

І.В. СТАСЮК, І.Р. ДУЛЕПА, О.В. ВЕЛИЧКО

Інститут фізики конденсованих систем НАН України
(Вул. Свенціцького, 1, Львів 79011)**ДОСЛІДЖЕННЯ БОЗОННОГО
СПЕКТРА ДВОВИМІРНИХ ОПТИЧНИХ
ҐРАТОК ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ
ГРАФЕНУ. НОРМАЛЬНА ФАЗА**

УДК 538.911, 538.941

Досліджено зонний спектр бозе-атомів у двовимірних гексагональних оптичних ґратках із структурою типу графену. У наближенні хаотичних фаз розраховано для нормальної фази закони дисперсії в зонах та одночастинкові спектральні густини. Для ґратки з енергетично еквівалентними вузлами отримано температурно залежний безциліндричний спектр з точками Дірака на краю зони Бріллоена. Хімічний потенціал розташований у цьому випадку поза дозволеною енергетичною зоною. При відмінності між енергіями частинок на вузлах різних підґраток, коли виникає щільна у спектрі, хімічний потенціал може перебувати між підзонами. У такому разі має місце значна перебудова зонного спектра. Визначено частотні залежності одночастинкових спектральних густин для обидвох підґраток залежно від розміщення рівня хімічного потенціалу, величини щільності у зонному спектрі та температури.

Ключові слова: оптична ґратка, гексагональна ґратка, фазовий перехід, спектральна густина, жорсткі бозони, точки Дірака.

1. Вступ

Протягом останнього десятиліття значна увага спрямовується на дослідження та опис явищ, які відбуваються при дуже низьких температурах у підсистемах атомів, розміщених у так званих оптичних ґратках. Такі ґратки створюють у лабораторних умовах шляхом інтерференції зустрічних пучків когерентних лазерних променів [1, 2]. Електромагнітне поле, яке при цьому формується, є періодичним у просторі (період визначається довжиною світлової хвилі згаданих променів та відносними кутами між ними). Відповідно, таку ж властивість має потенціал, який діє на частинки (атоми) у цьому полі. Атоми в оптичній ґратці становлять ідеальну квантову систему, де практично всі параметри можна регулювати, а отже, вивчати явища, які важко спостерігати в звичайних кристалах. У залежності від кількості та орієнтації пучків, що інтерферують, можна створювати одно-, дво- та тривимірні ґратки різної симетрії та структури [3].

У дослідженні та описі поведінки ультрахолодних бозе-атомів у двовимірних оптичних ґратках

з гексагональною структурою поєдналися два важливих напрямки сучасної квантової фізики. З одного боку, в оптичних ґратках відбуваються фазові переходи у підсистемі бозонів, пов'язані з їх бозе-конденсацією; можуть також виникати нові фази особливого типу. Інтерес до таких об'єктів зумовлений ще й тим, що ряд явищ фізики конденсованого стану та систем з сильними кореляціями частинок можуть бути відтворені шляхом розгляду поведінки атомів, поміщених в оптичні ґратки. З другого боку, предметом особливої уваги є останнім часом двовимірна гексагональна вуглецева структура, відома як графен. Вона має унікальні фізичні властивості, поява яких викликана так званим діраківським енергетичним спектром електронів провідності (лінійним законом дисперсії в області К-точок зони Бріллоена). Тому вивченню термодинаміки і енергетичного спектра бозе- (а також фермі-) атомів у оптичних ґратках типу графену надається значна увага. До важливих проблем належить, зокрема, дослідження впливу згаданої особливості енергетичного спектра на картину фазових переходів у системі ультрахолодних атомів. Цікавою є і зворотна задача, яка стосується змін у структурі спектра при переходах від одних фаз до інших.

© І.В. СТАСЮК, І.Р. ДУЛЕПА, О.В. ВЕЛИЧКО, 2014

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2014. Т. 59, № 9

Квантові стани системи бозе-атомів і перехід до фази з бозе-конденсатом (так званої надплинної (superfluid) SF-фази) у оптичній ґратці типу графену були спостережені в [4]. Виявлені при цьому області існування різних фаз (моттівського діелектрика і надплинної) узгоджувались якісно з фазовими діаграмами, розрахованими у наближенні середнього поля. Уточнення фазових границь шляхом врахування міжвузлових кореляцій за допомогою кластерного узагальнення схеми Гутцвіллера було проведено пізніше [5]. Зверталась також увага на гексагональні ґратки, у яких на відміну від графену локалізовані стани у вузлах оптичної ґратки є енергетично нееквівалентними, якщо ці вузли належать до різних підґраток. Розглядалися випадки різних енергій одновузлового відштовхування ($U_A \neq U_B$) [6] та різних глибин потенціальних ям ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_B$) [7, 8]. У другому з них було враховано, що у процесах перенесення частинок і утворення конденсату можуть брати участь, крім s -, ще й збуджені $p_{x,y}$ -стани атомів, локалізованих у більш глибоких ямах. Це дало змогу дослідити механізми, що ведуть до утворення так званої орбітальної (мультиорбітальної) надплинної фази.

Особливостям енергетичного спектра бозонів у оптичних ґратках зі структурою типу графену присвячено небагато робіт. В [9] розглядалися зміни у розташуванні діраківських точок і топології спектра під впливом взаємодії між частинками. Було застосовано наближення слабого зв'язку (у рамках підходу Боголюбова). В роботах [8, 10] ставилося питання про переміщення і можливе зникнення діраківських точок внаслідок анізотропної ($t_{ij} \neq t_{ij'}$) зміни параметрів перенесення частинок між сусідніми вузлами у ґратці (така зміна може бути зумовлена дією механічного струшування [10]). Більш повний аналіз спектра і його перебудови при переходах з одних фаз до інших не проводився.

Теоретичний опис конденсації бозе-частинок у оптичних ґратках, взагалі, і у ґратках зі структурою типу графену, зокрема, проводиться переважно на основі моделі Бозе–Хаббарда [11, 12], а також у її граничному випадку ($U \rightarrow \infty$) – моделі жорстких бозонів [13]. Ця модель адекватно описує термодинаміку і енергетичний спектр бозонної системи при малих рівнях заповнення ($0 \leq n \leq 1$) і при застосуванні (у її найбільш простому фор-

мулюванні) до гексагональних ґраток дає можливість встановити межі областей, де існують основні фази – моттівського діелектрика (MI), надплинна (SF), а також модульована (CDW); остання існує при нееквівалентності підґраток. Розширення моделі жорстких бозонів (шляхом врахування перестрибування t_{ij} частинок на дальші, крім найближчих, вузли в ґратці) виявило існування нових фаз. Як показано в [14], більший радіус функції t_{ij} приводить до появи у ґратці типу графену особливої фази – так званого бозе-металу.

Модель жорстких бозонів відома ще з 50-х років ХХ століття. Її перше застосування пов'язане з теорією рідкого гелію в рамках ґраткового опису [15]. Модель була використана в теорії систем джозефсонівських контактів [16], теорії високотемпературної надпровідності у підході локальних пар [17]; була також покладена в основу обчислень іонної провідності у кристалах [18]. Впродовж останніх років, крім опису систем ультраохолодних бозе-частинок у оптичних ґратках, модель застосовується при розгляді фізичних процесів, пов'язаних з іонною інтеркаляцією та адсорбцією квантових частинок на поверхні металів [19, 20].

Дана робота є продовженням наших теоретичних досліджень [21–24] енергетичного спектра та спектральних характеристик квантового ґраткового бозе-газу і, зокрема, моделі жорстких бозонів. У рамках псевдоспінового опису шляхом застосування процедури ферміонізації у одновимірному випадку [21], та у наближенні хаотичних фаз у більш загальному тривимірному [22], досліджено зміни у одночастинкових спектральних густинах при переході від неупорядкованого (NO) до впорядкованого стану (у якому $\langle S^x \rangle = \langle b^+ \rangle = \langle b \rangle \neq 0$), який є аналогом фази із ґратковим бозе-конденсатом (SF-фази). Отримані в [22] спектральні густини та їх зміни із частотою якісно узгоджуються з частотними залежностями таких густин, розрахованих на основі ферміонізації, а також методом точної діагоналізації на одновимірних кластерах [23].

Об'єктом нашого теперішнього дослідження є спектральні характеристики одночастинкового спектра моделі жорстких бозонів на плоскій гексагональній ґратці (ґратці типу графену) з енергетично нееквівалентними вузлами. Подібна задача для тривимірної ґратки з модельною густиною станів для незбуреного одночастинкового спе-

ктра розглядалась в [24] і певні загальні закономірності структури зонного спектра жорстких бозонів були з'ясовані. Ґратка типу графену вносить, однак, свою специфіку у будову спектра і це потрібно вивчити. Ми застосовуємо підхід, викладений в [22, 24]; він ґрунтується на псевдоспіновому формалізмі і використанні методики функцій Гріна при обчисленні спектральних густин. На першому етапі розрахунків, який становить зміст даної публікації, знайдемо зонну структуру і одночастинкові спектральні густини для неупорядкованої (нормальної) фази та дослідимо їх залежності від розміщення рівня хімічного потенціалу бозе-частинок відносно зонного спектра, величини різниці одновузлових енергій $\delta = (\varepsilon_A - \varepsilon_B)/2$ та температури.

