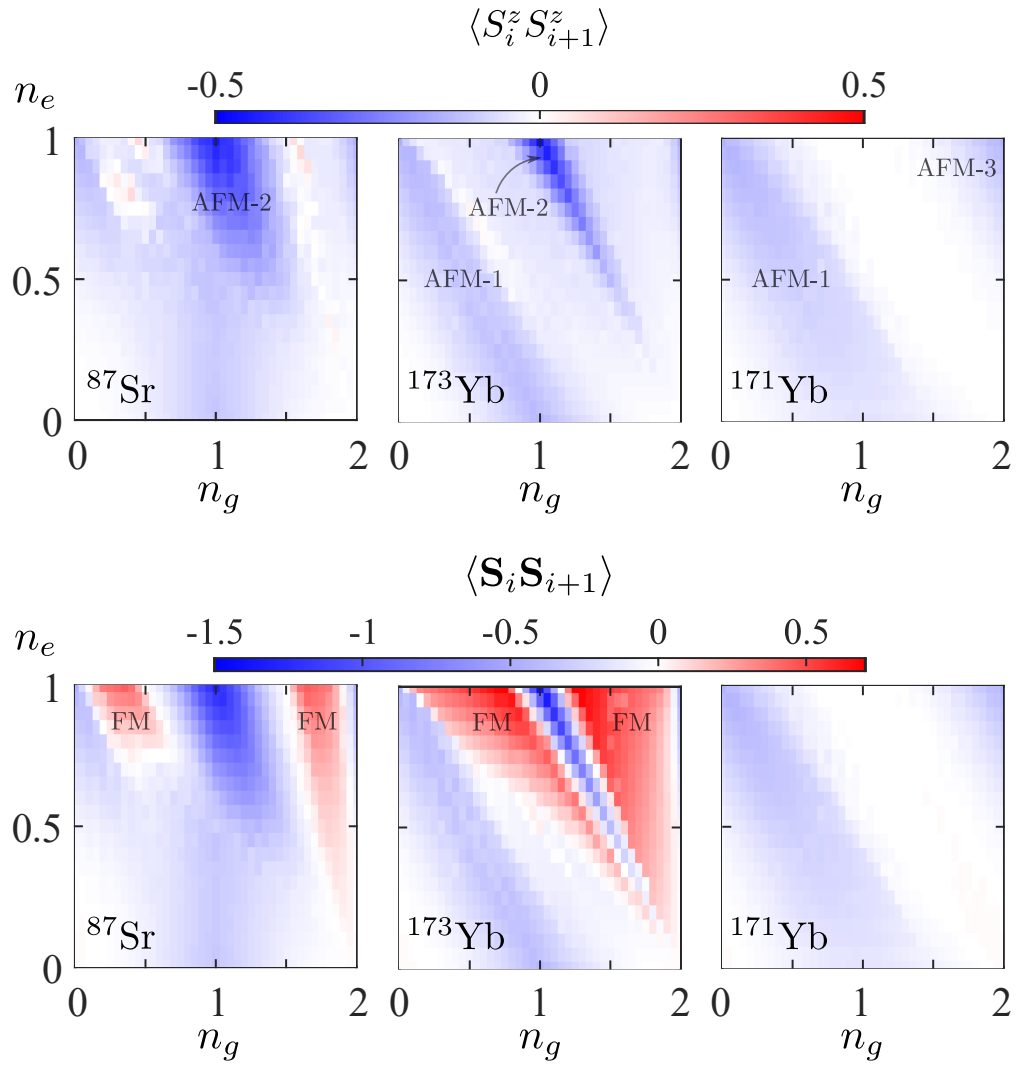


Рис. 4.3: Залежності усереднених за вузлами спін-спін кореляторів (значення відображаються кольором), $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ (верхній ряд) і $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ (нижній ряд), від середнього заповнення n_g і n_e для трьох ізотопів: ^{87}Sr , ^{173}Yb і ^{171}Yb (зліва направо), отримані за допомогою підходу MPS при $L = 20$.