2. Модель

Гамільтоніан квантового ґраткового газу у загальному випадку дається виразом

$$H = - \sum_{i,j} t_{ij} b_i^+ b_j + \sum_i (\varepsilon_\alpha - \mu) n_i, \quad (1)$$

де t_{ij} – інтеграл перенесення, ε_α – енергія на вузлі ($\alpha = A, B$ – індекс підґратки), μ – хімічний потенціал, b_i^+ (b_i) – оператори народження (знищення) частинки, n_i – число частинок на вузлі i . Енергію міжвузлової взаємодії ми тут не враховуємо.

У випадку оптичних ґраток з глибокими потенціальними ямами енергія одновузлового відштовхування бозе-атомів є великою, і добрим наближенням є підхід жорстких бозонів, у якому існує обмеження на їх число заповнення ($n_i = 0$ або 1). Такі бозони описуються операторами Паулі з комутаційними співвідношеннями

$$[b_i^+, b_j^+] = [b_i, b_j] = [b_i^+, b_j] = 0, \quad i \neq j; \quad \{b_i, b_i^+\} = 1. \quad (2)$$

Модель стає еквівалентною до задачі зі псевдоспіном $S = \downarrow$ ($S = \uparrow$) в результаті перетворення

$$b_i^+ = S_i^-, \quad b_i = S_i^+, \quad b_i^+ b_i = n_i = \frac{1}{2} - S_i^z. \quad (3)$$

Гамільтоніан у спіновому зображенні записується у вигляді

$$H = - \sum_{i,j} t_{ij} S_i^- S_j^+ - \sum_i h_\alpha S_i^z + \text{const}, \quad (4)$$

де

$$h_\alpha = (\varepsilon_\alpha - \mu), \quad \text{const} = \sum_{\alpha=A,B} (\varepsilon_\alpha - \mu) \frac{N}{2}. \quad (5)$$

Надалі сталий доданок у гамільтоніані опускаємо. Сума за індексом i вміщує підсумовування за n -індексом комірки та за α -індексом підґратки.

Враховуючи сказане вище, у випадку двох підґраток ($\alpha = A, B$), отримуємо вираз для гамільтоніана системи:

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{nn'} J_{nn'}^{AB} (S_{nA}^x S_{n'B}^x + S_{nA}^y S_{n'B}^y) - \\ & - \sum_{nn'} J_{nn'}^{BA} (S_{nB}^x S_{n'A}^x + S_{nB}^y S_{n'A}^y) - \\ & - h_A \sum_n S_{nA}^z - h_B \sum_{n'} S_{n'B}^z. \end{aligned} \quad (6)$$

Здійснимо поворот у спіновому просторі на деякий кут θ_α :

$$\begin{aligned} S_{n\alpha}^z &= \sigma_{n\alpha}^z \cos \theta_\alpha + \sigma_{n\alpha}^x \sin \theta_\alpha \\ S_{n\alpha}^x &= \sigma_{n\alpha}^x \cos \theta_\alpha - \sigma_{n\alpha}^z \sin \theta_\alpha, \\ S_{n\alpha}^y &= \sigma_{n\alpha}^y. \end{aligned} \quad (7)$$

Отримаємо

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{nn'} [L_1^{AB}(n, n') \sigma_{nA}^x \sigma_{n'B}^x + L_2^{AB}(n, n') \sigma_{nA}^z \sigma_{n'B}^z] + \\ & + \sum_{nn'} [L_3^{AB}(n, n') \sigma_{nA}^x \sigma_{n'B}^z + L_4^{AB}(n, n') \sigma_{nA}^z \sigma_{n'B}^x] - \\ & - \sum_{nn'} L_5^{AB}(n, n') \sigma_{nA}^y \sigma_{n'B}^y - \\ & - \sum_\alpha h_\alpha \sum_n (\sigma_{n\alpha}^z \cos \theta_\alpha + \sigma_{n\alpha}^x \sin \theta_\alpha), \end{aligned} \quad (8)$$

де введено позначення

$$\begin{aligned} L_1^{AB}(n, n') &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \cos \theta_A \cos \theta_B, \\ L_2^{AB}(n, n') &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \sin \theta_A \sin \theta_B, \\ L_3^{AB}(n, n') &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \cos \theta_A \sin \theta_B, \\ L_4^{AB}(n, n') &= (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) \sin \theta_A \cos \theta_B, \\ L_5^{AB}(n, n') &= J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}. \end{aligned} \quad (9)$$

Виконаємо фур'є-перетворення до хвильових векторів:

$$\begin{aligned} \sum_{n'} (J_{nn'}^{AB} + J_{n'n}^{BA}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{nA} - \mathbf{R}_{n'B})} &= \\ = J^{AB}(\mathbf{q}) \equiv J(\mathbf{q}), & \\ \sum_{n'} (J_{nn'}^{BA} + J_{n'n}^{AB}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{nB} - \mathbf{R}_{n'A})} &= \\ = J^{BA}(\mathbf{q}) \equiv J(-\mathbf{q}); & \end{aligned} \quad (10)$$

тоді

$$\begin{aligned} L_1^{AB}(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \cos \theta_A \cos \theta_B, \\ L_2^{AB}(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \sin \theta_A \sin \theta_B, \\ L_3^{AB}(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \cos \theta_A \sin \theta_B, \\ L_4^{AB}(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}) \sin \theta_A \cos \theta_B, \\ L_5^{AB}(\mathbf{q}) &= J(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (11)$$

Враховуючи еквівалентність оточення вузлів з різних підґраток можемо записати $J^{AB}(0) = J^{BA}(0) \equiv J(0) = 3t$, де t – подвоєний інтеграл перенесення між найближчими вузлами у ґратці (див. додаток А). Виділимо у гамільтоніані частину, що відповідає наближенню середнього поля (MF):

$$\begin{aligned} \sigma_{nA}^\nu \sigma_{n'B}^{\nu'} &\rightarrow \langle \sigma_A^\nu \rangle \sigma_{n'B}^{\nu'} + \langle \sigma_B^{\nu'} \rangle \sigma_{nA}^\nu - \langle \sigma_A^\nu \rangle \langle \sigma_B^{\nu'} \rangle, \\ \nu, \nu' &= x, y, z, \langle \sigma_\alpha^x \rangle = \langle \sigma_\alpha^y \rangle = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

У результаті гамільтоніан середнього поля набуде вигляду

$$H_{MF} = - \sum_{n\alpha} E_\alpha \sigma_{n\alpha}^z. \quad (13)$$

Власні значення і кути повороту θ_α отримуються зі системи рівнянь

$$\begin{aligned} E_\alpha &= (\varepsilon_\alpha - \mu) \cos \theta_\alpha - J(0) \langle S_\beta^x \rangle \sin \theta_\alpha, \\ (\varepsilon_\alpha - \mu) \sin \theta_\alpha &+ J(0) \langle S_\beta^x \rangle \cos \theta_\alpha = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

де

$$\begin{aligned} \langle S_\alpha^x \rangle &= -\langle \sigma_\alpha^z \rangle \sin \theta_\alpha, \quad \langle S_\alpha^z \rangle = \langle \sigma_\alpha^z \rangle \cos \theta_\alpha, \\ \langle \sigma_\alpha^z \rangle &= \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta E_\alpha}{2}, \quad \alpha, \beta = A, B, \alpha \neq \beta. \end{aligned} \quad (15)$$

У неупорядкованій (для системи бозонів – так званій нормальній) фазі: $\theta_\alpha = 0, \langle S_\alpha^x \rangle = 0, \langle S_\alpha^z \rangle =$

$= \langle \sigma_\alpha^z \rangle, E_\alpha = \varepsilon_\alpha$. Розв'язок $\theta_\alpha \neq 0$ описує “впорядковану” фазу (фазу з конденсатом жорстких бозонів), для якої $\langle S_\alpha^x \rangle \equiv \langle b_\alpha \rangle \neq 0$ є параметром порядку. Система рівнянь (14) з (15) визначає поведінку параметра порядку та середнього $\langle S_\alpha^z \rangle$, тобто $\langle n_\alpha \rangle$ із зміною температури у впорядкованій фазі. Зміна параметра порядку $\langle S^x \rangle$ з температурою у випадку, коли кристал не розділений на підґратки [5] при заданому значенні енергії на вузлі в наближенні середнього поля є такою ж, як і для моделі Ізінга із поперечним полем (що діє на спін; роль поля в даній роботі відіграє величина $h_\alpha = \varepsilon_\alpha - \mu$). Надалі при обчисленнях будемо досліджувати поведінку зонного спектра бозонів у неупорядкованій (NO) фазі при фіксованій температурі залежно від значень полів h_α при різних відстані від ліній на фазових діаграмах (див. [24]), що визначають переходи до фази з бозе-конденсатом (SF-фази).

3. Функції Гріна та енергетичний спектр моделі

Одночастинковий енергетичний спектр можемо обчислити методом функцій Гріна із використанням наближення хаотичних фаз. Одночастинкова функція Гріна на операторах $\langle\langle b_{l\alpha} | b_{n\beta}^+ \rangle\rangle$ дорівнює функції Гріна на операторах псевдоспіну $\langle\langle S_{l\alpha}^+ | S_{n\beta}^- \rangle\rangle \equiv G_{l\alpha, n\beta}^+ [22, 24]:$

$$\begin{aligned} \langle\langle S_{l\alpha}^+ | S_{n\beta}^- \rangle\rangle &= \langle\langle S_{l\alpha}^x | S_{n\beta}^x \rangle\rangle - i \langle\langle S_{l\alpha}^x | S_{n\beta}^y \rangle\rangle + \\ &+ i \langle\langle S_{l\alpha}^y | S_{n\beta}^x \rangle\rangle + \langle\langle S_{l\alpha}^y | S_{n\beta}^y \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

У NO-фазі ($\cos \theta_\alpha = 1, \sin \theta_\alpha = 0$):

$$\begin{aligned} G_{l\alpha, n\beta}^{+-} &= \langle\langle \sigma_{l\alpha}^x | \sigma_{n\beta}^x \rangle\rangle - i \langle\langle \sigma_{l\alpha}^x | \sigma_{n\beta}^y \rangle\rangle + \\ &+ i \langle\langle \sigma_{l\alpha}^y | \sigma_{n\beta}^x \rangle\rangle + \langle\langle \sigma_{l\alpha}^y | \sigma_{n\beta}^y \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Записуємо рівняння руху для функцій Гріна на компонентах псевдоспіну:

$$\hbar\omega \langle\langle \sigma_{l\alpha}^\nu | \sigma_{n\beta}^{\nu'} \rangle\rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \langle[\sigma_{l\alpha}^\nu, \sigma_{n\beta}^{\nu'}]\rangle + \langle\langle [\sigma_{l\alpha}^\nu, H] | \sigma_{n\beta}^{\nu'} \rangle\rangle, \quad (18)$$

$\nu, \nu' = x, y$.

Застосуємо розчеплення функції Гріна вищого порядку, що відповідає наближенню хаотичних фаз. При такому розчепленні $[\sigma_{l\alpha}^z, H] \rightarrow 0$, у результаті

чого $\langle\langle\sigma_{l\alpha}^z|\sigma_{n\beta}'\rangle\rangle = 0$, $\langle\langle\sigma_{l\alpha}'|\sigma_{n\beta}^z\rangle\rangle = 0$. Для функції Гріна з поперечними компонентами псевдо-спіну отримуємо систему рівнянь

$$\begin{aligned} \hbar\omega\langle\langle\sigma_{l\alpha}^x|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle &= iE_\alpha\langle\langle\sigma_{l\alpha}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle - \\ &- i\langle\sigma_\alpha^z\rangle\sum L_5^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma_{n\beta}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle, \\ \hbar\omega\langle\langle\sigma_{l\alpha}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle &= -i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma_\alpha^z\rangle\delta_{ln} - iE_\alpha\langle\langle\sigma_{l\alpha}^x|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle + \\ &+ i\langle\sigma_\alpha^z\rangle\sum L_1^{\alpha\beta}\langle\langle\sigma_{n\beta}^x|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle, \\ \hbar\omega\langle\langle\sigma_{l\beta}^x|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle &= iE_\beta\langle\langle\sigma_{l\beta}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle - \\ &- i\langle\sigma_\beta^z\rangle\sum L_5^{\beta\alpha}\langle\langle\sigma_{n\alpha}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle, \\ \hbar\omega\langle\langle\sigma_{l\beta}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle &= -iE_\beta\langle\langle\sigma_{l\beta}^x|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle + \\ &+ i\langle\sigma_\beta^z\rangle\sum_n L_1^{\beta\alpha}\langle\langle\sigma_{n\alpha}^x|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle, \end{aligned} \quad (19)$$

де (і в подальшому) $\alpha \neq \beta$. Подібно записується система рівнянь для функцій $\langle\langle\sigma_{n\alpha}^y|\sigma_{n\alpha}^x\rangle\rangle$. Після фур'є-перетворення до хвильових векторів

$$G_{\alpha\beta}^{\nu\nu'}(\mathbf{q}) \equiv \sum_{l-n} \langle\langle\sigma_{l\alpha}^\nu|\sigma_{n\beta}^{\nu'}\rangle\rangle e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{l\alpha}-\mathbf{R}_{n\beta})} \quad (20)$$

з $L_1^{AB}(\mathbf{q}) = L_5^{AB}(\mathbf{q}) = J(\mathbf{q})$, $L_1^{BA}(\mathbf{q}) = L_5^{BA}(\mathbf{q}) = J(-\mathbf{q})$ система рівнянь (19) матиме вигляд

$$\begin{aligned} \hbar\omega G_{\alpha\alpha}^{xx}(\mathbf{q}) &= iE_\alpha G_{\alpha\alpha}^{yx}(\mathbf{q}) - iJ(\mathbf{q})\langle\sigma_\alpha^z\rangle G_{\beta\alpha}^{yx}(\mathbf{q}), \\ \hbar\omega G_{\alpha\alpha}^{yx}(\mathbf{q}) &= -i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma_\alpha^z\rangle - iE_\alpha G_{\alpha\alpha}^{xx}(\mathbf{q}) + \\ &+ iJ(\mathbf{q})\langle\sigma_\alpha^z\rangle G_{\beta\alpha}^{xx}(\mathbf{q}), \\ \hbar\omega G_{\beta\alpha}^{xx}(\mathbf{q}) &= iE_\beta G_{\beta\alpha}^{yx}(\mathbf{q}) - iJ(-\mathbf{q})\langle\sigma_\beta^z\rangle G_{\alpha\alpha}^{yx}(\mathbf{q}), \\ \hbar\omega G_{\beta\alpha}^{yx}(\mathbf{q}) &= -iE_\beta G_{\beta\alpha}^{xx}(\mathbf{q}) + iJ(-\mathbf{q})\langle\sigma_\beta^z\rangle G_{\alpha\alpha}^{xx}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (21)$$

Аналогічну форму має система рівнянь для функцій Гріна $G_{\alpha\alpha}^{\nu\nu}(\mathbf{q})$ і $G_{\beta\alpha}^{\nu\nu}(\mathbf{q})$ (з заміною у відповідних місцях $J(\mathbf{q}) \rightarrow J(-\mathbf{q})$). Шуканою є функція Гріна

$$G_{\alpha}^{+-}(\mathbf{q}) = \langle\langle b_{\alpha}|b_{\alpha}^+\rangle\rangle_{\mathbf{q}} = G_{\alpha}^{+x}(\mathbf{q}) - iG_{\alpha}^{+y}(\mathbf{q}). \quad (22)$$

Тут

$$G_{\alpha}^{+x}(\mathbf{q}) = \langle\langle\sigma_{\alpha}^x|\sigma_{\alpha}^x\rangle\rangle_{\mathbf{q}} + i\langle\langle\sigma_{\alpha}^y|\sigma_{\alpha}^x\rangle\rangle_{\mathbf{q}}, \quad (23)$$

$$G_{\alpha}^{+y}(\mathbf{q}) = \langle\langle\sigma_{\alpha}^x|\sigma_{\alpha}^y\rangle\rangle_{\mathbf{q}} + i\langle\langle\sigma_{\alpha}^y|\sigma_{\alpha}^y\rangle\rangle_{\mathbf{q}}. \quad (24)$$

Розв'язки наведених вище рівнянь є такими:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha}^{\pm x}(\omega, \mathbf{q}) &= \pm \frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma_\alpha^z\rangle \times \\ &\times \frac{\hbar\omega \mp E_\beta}{(\hbar\omega - E_\alpha)(\hbar\omega - E_\beta) - \langle\sigma_\alpha^z\rangle\langle\sigma_\beta^z\rangle|J(\mathbf{q})|^2}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha}^{\pm y}(\omega, \mathbf{q}) &= i\frac{\hbar}{2\pi}\langle\sigma_\alpha^z\rangle \times \\ &\times \frac{\hbar\omega \mp E_\beta}{(\hbar\omega - E_\alpha)(\hbar\omega - E_\beta) - \langle\sigma_\alpha^z\rangle\langle\sigma_\beta^z\rangle|J(\mathbf{q})|^2}. \end{aligned} \quad (26)$$

Остаточню для одночастинкових функцій Гріна отримуємо вирази:

$$G_{\beta\alpha}^{+-}(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{\langle\sigma_\beta^z\rangle J(\mathbf{q})}{\hbar\omega - E_\beta} G_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega, \mathbf{q}), \quad (27)$$

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega, \mathbf{q}) &= \frac{\hbar}{\pi}\langle\sigma_\alpha^z\rangle \times \\ &\times \frac{\hbar\omega - E_\beta}{(\hbar\omega - E_\alpha)(\hbar\omega - E_\beta) - \langle\sigma_\alpha^z\rangle\langle\sigma_\beta^z\rangle|J(\mathbf{q})|^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

У нормальній фазі спектр бозонних збуджень, визначений з (28), має вигляд (див. також [24]):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(\mathbf{q}) &= \frac{h_A + h_B}{2} \pm \\ &\pm \frac{1}{2}\sqrt{(h_A - h_B)^2 + 4\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle|J(\mathbf{q})|^2}, \\ J(\mathbf{q}) &= t\left(e^{iq_y a} + 2e^{-iq_y a} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}aq_x\right)\right) \end{aligned} \quad (29)$$

(див. Додаток А). У позначеннях $h = \frac{h_A + h_B}{2}$, $\delta = \frac{h_A - h_B}{2}$ вираз для спектра записується як

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{q}) = h \pm \sqrt{\delta^2 + \frac{1}{9}\langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle J^2(0)|\gamma(\mathbf{q})|^2}. \quad (30)$$

Області та межі існування нормальної (NO) фази, а також фази з бозе-конденсатом (SF-фази) випливають з умови розбіжності функції $G_{\alpha\alpha}^{+-}$ при $\omega \rightarrow 0$, $\mathbf{q} \rightarrow 0$ і визначаються рівнянням

$$h^2 - \delta^2 = \langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle J^2(0) \equiv \langle\sigma_A^z\rangle\langle\sigma_B^z\rangle 9t^2. \quad (31)$$

Відповідна фазова діаграма (T, h) в одиницях $J(0)$ зображена на рис. 1.