мах ми спостерігаємо сильне пригнічення подвійного заповнення D_{gg} (див. Рис. 4.1). У свою чергу, система, що складена з атомів ^{87}Sr , демонструє слабші АФМ-кореляції вздовж тих самих діагоналей, що й ^{173}Yb , але має подібне пригнічення D_{gg} сигналу. Це пов'язано з меншими значеннями параметрів взаємодії (див. Таблицю 3). З першого погляду, може здаватись дещо несподіваним, що газ з атомів ^{171}Yb з антиферромагнітним зв'язком Гунда ($V_{\text{ex}} < 0$, див. Таблицю 3) не демонструє жодних АФМ-кореляцій при $n_g \approx n_e \approx 1$. Причина такої поведінки полягає в іншій ієрархії амплітуд взаємодії і, отже, в іншому основному стані в ґраниці сильного зв'язку (див. також Розділ 4.3 для більш детальної інформації).

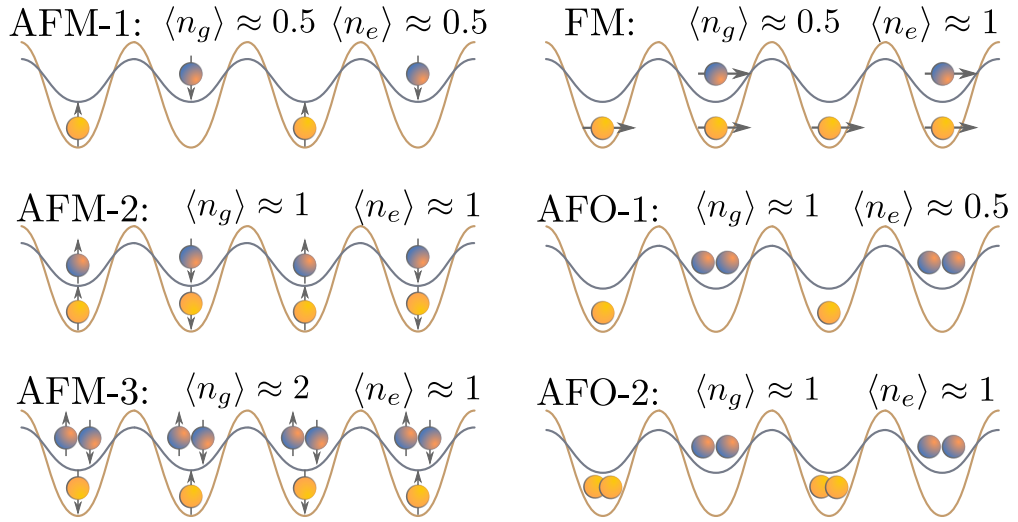


Рис. 4.4: Схематичне зображення магнітного та орбітального впорядкувань для певних середніх заповнень вузлів ґратки. Синій колір відповідає атомам в основному стані (g), жовтий колір зображує атоми у збудженому стані (e).

Можна помітити, що для обох ізотопів із феромагнітним зв'язком Гунда (^{173}Yb та ^{87}Sr з $V_{\text{ex}} > 0$, див. Таблиця 3) існують певні режими з сильним феромагнітним сигналом у кореляторі $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$. Цей феромагнітний сигнал майже відсутній у кореляторі через скінченні розміри системи, а також через нульову загальну поляризацію, $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$. У свою чергу, завдяки антиферомагнітній обмінній взаємодії ($V_{\text{ex}} < 0$) в системі атомів ^{171}Yb феромагнітні кореляції не спостерігаються, що призводить до прямої відповідності між зображеними спінових кореляторів $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ та $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ на всій діаграмі.

Таким чином, заповнення ґратки n_g та n_e , а також тип атомного ізотопу визначають чотири різні магнітні впорядкування, схематично зображені на Рис. 4.4, які ми позначаємо AFM-1 ($n_g + n_e \approx 1$), AFM-2 ($n_g + n_e \approx 2$), AFM-3 ($n_g + n_e \approx 3$) та FM. Ми провели додаткові розрахунки в діапазонах $n_e > 1$ (не показано на малюнках), які демонструють, що значення кореляторів типу спін-спін (а також орбіталь-орбіталь) є симетричними щодо дзеркального відбиття відносно лінії $(n_g + n_e) = 2$. Цей факт безпосередньо пов'язаний із симетрією частинка-дірка (див. Розділ 2.2) при заповненні ґратки обома орбітальними станами і може бути корисним для перевірки та контролю.