4. Спектр бозонних збуджень. Одночастинкова спектральна густина станів

Знайдемо спектральну густина бозонних збуджень, розраховану на один вузол підґратки α ($\alpha = A, B$), для обидвох підґраток як уявну частину функції Гріна $\langle\langle b_{i\alpha}|b_{i\alpha}^+\rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}$

$$\rho_\alpha(\omega) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \text{Im} \langle\langle b_{i\alpha}|b_{i\alpha}^+\rangle\rangle_{\mathbf{q}, \omega+i\varepsilon}. \quad (32)$$

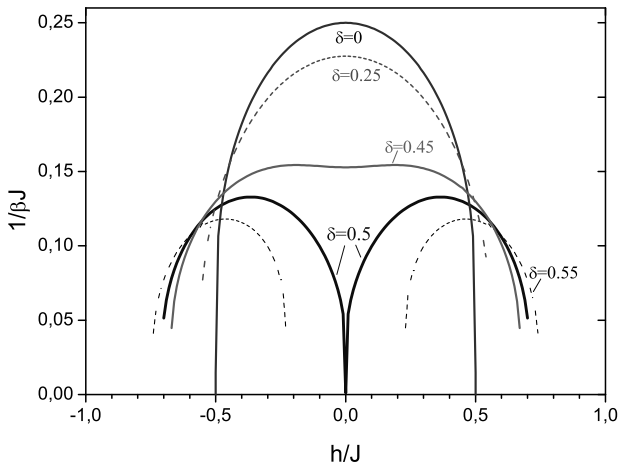


Рис. 1. Фазова діаграма на площині (T, h) при різних значеннях δ ($\delta = 0, 0,25, 0,45, 0,5, 0,55$) [24]. Тут і на наступних рисунках всі енергетичні величини подано в одиницях $J(0)$

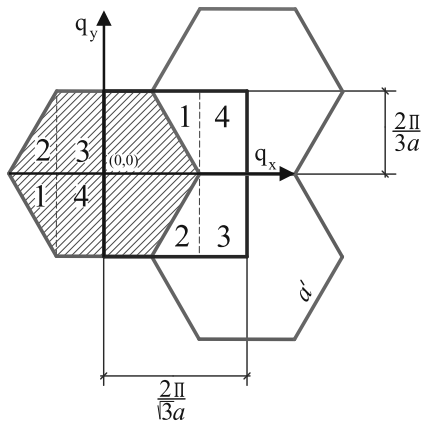


Рис. 2. I-а зона Бріллюена Ω у оберненій ґратці (однаковими цифрами позначено трансляційно еквівалентні області)

Виходячи з (28), отримуємо

$$\rho_\alpha(\omega) = \frac{\langle \sigma_\alpha^z \rangle}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(C_1(\mathbf{q}) \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_1(\mathbf{q})}{\hbar}\right) + C_2(\mathbf{q}) \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_2(\mathbf{q})}{\hbar}\right) \right), \quad (33)$$

де коефіцієнти при δ -функціях

$$C_{1,2}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \pm \frac{\delta_\alpha}{2\sqrt{\delta^2 + \frac{1}{9}\langle \sigma_\alpha^z \rangle \langle \sigma_\beta^z \rangle J^2(0) |\gamma(\mathbf{q})|^2}}. \quad (34)$$

Тут $\alpha \neq \beta$,

$$\delta_\alpha = \begin{cases} \delta, & \alpha = A, \\ -\delta, & \alpha = B, \end{cases}$$

$\varepsilon_1(\mathbf{q}), \varepsilon_2(\mathbf{q})$ – вітки спектра (30). Даний вираз для спектральної густини в НО формально збігається з отриманим в [24] для випадку кубічної ґратки.

Залежність $\rho_\alpha(\omega, \mathbf{q})$ від хвильового вектора виражається через залежність $J(\mathbf{q})$ від \mathbf{q} . Підсумовування за \mathbf{q} відбувається у межах I-ї зони Бріллюена Ω . Для розрахунку даної суми переходимо до інтеграла за змінною $x \equiv |\gamma_{\mathbf{q}}|^2$, вводячи функцію $\rho_0(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \in \Omega} \Phi(|J(\mathbf{q})|^2) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \in \Omega} \Phi(t^2 |\gamma(\mathbf{q})|^2) = \\ &= \int dx \rho_0(x) \Phi(t^2 x), \\ \rho_0(x) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \in \Omega} \delta(x - |\gamma(\mathbf{q})|^2). \end{aligned} \quad (35)$$

За означенням перехід від суми за \mathbf{q} до інтеграла в межах I-ї зони Бріллюена Ω :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \in \Omega} (\dots) = \frac{S}{(2\pi)^2 N} \int_{\Omega} dq_x dq_y (\dots), \quad (36)$$

де S – площа так званої основної області кристала, N – число комірок. Відношення $\frac{S}{N}$ має зміст площі елементарної комірки у прямому просторі, утвореної базисними векторами $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a\sqrt{3}$, $\frac{S}{N} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$. Розглянемо межі інтегрування за q_x і q_y . З рис. 2 видно, що замість інтегрувати в межах області Ω , можна інтегрувати в межах виділеного прямокутника. Оскільки підінтегральна функція парна відносно змінних q_x, q_y , то для суми за $\mathbf{q} \in \Omega$ маємо

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\dots) = \frac{3\sqrt{3}a^2}{(2\pi)^2} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}} dq_x \int_0^{\frac{2\pi}{3a}} dq_y (\dots). \quad (37)$$

У змінних $2\vartheta = \frac{\sqrt{3}}{2} q_x a, \varphi = \frac{3}{2} q_y a$:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\dots) = \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \int_0^{\pi} d\varphi (\dots). \quad (38)$$

Остаточно вираз для $\rho_0(x)$ у даному випадку набуває вигляду

$$\begin{aligned} \rho_0(x) &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{\pi} d\varphi \times \\ &\times \delta(x - 1 - 4 \cos 2\vartheta \cos \varphi - 4 \cos^2 2\vartheta). \end{aligned} \quad (39)$$

Формула (39) прямо відповідає виразу для функції розподілу за квадратом енергії $g(\varepsilon^2)$ для невзаємодіючих частинок у ґратці зі структурою графену [25, 26], згідно з яким $\rho_0(x)$ можемо записати через повний еліптичний інтеграл I-го роду $F(\frac{\pi}{2}, m)$:

$$\rho_0(x) = \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{\sqrt{Z_0}} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}}\right), \quad (40)$$

де

$$Z_0 = \begin{cases} (1 + \sqrt{x})^2 - \frac{1}{4}(x-1)^2, & x \leq 1, \\ 4\sqrt{x}, & 1 \leq x \leq 9; \end{cases}$$

$$Z_1 = \begin{cases} 4\sqrt{x}, & x \leq 1, \\ (1 + \sqrt{x})^2 - \frac{1}{4}(x-1)^2, & 1 \leq x \leq 9. \end{cases}$$

Отриману функцію застосуємо для розрахунку спектральної густини:

$$\rho_\alpha(\omega) = \langle \sigma_\alpha^z \rangle \int dx \rho_0(x) \left(C_1(x) \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_1(\mathbf{q})}{\hbar}\right) + C_2(x) \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_2(\mathbf{q})}{\hbar}\right) \right), \quad (41)$$

де

$$C_{1,2}(x) = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\delta_\alpha}{\sqrt{\delta^2 + \langle \sigma_\alpha^z \rangle \langle \sigma_\beta^z \rangle t^2 x}} \right), \quad (42)$$

$$\langle \sigma_\alpha^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta \hbar \alpha}{2}. \quad (43)$$