На Рис. 4.5 зображена залежність кореляторів типу орбіталь-орбіталь

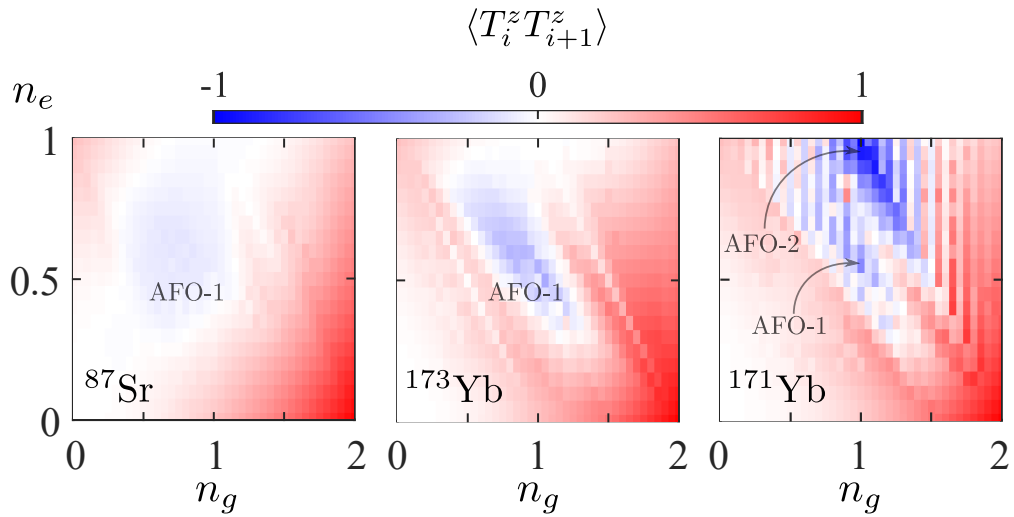


Рис. 4.5: Залежність усередненого за вузлами орбіталь-орбіталь корелятора (значення відображаються кольором) $\langle T_i^z T_{i+1}^z \rangle$ від середнього заповнення n_g і n_e для трьох ізотопів: ^{87}Sr , ^{173}Yb і ^{171}Yb (зліва направо), отримана за допомогою підходу MPS при $L = 20$.

$\langle T_i^z T_{i+1}^z \rangle$ від середніх густин g та e атомів. У випадку ^{173}Yb можна спостерігати антифероорбітальне впорядкування в околі $n_g = 1$ та $n_e = 0,5$ (див. також Рис. 4.4), що характеризується від'ємними значеннями корелятора. Слід зазначити, що місцезнаходження та розміри цієї фази добре узгоджуються з попередніми дослідженнями квазі-2D ґратчастих систем за допомогою динамічної теорії середнього поля [90]. Основною особливістю фази АФО є почергове заповнення сусідніх вузлів ґратки атомами в різних орбітальних станах. Задля ілюстрації, ідеалізована конфігурація (яку ми позначили АФО-1) при $n_g = 1$ та $n_e = 0,5$ зображена на Рис. 4.4. Зазначимо, що АФО-подібні модуляції густини також виникають у випадку газу атомів стронцію з відповідним максимумом сигналу при $n_g = 1$ та $n_e = 0,5$, але з меншою інтенсивністю.

Розглянемо залежність корелятора $\langle T_i^z T_{i+1}^z \rangle$, що зображена на Рис. 4.5, для випадку ізотопу ^{171}Yb . На відміну від атомних систем ^{173}Yb і ^{87}Sr , найсильніший сигнал АФО спостерігається при $n_g = n_e = 1$ (позначений як АФО-2 на Рис. 4.4). АФО-2 є двопідґратковим упорядкуванням, подібним до АФО-1. Однак основна відмінність полягає в тому, що сусідні вузли ґратки по черзі займають пари g або e атомів. Причина нестабільності АФО (яка повністю пригнічує антиферомагнітні кореляції, див. Рис. 4.3) у цьому конкретному режимі для системи ^{171}Yb походить від іншої ієрархії амплі-