Використаємо для δ -функцій у виразі для $\rho_\alpha(\omega)$ зображення $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$, де x_i – корені рівняння $f(x) = 0$. Таким коренем для обох δ -функцій є $x_0 = \frac{(\hbar\omega - h)^2 - \delta^2}{\langle \sigma_\alpha^z \rangle \langle \sigma_\beta^z \rangle t^2}$, причому перша з них дає ненульовий внесок при $\hbar\omega > h$, а друга – при $\hbar\omega < h$. Значення похідної $|f'(x_{1,2})| = \frac{t^2}{\hbar} \left| \frac{\langle \sigma_\alpha^z \rangle \langle \sigma_\beta^z \rangle}{2(\hbar\omega - h)} \right|$. Після деяких спрощень маємо

$$\rho_\alpha(\hbar\omega) = \frac{\rho_\alpha(\omega)}{\hbar} = \frac{\langle \sigma_\alpha^z \rangle}{t^2} \left(\rho_\alpha^{(1)}(\omega) + \rho_\alpha^{(2)}(\omega) \right); \quad (44)$$

тут запроваджено спектральну густину $\rho_\alpha(\hbar\omega)$, розраховану на одиничний інтервал енергії;

$$\rho_\alpha^{(1,2)}(\omega) = \rho_0(x_0) \left| \frac{\hbar\omega - h}{\langle \sigma_\alpha^z \rangle \langle \sigma_\beta^z \rangle} \right| \frac{\hbar\omega - h + \delta_\alpha}{\hbar\omega - h}, \quad (45)$$

$\alpha, \beta = A, B, \alpha \neq \beta$,

при цьому $\rho_\alpha^{(1)}(\omega)$ стосується області $\hbar\omega > h$, а $\rho_\alpha^{(2)}(\omega)$ – області $\hbar\omega < h$.

Розглянемо межі, в яких змінюються енергії $\varepsilon_1(x)$ і $\varepsilon_2(x)$ зонного спектра бозонів в області значень аргумента $0 \leq x \leq 9$. Для визначеності візьмемо $\delta > 0$. Можливі такі випадки:

1) $\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle > 0$.

Ця нерівність виконується, якщо $h_A > 0, h_B > 0$ ($h > 0$) або $h_A < 0, h_B < 0$ ($h < 0$) ($h_A = h + \delta, h_B = h - \delta$). Спектральна густина $\rho_\alpha(\hbar\omega)$ відмінна від нуля, якщо

$$h - \sqrt{\delta^2 + 9\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle t^2} \leq \hbar\omega \leq h - \delta \quad (46)$$

та

$$h + \delta \leq \hbar\omega \leq h + \sqrt{\delta^2 + 9\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle t^2}. \quad (47)$$

Межі зон даються максимальним і мінімальним значенням енергій $\varepsilon_2(x)$ і $\varepsilon_1(x)$, відповідно. При цьому

$$\begin{aligned} \min \varepsilon_1 = \varepsilon_1(x=0) &\equiv h + \delta, \\ \max \varepsilon_2 = \varepsilon_2(x=0) &\equiv h - \delta. \end{aligned} \quad (48)$$

Дані значення енергій визначають щільну в спектрі (ширина щільності $\Delta\varepsilon = 2\delta$). Система є в нормальній фазі, якщо для додатних енергій h_A і h_B хімічний потенціал μ розташований під нижнім краєм зони $\varepsilon_2(x)$, а для від'ємних енергій – над верхнім краєм зони $\varepsilon_1(x)$. Повинні виконуватись умови

$$\min \varepsilon_2 = \varepsilon_2(x=9) \equiv h - \sqrt{\delta^2 + 9\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle t^2} > 0$$

у першому із цих випадків та

$$\max \varepsilon_1 = \varepsilon_1(x=9) \equiv h + \sqrt{\delta^2 + 9\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle t^2} < 0$$

– у другому (у нашій моделі енергія бозонів завжди відраховується від рівня хімічного потенціалу).

2) $\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle < 0$.

При $\delta > 0$ така нерівність має місце, коли $h_A > 0, h_B < 0$ ($h > 0$ або $h < 0$). Межі зон визначаються тепер нерівностями

$$h - \delta \leq \hbar\omega \leq h - \sqrt{\delta^2 - 9|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle| t^2} \quad (49)$$

та

$$h + \sqrt{\delta^2 - 9|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle| t^2} \leq \hbar\omega \leq h + \delta. \quad (50)$$

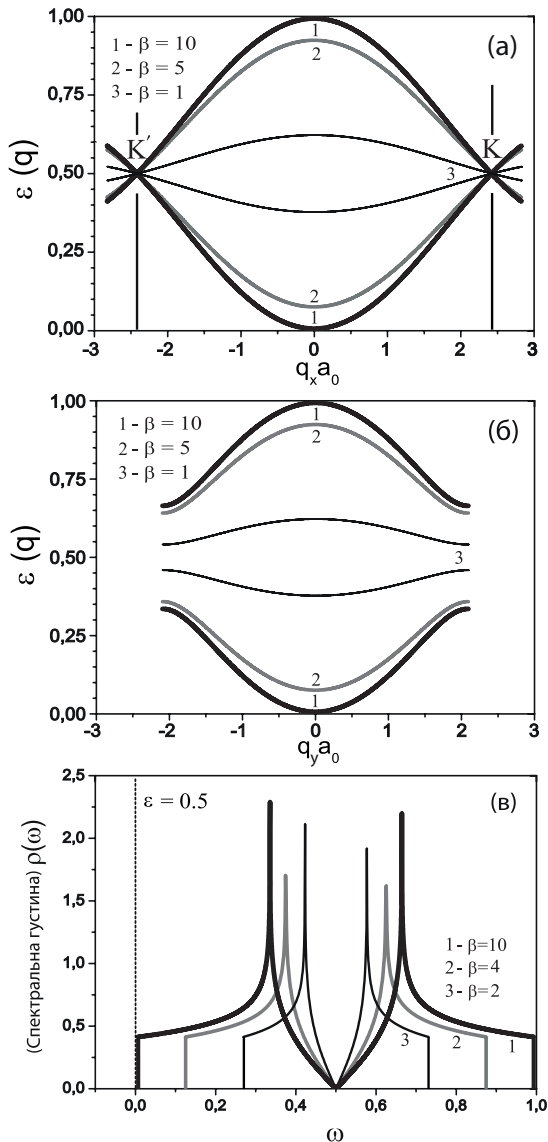


Рис. 3. Закони дисперсії бозонних збуджень у гексагональній ґратці (а), (б) та частотна залежність одночастинкової спектральної густини станів $\rho(\omega)$ (в) у випадку $\delta = 0$ та одночастинкової енергії $\varepsilon = 0,5$. Одночастинкова спектральна густина станів отримана для температур $\beta = 10, 4, 2$ ($\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{2} - \langle \sigma_\alpha^z \rangle$): $\langle n_\alpha \rangle_{\beta=10} = 0,0066$, $\langle n_\alpha \rangle_{\beta=4} = 0,1192$, $\langle n_\alpha \rangle_{\beta=2} = 0,2689$

Щілина в спектрі обмежена значеннями енергії

$$\begin{aligned} \min \varepsilon_1 &= \varepsilon_1(x=9) = \\ h + \sqrt{\delta^2 - 9|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle| t^2} &> 0, \\ \max \varepsilon_2 &= \varepsilon_2(x=9) = \\ h - \sqrt{\delta^2 - 9|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle| t^2} &< 0 \end{aligned} \quad (51)$$

і ширина щілини становить $\Delta\varepsilon = 2(\delta^2 - 9|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle| \times t^2)^{1/2}$. Хімічний потенціал перебуває у щілині при виконанні вказаних нерівностей. Сама ж щілина тут зникає при $\delta = \pm 3t\sqrt{|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle|}$.

Поведінка функцій $\rho_\alpha(\hbar\omega)$ на краях зон визначається як функцією розподілу $\rho_0(x_0)$, де аргумент x_0 змінюється з частотою, так і повним множником, що є біля $\rho_0(x_0)$ у формулі (45). При наближенні до країв зон, у тому числі при $x_0 \rightarrow 0$ (що відповідає граничному переходу $\hbar\omega \rightarrow h \pm \delta$), функція $\rho_0(x_0)$ прямує до скінченного значення, яке дорівнює $\frac{1}{\pi\sqrt{3}}$. Це впливає з формули (14), оскільки у цій границі $Z_1(x_0)/Z_0(x_0) \rightarrow 0$, $\sqrt{Z_0(x_0)} \rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2}$, $F(\pi/2, 0) = \frac{\pi}{2}$.

З іншого боку,

$$\hbar\omega - h + \delta_\alpha \rightarrow \begin{cases} 1, & \hbar\omega \rightarrow h + \delta_\alpha, \\ 0, & \hbar\omega \rightarrow h - \delta_\alpha; \end{cases}$$

і тому

$$\begin{aligned} \rho_A(\hbar\omega) &\rightarrow \begin{cases} \frac{2}{t^2} \frac{\delta}{|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle|} \langle \sigma_A^z \rangle \frac{1}{\pi\sqrt{3}}, & \hbar\omega \rightarrow h + \delta, \\ 0, & \hbar\omega \rightarrow h - \delta; \end{cases} \\ \rho_B(\hbar\omega) &\rightarrow \begin{cases} 0, & \hbar\omega \rightarrow h + \delta, \\ \frac{2}{t^2} \frac{\delta}{|\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle|} \langle \sigma_B^z \rangle \frac{1}{\pi\sqrt{3}}, & \hbar\omega \rightarrow h - \delta. \end{cases} \end{aligned} \quad (52)$$

Розкладаючи у ряди функції $Z_0(x)$, $Z_1(x)$, $F(\pi/2, m)$ при малих значеннях аргумента, можна переконались, що при невеликих відхиленнях від точок, де $\rho_{A,B} = 0$, ці функції наростають зі змінною частоти за лінійним законом. У всіх інших випадках функції $\rho_A(\hbar\omega)$ і $\rho_B(\hbar\omega)$ на краях зон стають рівними нулю стрибкоподібно.