туд взаємодії i , отже, іншого основного стану в границі сильного зв'язку (див. також розділ 4.3). На Рис. 4.5 варто звернути увагу на майже повне занулення значень корелятора $\langle T_i^z T_{i+1}^z \rangle$ у вигляді вертикальних смуг, що чергуються. Ми обумовлюємо це ефектами скінченного розміру системи та особливостями взаємодії g атомів між собою для ^{171}Yb ($U_{gg} = 0$). Зокрема, пригнічення спостерігається при непарних значеннях загальної кількості g атомів у системі, коли пари g атомів більше не можуть бути рівномірно розподілені вздовж ланцюга (наприклад, на кожному другому вузлі). Зі збільшенням розміру системи ці ефекти пригнічення стають менш виразними, і ми очікуємо, що вони зникнуть у термодинамічній границі ($L \rightarrow \infty$). Зазначимо також, що кореляції АФО зазвичай супроводжуються значними модуляціями густини (хвилею густини заряду) на найближчих сусідніх вузлах ґратки. До цього висновку можна прийти, зокрема, з відповідного порівняння Рис. 4.2 і 4.5.

4.3 Границя сильної взаємодії при половинному заповненні ґратки

Розглянемо більш детально режим з $n_g \approx 1$ та $n_e \approx 1$, при якому процеси тунелювання можна вважати за збудження. Чисельні результати обох підходів – ED і MPS – свідчать про наявність сильних кореляцій в цій області. Зокрема, їх структура залежить від типу ізотопу: для ^{173}Yb і ^{87}Sr мають прояв антиферомагнітні кореляцій, тоді як у системі з атомів ^{171}Yb провідними стають антифероорбітальні кореляції (див. Рис. 4.3 та 4.5).

Для теоретичного аналізу ми обмежимося двома вузлами ґратки та збалансованими конфігураціями спінів для компонентів g та e . Відразу зазначимо, що навіть при $t_g = t_e = 0$ різним ізотопам відповідають різні найнижчі енергетичні стани. Так для атомів ^{171}Yb основний стан характеризується конфігурацією АФО-2, що зображена на Рис. 4.4, із внеском нульового порядку до енергії

$$E_0^{\text{AFO}} = \frac{U_{ee} + U_{gg}}{2}. \quad (4.5)$$

Зауважимо, що формула (4.5) отримана за умови усереднення за вузлами системи. У той самий час для інших ізотопів, через різну ієрархію амплітуд взаємодії, стан з найменшою енергією є виродженим і утворюється локальними спін-триплетними станами ($S = 1$), що формуються парами g та e

спін-1/2 атомів на кожному вузлі ґратки. Таким чином, внесок нульового порядку до енергії в цих системах буде

$$E_0^{\text{AFM}} = V + V_{\text{ex}}. \quad (4.6)$$

Це виродження усувається шляхом врахування процесів тунелювання і призводить до конфігурації AFM-2, зображеної на Рис. 4.4.

Щоб перевірити наведені вище твердження та оцінити характерні амплітуди магнітних (або орбітальних) зв'язків, ми застосуємо перетворення Шріффера-Вольфа [5] і отримаємо вираз для ефективного гамільтоніана при половинному заповненні:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{AFM}} = \sum_{\langle ij \rangle, \gamma \neq \gamma'} \frac{4t_\gamma^2}{U_{\gamma\gamma} + V_{\text{ex}}} \left(\mathbf{S}_{i\gamma} \cdot \mathbf{S}_{j\gamma} - \frac{\hat{n}_{i\gamma} \hat{n}_{j\gamma}}{4} \right) \hat{n}_{i\gamma'} \hat{n}_{j\gamma'} + \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (4.7)$$

де спінові оператори \mathbf{S}_γ визначені рівнянням (4.3). Деталі щодо отримання формули (4.7) наведені у (3.4). Звернемо увагу, що для застосовності цієї моделі необхідно, щоб $t_\gamma^2 \ll (U_{\gamma\gamma} + V_{\text{ex}})$. Ця нерівність виконується для досліджуваної нами системи, що нескладно перевірити за Таблицею 3.