Числові розрахунки, проведені за формулою (45) при врахуванні виразів (15) для середніх $\langle \sigma_A^z \rangle$, $\langle \sigma_B^z \rangle$, підтверджують таку топологію спектральних густин. Зокрема, у згаданому вище випадку 1), коли хімічний потенціал перебуває під або над обома зонами, спектральна густина з одного боку щілини має стрибок, а з другого – наростає плавно. Якщо хімічний потенціал є в щілині, то спектральна густина має стрибки з обох боків. Загальною і відомою для моделі Бозе–Хаббарда властивістю є те, що в області $\hbar\omega < 0$ (нижче рівня хімічного потенціалу) спектральні густини ρ_A і ρ_B від’ємні, а в області $\hbar\omega > 0$ (вище рівня μ) вони є додатними.

Для гексагональної ґратки типу графену у випадку, коли глибини потенціальних ям однакові ($\varepsilon_A = \varepsilon_B$), маємо безщілинний спектр ($\Delta\varepsilon = 0$) бозонних збуджень. На рис. 3, а, б – зображено зміну ширини енергетичної зони у спектрі із зміною

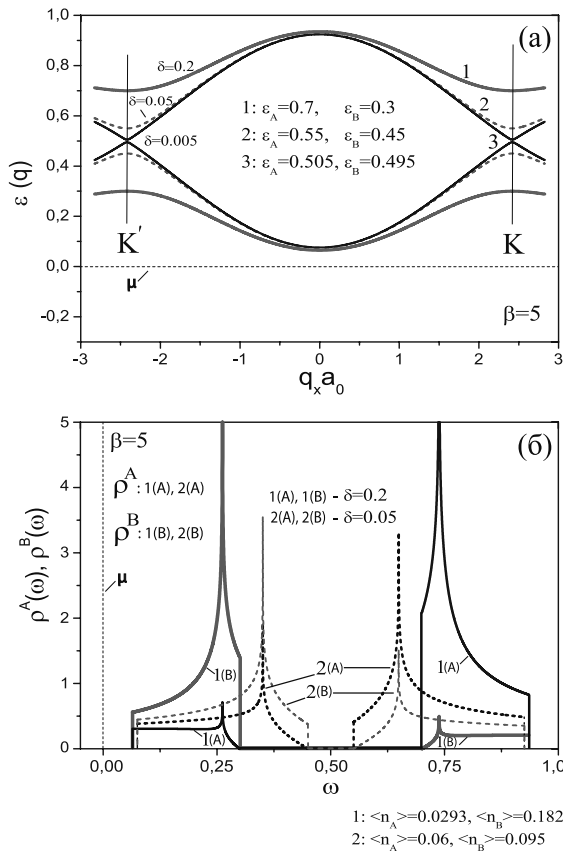


Рис. 4. Закони дисперсії $\varepsilon(\mathbf{q})$ для NO-фази для значень $\delta = 0,005, 0,05, 0,2$ при $\beta = 5$ (а). Рівень хімічного потенціалу ($\mu = 0$) розміщений нижче зонного спектра (пунктирна лінія). Частотна залежність одночастинкової спектральної густини для підґраток А, В наведена для значень $\delta = 0,2, 0,05$ при $\beta = 5$ (б)

температури: в міру пониження температури ширина зони збільшується і досягає максимуму при температурі фазового переходу у стан із бозе конденсатом. Дві вітки спектра дотикаються у кутах зони Бріллуена в точках Дірака K', K .

Закон дисперсії бозонних збуджень для іншого перерізу енергетичної поверхні спектра вздовж осі q_y в межах 1-ї зони Бріллуена (компонента $q_x = 0$) зображено на рис. 3, б. Тут дві вітки спектра розходяться на краю зони Бріллуена. Для даного випадку $\delta = 0$ ($\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0,5$) отримано одночастинкову спектральну густину (рис. 3, в) для деяких температур. В околі точок Дірака енергетичний спектр (рис. 3, а) змінюється за лінійним законом.

У випадку різних глибин потенціальних ям ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_B$) на краю зони Бріллуена виникає згада-

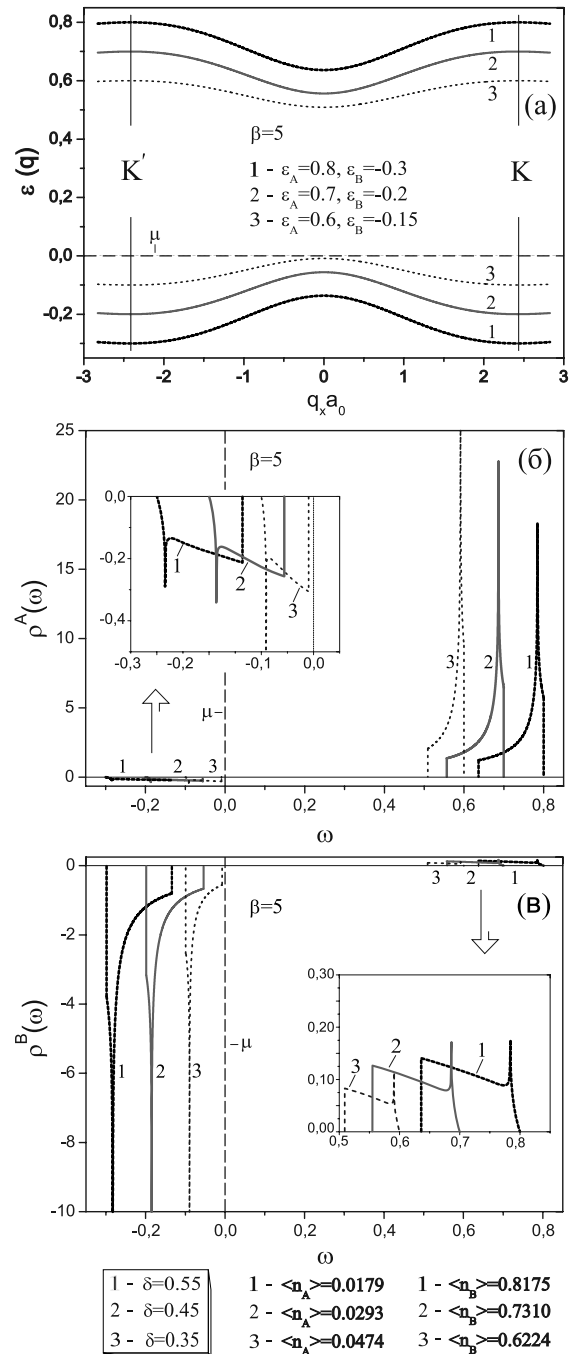


Рис. 5. Закони дисперсії для NO-фази при різних значеннях піврізниці одночастинкових енергій $\delta = 0,35, 0,45, 0,55$ (а) та одночастинкові спектральні густини станів для двох підґраток: А - (б), В - (в) для значень $\varepsilon_A, \varepsilon_B$, вказаних на рисунку. Наведено середнє число заповнення вузлів у елементарній комірці $\langle n_\alpha \rangle, \alpha = A, B$. Пунктирна лінія вказує розташування рівня хімічного потенціалу ($\mu = 0$)