Слідуючи аналогічному алгоритму, що й для AFM конфігурації, отримаємо наступну ефективну модель для випадку AFO-2 (див. Рис. 4.4):

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{AFO}} = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma \neq \sigma', \gamma \neq \gamma'} \frac{4t_\gamma^2}{2V - U_{\gamma\gamma} - V_{\text{ex}}} T_{i\sigma}^z T_{j\sigma'}^z n_{i\gamma\sigma} n_{j\gamma'\sigma'} + \mathcal{H}_{\text{int}}. \quad (4.8)$$

У цьому випадку границя застосовності моделі пов'язана з умовою $t_\gamma^2 \ll (2V - U_{\gamma\gamma} - V_{\text{ex}})$, яка також виконується для досліджуваних систем (див. Табл. 3).

Ми можемо зробити висновок, що обидва типи кореляцій (як AFO, так і AFM) більшою мірою спричинені тунелюванням g атомів (за припущенням, що $t_g > t_e$). Водночас знаменники у різних ізотопів відрізняються через неоднакову структуру основного та віртуального станів у різних режимах. Зазначимо також, що нами було перевірено, що ієрархія енергій основного стану при $n_g \approx 1$ та $n_e \approx 1$ залишається незмінною для кожного атомного ізотопу при різних відношеннях поляризованості та глибини станово-залежної ґратки.

ВИСНОВКИ

У цій роботі ми продемонстрували, що квантові фермі-гази є досить потужними та універсальними системами для вирішення задач фізики систем багатьох частинок. Зокрема, до таких належать гази ферміонних ізотопів лужноземельних та їм подібних атомів, які можуть зберігати $SU(N)$ симетрію взаємодій та мають довгоіснуючі метастабільні збуджені стани. Ми розглянули їхні основні властивості та можливі оптичні переходи, що обумовлюють широке використання цих атомів в експериментах з оптичними ґратками. Крім того, ми описали принцип побудови магніто-оптичної пастки, завдяки якій відбувається охолодження та утримання атомарних систем. Нами також були надані теоретичні відомості щодо сил, які діють на атоми в пастках, та один із методів контролю взаємодій між атомами, а саме метод резонансів Фешбаха.

Ми отримали вираз для квантового гамільтоніану, що описує багато-орбітальну модель Фермі–Габбарда та зосередили увагу на його властивостях. Нами було продемонстровано, що гамільтоніан комутує з оператором загального числа частинок, а також зі спіновим оператором \hat{S}^z , що відповідає збереженню загальної кількості атомів та загальної проєкції спіну. Отриманий гамільтоніан шляхом обґрунтованих припущень ми спростили до вигляду двоорбітальної моделі Фермі–Габбарда, для якої проводилися усі розрахунки в межах дослідження.

Велика частина цієї роботи була присвячена опису використаних теоретичних підходів для аналізу багаточастинкових систем – методу точної діагоналізації та методу матричних множників – та обговоренню їхніх переваг і недоліків. Зокрема, ми надали детальний алгоритм для проведення точної діагоналізації, відзначили, що врахування симетрій системи дозволяє значно спростити розрахунки. Так, увесь гамільтоніан може бути представлено у вигляді окремих блоків, які діагоналізуються незалежно один від одного. Проте навіть з використанням такого підходу, розрахунки для систем з більш ніж п'ятьма вузлами не є можливими на сучасних персональних комп'ютерах. Саме тому ми звернули увагу на варіаційний метод матричних множників. Для нього ми продемонстрували необхідні кроки, за допомогою яких хвильова функція системи може бути записана у вигляді добутку матриць. Ми також представили гамільтоніан моделі

Фермі–Габбарда як оператор матричних множників, що разом з методом матричних множників використовується в алгоритмі групи перенормування матриці густини для знаходження основного стану системи.

В залежних від стану оптичних ґратках із взаємодійними ферміонними атомами ітербію та стронцію, ми вивчили багаточастинкові кореляції, характерні для основного стану газових систем. Наш теоретичний аналіз квазіодновимірної геометрії ґратки виявив значну кількість різних режимів з характерними магнітними, орбітальними та густинними кореляціями. Ми розрахували як одно-, так і двовузлові кореляційні функції, які можна виміряти у відповідних експериментальних реалізаціях з ультрахолодними атомами. Так, для ізотопів ^{87}Sr та ^{173}Yb вздовж діагоналей $n_g + n_e = 1$ та $n_g + n_e = 2$ спостерігаються антиферомагнітні сигнали, а вздовж діагоналі $n_g + n_e = 1, 5$ – антифероорбітальний сигнал. У свою чергу атоми ^{171}Yb , що мають іншу ієрархію амплітуд взаємодій, демонструють антиферомагнітне упорядкування при $n_g + n_e = 1$ та $n_g + n_e = 3$ й антифероорбітальне упорядкування при $n_g + n_e = 1, 5$ і $n_g + n_e = 2$. Також нами було виявлено сильний феромагнітний сигнал у кореляторі $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ для систем, що складаються з атомів ^{87}Sr та ^{173}Yb .