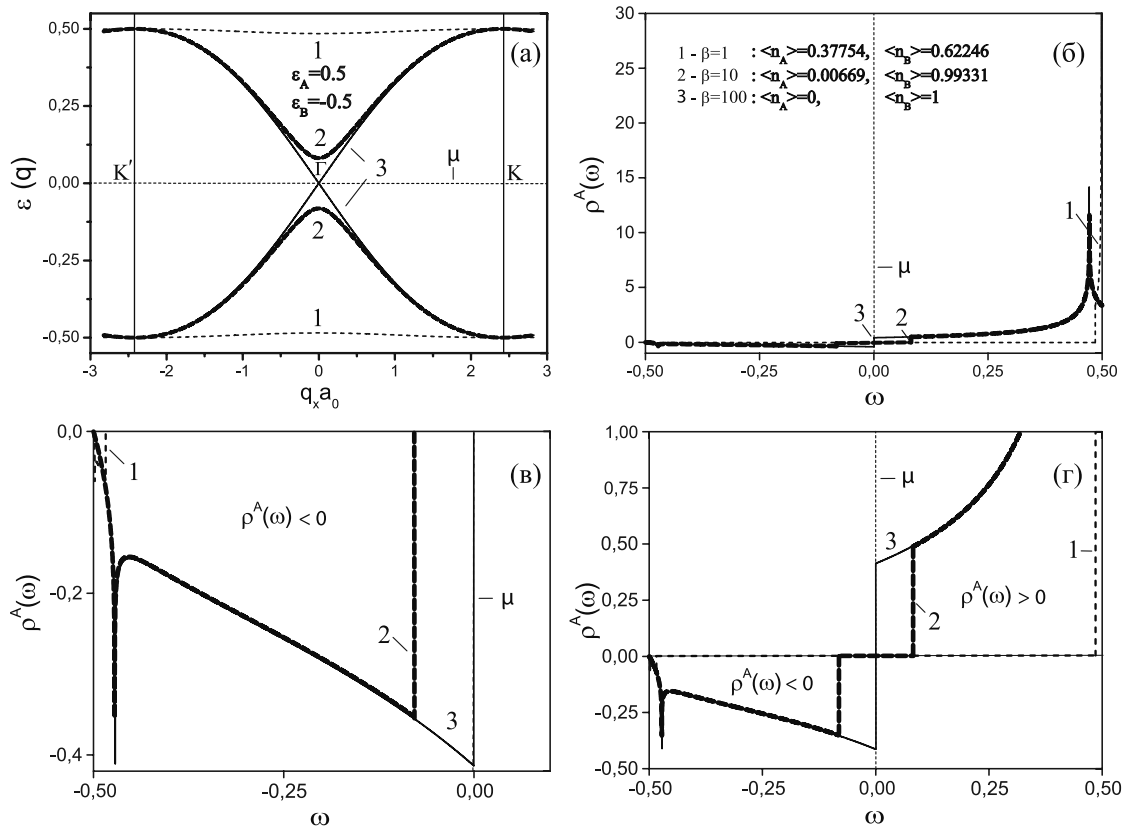


Рис. 6. Закони дисперсії $\varepsilon(\mathbf{q})$ ($\delta = 0,5$) для температур $\beta = 1, 10, 100$ (значення критичної температури $kT_c = 0$) у NO-фазі наведено на рисунку (а); одночастинкова спектральна густина станів $\rho_A(\omega)$ для підґратки А зображена на рисунках (б), (в), (г). Нижні рисунки (в), (г) для спектральної густини станів подано для краю ілюстрації частотної залежності $\rho_A(\omega)$ в (б). Рівень хімічного потенціалу розміщений у середині енергетичної щілини

на вище щілина, ширина якої визначається різницею одновузлових енергій. На рис. 4, а зображено енергетичний спектр бозонних збуджень при оберненій температурі $\beta = 5$. Тут розглянуто невелику різницю одновузлових енергій $\delta = 0,005, 0,05, 0,2$ ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_B > 0$). Величина щілини $\Delta\varepsilon$ у спектрі дорівнює 2δ ($\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle > 0$), а її межами є $\hbar\omega_{1,2} = h \pm \delta$. Для спектра бозонних збуджень, розміщеного над рівнем хімічного потенціалу μ , отримуємо додатні значення спектральних густин (рис. 3, б, 4, б), а у випадку, коли зони розташовані під рівнем μ , спектральні густини від'ємні. Крайні значення частот, які обмежують область, де $\rho_\alpha(\hbar\omega) \neq 0$, дорівнюють $\hbar\omega_{3,4} = h \pm \sqrt{\delta^2 + \langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle J^2(0)}$.

У випадку, коли рівень хімічного потенціалу заходить між зони (див. рис. 5, а при тій самій температурі $\beta = 5$), отримуємо суттєво іншу поведінку енергетичного спектра бозонних збуджень.

Екстремуми віток спектра при $\mathbf{q} = 0$ звернені у напрямку рівня хімічного потенціалу μ . Від'ємні значення одночастинкової спектральної густини ($\rho(\hbar\omega) < 0$) відповідають нижній зоні, розміщеній під рівнем хімічного потенціалу μ , а додатні – верхній зоні (рис. 5, б, в).

З фазової діаграми (T, h) (рис. 1) видно, що у точці фазового переходу між NO- і SF-фазами, де відбувається розділення на дві області SF-фази, відповідає критичне значення щілини у спектрі бозонних збуджень $\Delta(kT_c) = 2\delta_c = 1$ (в одиницях $J(0)$). На рис. 6, а для $\delta = 0,5$, проілюстровано поведінку енергетичного спектра бозонних збуджень при різних температурах у випадку, коли рівень хімічного потенціалу лежить у центрі зони. При температурі $\beta = 100$ (що практично відповідає абсолютному нулю температури) дві вітки спектра практично дотикаються у центрі зони при ($\mathbf{q} = 0$);

це відповідає точці фазового переходу (NO \rightarrow SF) для $\delta = 0,5$, $\beta_c \rightarrow \infty$. Середнє число заповнення бозе частинкою вузла підґратки A $\langle n_A \rangle = 0$, в той час, як для підґратки B $\langle n_B \rangle = 1$. Також показано, який вигляд має одночастинкова спектральна густина станів на вузлі A для значень $\beta = 1, 10$ і близько критичної точки при $\beta = 100$ ($kT_c \simeq 0$), (рис. 6, б-2).

Характер перебудови частотної залежності одночастинкової спектральної густини станів залежно від розташування рівня хімічного потенціалу якісно узгоджується із результатами розрахунків методом точної діагоналізації для моделі одновимірного ланцюжка, де розглядалися перестрибування жорстких бозонів на сусідні вузли [23], і отримувалися від'ємні значення одночастинкових спектральних густин для енергій, розташованих нижче рівня хімічного потенціалу.

5. Висновки

На основі моделі жорстких бозонів розраховано енергетичний спектр бозонних збуджень та одночастинкові спектральні густини для плоскої гексагональної ґратки типу графену.

Розглянуто особливості форми зонного спектра та спектральної густини у нормальній фазі (NO) залежно від розташування рівня хімічного потенціалу, різниці між локальними енергіями частинок у підґратках та температури.

Проаналізовано умови появи щілини у зонному спектрі. Отримано, що у випадку жорстких бозонів, коли частинки описуються статистикою Паулі, виникає температурно залежна щілина (на відміну від електронів у ґратках типу графену).

Щілина у спектрі існує:

– на краю зони Бріллоена (рівень хімічного потенціалу розташований нижче (вище) енергетичних зон), $\Delta\varepsilon = 2\delta$;

– при $\mathbf{q} = 0$ (рівень хімічного потенціалу розташований між енергетичними зонами), $\Delta\varepsilon = 2\sqrt{\delta^2 - |\langle \sigma_A^z \rangle \langle \sigma_B^z \rangle| J^2(0)}$.

У першому із цих випадків щілина зникає при $\delta = 0$; як наслідок, з'являються діраківські точки з лінійним законом дисперсії в точках K, K' зони Бріллоена.

У другому випадку щілина стає відсутньою при $kT = 0$, $h = 0$ і $\delta = \frac{1}{2}J(0)$ ($\delta = \frac{1}{2}$ в одиницях

$J(0)$). Тут також з'являється лінійний спектр діраківського вигляду ($\varepsilon_{\mathbf{q}} \sim \frac{J(0)}{2\sqrt{2}}aq$).

Вигляд спектральних густин відповідає загальним критеріям: ці густини від'ємні в області $\omega < 0$ і додатні при $\omega > 0$. Специфіка гексагональної структури ґратки проявляється в наявності логарифмічних сингулярностей у кривих $\rho_{\alpha}(\hbar\omega)$ для кожної із зон, та у стрибкоподібному обертанні на нуль на краях спектра (за винятком точок $\hbar\omega = h - \delta_{\alpha}$, де густина прямує до нуля за лінійним законом).

Результати нашого дослідження можуть скласти основу опису термодинаміки бозе-атомів у гексагональних оптичних ґратках та подальшого вивчення їх динаміки (до експериментальних засобів, що дозволяють безпосередньо виявляти особливості енергетичного спектра та спектральних густин ультрахолодних атомів у такого типу системах, належать брегівська міжзонна спектроскопія та брегівська спектроскопія з імпульсним розділенням [27, 28]). Для повного розв'язання задачі необхідно розглянути ще випадок SF-фази (коли присутній бозе-конденсат). На відміну від нормальної фази, у SF-фазі хімічний потенціал перебуває у межах однієї з енергетичних зон. Внаслідок цього відбувається значна перебудова бозонного спектра, пов'язана з появою додаткових підзон [24, 29, 30]. Відповідні розрахунки законів дисперсії в зонах і спектральних густин для ґратки типу графену будуть предметом нашого окремого розгляду.

ДОДАТОК А

Гексагональна ґратка типу графену

У випадку оптичних ґраток, двовимірна гексагональна ґратка типу графену отримується інтерференцією трьох когерентних лазерних променів [8], сума хвильових векторів яких дорівнює нулю $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$ і кути між напрямками $\frac{2\pi}{3}$. Така ґратка містить дві трикутні підґратки A і B , зсунуті на вектор $\frac{(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{3}$. Елементарна комірка ґратки містить два вузли, по одному вузлу із обидвох підґраток. Для даної ґратки (рис. 7) вектори трансляцій:

$$\mathbf{a}_1 = (a\sqrt{3}, 0), \quad \mathbf{a}_2 = \left(a\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}a\right). \quad (\text{A1})$$

Гексагональній ґратці відповідає гексагональна зона Бріллоена в оберненому просторі хвильових векторів. Це є правильний шестикутник з двома нееквівалентними точками K, K' в кутах зони (рис. 8). Вектори трансляцій:

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}a}, \frac{1}{3a}\right), \quad \mathbf{b}_2 = \left(0, \frac{2}{3a}\right), \quad (\text{A2})$$

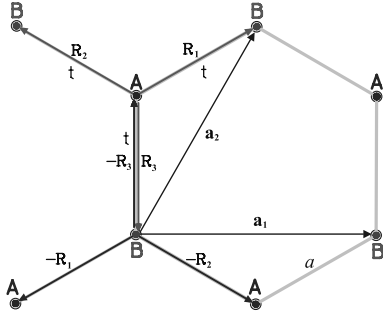


Рис. 7. Найближчі сусіди вузлів з підґраток А і В

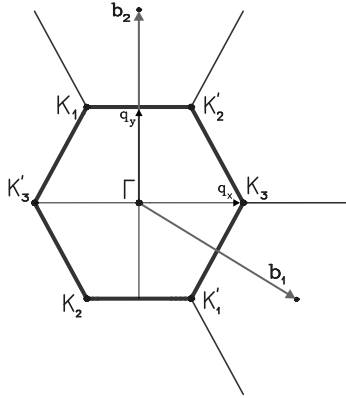


Рис. 8. І-а зона Бріллюена, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ – вектори трансляцій

$|\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = \frac{2}{3a}$, a – відстань між найближчими сусідами у прямій ґратці. Відстань від центра зони Бріллюена до точок K, K' дорівнює $\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$.

При розгляді енергетичного спектра квантових частинок (бозонів) на оптичній ґратці можна використовувати підхід сильного зв'язку. Він ґрунтується на врахуванні перестрибувань частинки між найближчими вузлами, яке описується параметром t , пов'язаним із перекриттям хвильових функцій бозе-частинок, локалізованих у цих вузлах. Координатне число кожного атома $z = 3$

$$\mathbf{R}_1 = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2} \right), \mathbf{R}_2 = \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2} \right), \mathbf{R}_3 = (0, -a). \quad (\text{A3})$$

Фур'є-образи енергії перестрибування на сусідні вузли у двох випадках: $A \Rightarrow B$ ($J^{AB}(\mathbf{q})$) і $B \Rightarrow A$ ($J^{BA}(\mathbf{q})$) відрізняються знаком перед векторами \mathbf{R}_c (рис. 7):

$$J^{AB}(\mathbf{q}) = t \sum_{c=1}^3 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_c}, \quad J^{BA}(\mathbf{q}) = t \sum_{c=1}^3 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_c}. \quad (\text{A4})$$

Отримуємо

$$J^{AB}(\mathbf{q}) = t \left(e^{-iq_y a} + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} q_x a\right) e^{i\frac{q_y a}{2}} \right) \equiv J(\mathbf{q}),$$

$$J^{BA}(\mathbf{q}) \equiv J(-\mathbf{q}) \quad (\text{A5})$$

і в загальному випадку безрозмірний параметр, пов'язаний із перенесенням $A \Rightarrow B$ між найближчими сусідами, має вигляд

$$\gamma(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{|J^{AB}(\mathbf{q}) J^{BA}(\mathbf{q})|}}{t} = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} q_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2} q_y a\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2} q_x a\right)}. \quad (\text{A6})$$

Зауважимо, що $\gamma(\mathbf{q}) = 0$ в точках K' і K зони Бріллюена.

1. M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hänsch, and I. Bloch, Nature **415**, 39 (2002).
2. M. Greiner, O. Mandel, T.W. Hänsch, and I. Bloch, Nature **419**, 51 (2002).
3. I. Bloch, Nature Phys. **1**, 23 (2005).
4. P. Soltau-Panahi, J. Struck, A. Bick, W. Plenkers, G. Meinel, C. Becker, P. Windpassinger, K. Sengstock, P. Hauke, and M. Lewenstein, Nature Phys. **7**, 434 (2011).
5. D.-S. Lühmann, Phys. Rev. A **87**, 043619 (2013).
6. Q.-Q. Lu and J.-M. Hou, Commun. Theor. Phys. **53**, 861 (2010).
7. P. Soltau-Panahi, D.-S. Lühmann, J. Struck, P. Windpassinger, and K. Sengstock, Nature Phys. **8**, 71 (2012).
8. E. Albus, X. Fernandez-Gonzalvo, J. Mur-Petit, J.J. Garcia-Ripoli, and J.K. Pachos, Ann. Phys. **328**, 64 (2013).
9. Z. Chen and B. Wu, Phys. Rev. Lett. **107**, 065301 (2011).
10. S. Koghee, L.-K. Lim, M.O. Goerbig, and C. Morais-Smith, Phys. Rev. A **85**, 023637 (2012).
11. M.P.A. Fisher, P.B. Weichman, G. Grinstein, and D.S. Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
12. D. Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).
13. R.T. Whitlock and P.R. Ziesel, Phys. Rev. **131**, 2409 (1963).
14. C.N. Varney, K. Sun, V. Galitski, and M. Rigol, New J. Phys. **14**, 115028 (2012).
15. T. Matsubara and H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. **16**, 569 (1956); **17**, 19 (1957).
16. G.A. Czathy, J.D. Reppy, and M.H.W. Chan, Phys. Rev. Lett. **91**, 235301 (2003).
17. S. Robashkiewicz, R. Micnas, and K.A. Chao, Phys. Rev. B **23**, 1447 (1981); **24**, 1579 (1981).
18. G.D. Mahan, Phys. Rev. B **14**, 780 (1976).
19. M.J. Puska and R.M. Nieminen, Surf. Sci. **157**, 413 (1985).
20. W. Brenig, Surf. Sci. **291**, 207 (1993).
21. I.V. Stasyuk and I.R. Dulepa, Condens. Matter Phys. **10**, 259 (2007).
22. І.В. Стасюк, І.Р. Дулепа, Журн. фіз. досл. **13**, 2701 (2009).
23. I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, and R.Ya. Stetsiv, Ferroelectrics **426**, 6 (2012).
24. I.V. Stasyuk, and O. Vorobyov, Condens. Matter Phys. **16**, 23005 (2013).
25. H.B. Rosestock, J. Chem. Phys. **16**, 2064 (1953).
26. J.P. Hobson and W.A. Nierenberg, Phys. Rev. **89**, 662 (1953).

27. P.T. Ernst, S. Götze, J.S. Krauser, K. Pyka, D.-S. Lühmann, D. Pfannkuche, and K. Sengstock, *Nature Phys.* **6**, 56 (2010).
28. N. Fabbri, S.D. Huber, D. Clément, L. Fallani, C. Fort, M. Inguscio, and E. Altman, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055301 (2012).
29. Y. Ohashi, M. Kitaura, and H. Matsumoto, *Phys. Rev. A* **73**, 033617 (2006).
30. C. Menotti and N. Trivedi, *Phys. Rev. B* **77**, 235120 (2008).

Одержано 24.02.14

И.В. Стасюк, И.Р. Дулепа, О.В. Вельчко

ИССЛЕДОВАНИЕ БОЗОННОГО
СПЕКТРА ДВУМЕРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ РЕШЕТОК
СО СТРУКТУРОЙ ТИПА ГРАФЕНА.
НОРМАЛЬНАЯ ФАЗА

Резюме

Исследован зонный спектр бозе-атомов в двумерных гексагональных оптических решетках со структурой типа графена. В приближении хаотических фаз рассчитаны для нормальной фазы законы дисперсии в зонах и одночастичные спектральные плотности. Для решетки с энергетически эквивалентными узлами получен безщелевой спектр с точками Дирака на краях зоны Бриллюэна. Химический потенциал располагается в этом случае вне разрешенной энергетической зоны. При различии между энергиями частиц на узлах разных подрешеток, когда возникает щель

в спектре, химический потенциал может располагаться между подзонами. Определены частотные зависимости одночастичной спектральной плотности для обеих подрешеток в зависимости от размещения уровня химического потенциала, величины щели в зонном спектре и температуры.

I.V. Stasyuk, I.R. Dulepa, O.V. Velychko

INVESTIGATION OF THE BOSONIC
SPECTRUM OF TWO-DIMENSIONAL OPTICAL
GRAPHENE-TYPE LATTICES. NORMAL PHASE

S u m m a r y

The band spectrum of bosonic atoms in two-dimensional honeycomb optical lattices with the graphene-type structure has been studied. The dispersion laws in the bands and the one-particle spectral densities are calculated for the normal phase in the random phase approximation. The temperature-dependent gapless spectrum with Dirac points located at the Brillouin zone boundary is obtained for the lattice with energetically equivalent sites, with the corresponding chemical potential lying outside the allowed energy band. Different on-site energies in the sublattices are shown to induce the appearance of a gap in the spectrum, so that the chemical potential can be located between the subbands, which gives rise to a substantial reconstruction of the band spectrum. The frequency dependences of the one-particle spectral density for both sublattices are determined as functions of the chemical potential level, the spectral gap magnitude, and the temperature.