Для половинного заселення ґратки було проведено окремий теоретичний аналіз в границі сильної взаємодії для режиму з $n_g \approx 1$ та $n_e \approx 1$. За такого заповнення основні стани атомів ^{87}Sr , ^{173}Yb та ^{171}Yb перебувають у різних упорядкованих фазах та описуються різними ефективними гамільтоніанами з відповідними границями застосовності. Останні було отримано шляхом канонічних перетворень, що відокремлюють низькоенергетичні та високоенергетичні підпростори.

Отримані результати актуальні не тільки для експериментів, де вимірюють усереднені за певною кількістю вузлів фізичні величини (наприклад, подвійне заповнення, розподіл густини, стисливість тощо), але й для експериментів з лужноземельними атомами з доступом до кожного вузла окремо (техніки квантового газового мікроскопу) [95–97]. Хоча ми обмежилися певними значеннями глибини ґратки та коефіцієнта поляризованості, порівняння різних атомних ізотопів надає корисну інформацію щодо досягнення необхідних режимів і можливості проаналізувати їх у різних атомних системах. Крім того, наші результати також відкривають цікаві

напрямки до реалізації складних неоднорідних систем, де кривизну пастки можна регулювати для посилення однієї конкретної або кількох різних фаз у різних просторових зонах пастки. Відзначимо, що використані підходи можуть бути розширені для врахування теплових ефектів і виконання аналізу ентропії, що є цінним з експериментальної точки зору. Добра якісна узгодженість результатів для газу ^{173}Yb зі статтею [90] є ознакою того, що основні сильно корельовані режими для всіх трьох атомних систем мають залишатися стабільними і можуть спостерігатися у системах з вищою вимірністю простору за скінченної температури.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. H. Feshbach, “Unified theory of nuclear reactions,” *Annals of Physics*, vol. 5, no. 4, pp. 357–390, 1958.
5. P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. EBL-Schweitzer, World Scientific, 1999.
6. C. He, E. Hajiyevev, Z. Ren, B. Song, and G.-B. Jo, “Recent progresses of ultracold two-electron atoms,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 52, p. 102001, apr 2019.
7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. 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.
11. 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.

12. 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.
13. 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.
14. T. Fukuhara, Y. Takasu, M. Kumakura, and Y. Takahashi, “Degenerate Fermi Gases of Ytterbium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 030401, Jan 2007.
15. 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.
16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. A. Derevianko and H. Katori, “Colloquium: Physics of optical lattice clocks,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 331–347, May 2011.
20. 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.
21. A. J. Daley, “Quantum computing and quantum simulation with group-II atoms,” *Quantum Information Processing*, vol. 10, p. 865, Sep 2011.
22. R. Ciuryło, E. Tiesinga, and P. S. Julienne, “Optical tuning of the scattering length of cold alkaline-earth-metal atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 71, p. 030701, Mar 2005.
23. K. Enomoto, K. Kasa, M. Kitagawa, and Y. Takahashi, “Optical Feshbach Resonance Using the Intercombination Transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 203201, Nov 2008.
24. S. Blatt, T. L. Nicholson, B. J. Bloom, J. R. Williams, J. W. Thomsen,

- P. S. Julienne, and J. Ye, “Measurement of Optical Feshbach Resonances in an Ideal Gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, p. 073202, Aug 2011.
25. M. Yan, B. J. DeSalvo, B. Ramachandhran, H. Pu, and T. C. Killian, “Controlling Condensate Collapse and Expansion with an Optical Feshbach Resonance,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 123201, Mar 2013.
26. 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.
27. S. Kato, K. Inaba, S. Sugawa, K. Shibata, R. Yamamoto, M. Yamashita, and Y. Takahashi, “Laser spectroscopic probing of coexisting superfluid and insulating states of an atomic Bose–Hubbard system,” *Nature Communications*, vol. 7, p. 11341, Apr 2016.
28. 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.
29. S. B. Nagel, P. G. Mickelson, A. D. Saenz, Y. N. Martinez, Y. C. Chen, T. C. Killian, P. Pellegrini, and R. Côté, “Photoassociative Spectroscopy at Long Range in Ultracold Strontium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 083004, Mar 2005.
30. T. Zelevinsky, M. M. Boyd, A. D. Ludlow, T. Ido, J. Ye, R. Ciuryło, P. Naidon, and P. S. Julienne, “Narrow line photoassociation in an optical lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 203201, May 2006.
31. S. Stellmer, R. Grimm, and F. Schreck, “Detection and manipulation of nuclear spin states in fermionic Strontium,” *Phys. Rev. A*, vol. 84, p. 043611, Oct 2011.
32. S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, “An SU(6) Mott insulator of an atomic Fermi gas realized by large-spin Pomeranchuk cooling,” *Nat. Phys.*, vol. 8, p. 825, Nov 2012.
33. Y. Tokura and N. Nagaosa, “Orbital physics in transition-metal oxides,” *Science*, vol. 288, no. 5465, pp. 462–468, 2000.
34. 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,” *Nat. Phys.*, vol. 6, p. 289,

Feb 2010.

35. 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.
36. F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch, and S. Fölling, “Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold $SU(N)$ -symmetric fermions,” *Nat. Phys.*, vol. 10, pp. 779–784, Oct 2014.
37. 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.
38. T. W. Hansch and A. L. Schawlow, “Cooling of gases by laser radiation,” *Optics Communications*, vol. 13, pp. 68–69, jan 1975.
39. W. D. Phillips and H. Metcalf, “Laser deceleration of an atomic beam,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 48, pp. 596–599, Mar 1982.
40. S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable, and A. Ashkin, “Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 55, pp. 48–51, Jul 1985.
41. W. D. Phillips, “Nobel lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 70, pp. 721–741, Jul 1998.
42. F. Verstraete, V. Murg, and J. Cirac, “Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems,” *Adv. Phys.*, vol. 57, no. 2, pp. 143–224, 2008.
43. U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals Phys.*, vol. 326, p. 96, Jan 2011.
44. R. Orús, “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states,” *Annals Phys.*, vol. 349, pp. 117–158, 2014.
45. P. Silvi, F. Tschirsich, M. Gerster, J. Jünemann, D. Jaschke, M. Rizzi, and S. Montangero, “The Tensor Networks Anthology: Simulation techniques for many-body quantum lattice systems,” *SciPost Phys. Lect. Notes*, p. 8, 2019.
46. K. Okunishi, T. Nishino, and H. Ueda, “Developments in the tensor network — from statistical mechanics to quantum entanglement,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 91, no. 6, p. 062001, 2022.
47. M. C. Bañuls, “Tensor network algorithms: A route map,” *Annu. Rev. Cond.*

- Matt. Phys.*, vol. 14, no. 1, p. 1, 2023.
48. M. Fannes, B. Nachtergaele, and R. F. Werner, “Finitely correlated states of quantum spin chains,” *Commun. Math. Phys.*, vol. 144, p. 443, 1992.
 49. G. Vidal, “Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 040502, Jul 2004.
 50. C. Verstraete, D. Porras, and J. I. Cirac, “Density matrix renormalization group and periodic boundary conditions: A quantum information perspective,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 227205, Nov 2004.
 51. S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, p. 2863, Nov 1992.
 52. H. Metcalf and P. van der Straten, “Laser cooling and trapping,” *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 20, 05 2003.
 53. 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.
 54. R. Freytag, *Simultaneous magneto-optical trapping of Ytterbium and Caesium*. PhD thesis, July 2015.
 55. C. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, 2002.
 56. L. Landau and E. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Course of Theoretical Physics, Elsevier Science, 1981.
 57. C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, “Feshbach resonances in ultracold gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 1225–1286, Apr 2010.
 58. 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.
 59. 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.
 60. 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.
 61. F. Scazza, *Probing $SU(N)$ -symmetric orbital interactions with ytterbium Fermi gases in optical lattices*. PhD thesis, February 2015.

62. 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.
63. 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.
64. 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.
65. J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A*, vol. 276, 11 1963.
66. M. C. Gutzwiller, “Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 159–162, Mar 1963.
67. J. Kanamori, “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, pp. 275–289, 09 1963.
68. “The Hubbard model at half a century, journal=Nature Physics,” vol. 9, pp. 523–523, Sep 2013.
69. L. M. Roth, “Simple narrow-band model of ferromagnetism due to intra-atomic exchange,” *Phys. Rev.*, vol. 149, pp. 306–308, Sep 1966.
70. A. M. Oleś, “Antiferromagnetism and correlation of electrons in transition metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 28, pp. 327–339, Jul 1983.
71. H. J. Schulz, “Effective action for strongly correlated fermions from functional integrals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 2462–2465, Nov 1990.
72. S. Robaszkiewicz and B. R. Buřka, “Superconductivity in the Hubbard model with pair hopping,” *Physical Review B*, vol. 59, pp. 6430–6437, mar 1999.
73. 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.
74. 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.
75. 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.
76. F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 2005.
77. J.-H. Jung and J. D. Noh, “Guide to exact diagonalization study of quantum thermalization,” *Journal of the Korean Physical Society*, vol. 76, pp. 670–683, apr 2020.
78. S. A. Jafari, “Introduction to Hubbard Model and Exact Diagonalization,” *arXiv*, 0807.4878, 2008.
79. P. Jordan and E. P. Wigner, “About the Pauli exclusion principle,” *Z. Phys.*, vol. 47, pp. 631–651, 1928.
80. J. C. Bridgeman and C. T. Chubb, “Hand-waving and interpretive dance: an introductory course on tensor networks,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 50, p. 223001, may 2017.
81. T. E. Baker and M. P. Thompson, “Build your own tensor network library: DMRjulia I. Basic library for the density matrix renormalization group,” *arXiv*, 2109.03120, 2021.
82. 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 entralbibliothek, Velag, Sep 2018.
83. T. E. Baker, S. Desrosiers, M. Tremblay, and M. P. Thompson, “Mé thodes de calcul avec réseaux de tenseurs en physique,” *Canadian Journal of Physics*, vol. 99, pp. 207–221, apr 2021.
84. E. Pavarini, E. Koch, and U. Schollwöck, eds., *Emergent Phenomena in Correlated Matter*, vol. 3 of *Schriften des Forschungszentrums Jülich. Reihe modeling and simulation*. Jülich: Forschungszentrum Jülich GmbH Zentralbibliothek, Verlag, Sep 2013.
85. 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.

86. 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.
87. 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.
88. 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.
89. M. Höfer, L. Riegger, F. Scazza, C. Hofrichter, D. R. Fernandes, M. M. Parish, J. Levinsen, I. Bloch, and S. Fölling, “Observation of an Orbital Interaction-Induced Feshbach Resonance in ^{173}Yb ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 115, p. 265302, Dec 2015.
90. 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.
91. 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.
92. 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.
93. M. Takamoto, F.-L. Hong, R. Higashi, and H. Katori, “An optical lattice clock,” *Nature*, vol. 435, pp. 321–324, May 2005.
94. A. Sotnikov, Y. Zambrano, and A. Cichy, “Low-Temperature Phases in Two-Orbital Hubbard Model Realized with Ultracold Atoms in Optical Lattices,” *Acta Phys. Pol. A*, vol. 138, p. 669, May 2020.
95. M. Miranda, R. Inoue, Y. Okuyama, A. Nakamoto, and M. Kozuma, “Site-resolved imaging of ytterbium atoms in a two-dimensional optical lattice,” *Phys. Rev. A*, vol. 91, p. 063414, Jun 2015.
96. R. Yamamoto, J. Kobayashi, T. Kuno, K. Kato, and Y. Takahashi, “An ytterbium quantum gas microscope with narrow-line laser cooling,” *New J. Phys.*, vol. 18, no. 2, p. 023016, 2016.

97. A. W. Young, W. J. Eckner, N. Schine, A. M. Childs, and A. M. Kaufman, “Tweezer-programmable 2D quantum walks in a Hubbard-regime lattice,” *Science*, vol. 377, no. 6608, pp. 885–889, 2022.