

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР
«ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»**

СОТНІКОВ АНДРІЙ ГЕННАДІЙОВИЧ

УДК 537.876, 538.9

**ПЕРШОПРИНЦИПНІ ТА СЕРЕДНЬОПОЛЬОВІ ТЕОРЕТИЧНІ
ПІДХОДИ ДО ОПИСУ БЛИЗЬКОКРИТИЧНИХ ЯВИЩ
У КВАНТОВИХ ГАЗАХ**

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

Харків — 2020

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера
ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України.

Науковий консультант: доктор фізико-математичних наук, професор,
академік НАН України
Слюсаренко Юрій Вікторович,
Інститут теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера
ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут»
НАН України, завідувач відділу статистичної фізики і
квантової теорії поля.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор,
член-кореспондент НАН України
Ямпольський Валерій Олександрович,
Інститут радіофізики та електроніки імені
О.Я. Усикова НАН України, головний науковий
співробітник відділу теоретичної фізики;
доктор фізико-математичних наук, професор,
Ходусов Валерій Дмитрович,
Харківський національний університет
імені В.Н. Каразіна МОН України,
професор кафедри фізики ядра та високих енергій
імені О.І. Ахієзера;
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник,
Шевченко Сергій Миколайович,
Фізико-технічний інститут низьких температур
імені Б.І. Веркіна НАН України, завідувач відділу
надпровідних і мезоскопічних структур.

Захист відбудеться 21 липня 2020 р. о 15 годині на засіданні спеціалізованої
вченої ради Д 64.845.02 Національного наукового центру «Харківський фізи-
ко-технічний інститут» НАН України за адресою: 61108, м. Харків, вул. Ака-
демічна, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Національного наукового
центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України за адресою:
61108, м. Харків, вул. Академічна, 1, та на офіційному сайті ННЦ ХФТІ.

Автореферат розісланий 18 червня 2020 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради,
канд. фіз.-мат. наук

А.І. Кірдин

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Вже більше сторіччя світове наукове співтовариство спирається на відкриті закони квантового світу з метою здобуття нових знань та їх використання для технічного прогресу людства. Слід зазначити, що широкий загал, який цікавився науковими аспектами розвитку суспільства, досить тривалий час мусив усвідомлювати власне самі відкриті закони мікросвіту та звикати до них, оскільки навіть їх формулювання було незвичним, деякою мірою дивовижним. Хоча б тому, що такі формулювання вимагали залучення поняття ймовірності, яка закладена в основу квантової механіки, на відміну від звичних детерміністських фізичних законів-попередників. Зусилля науковців за ці роки увінчалися неабиякими успіхами. Зокрема, на даний час вважається, що у випадку, коли об'єктом досліджень є окрема частинка (будь то елементарна частинка, ядро, атом чи молекула), більшість квантових процесів у конкретних системах із наданими параметрами може бути змодельовано, розраховано та передбачено, принаймні з використанням сучасних обчислювальних методів. Але, як слід зазначити, такі дослідження, попри їх показовість, цікавими могли бути, скоріше за все, для вчених, що працювали у відповідних областях фізики, хімії, техніки, чи тісно з ними пов'язаними.

Зовсім по іншому виглядає ситуація у випадку, коли мова заходить про прояв квантових ефектів у системах багатьох частинок. З одного боку, квантова система багатьох частинок стає набагато складнішою або навіть неймовірно складною для послідовного теоретичного опису з перших принципів. З іншого боку, такі ускладнення супроводжуються та компенсуються тими обставинами, що саме поле досліджень стає набагато ширшим та цікавішим, з'являються колективні квантові ефекти, що роблять систему унікальною за властивостями, які не спостерігаються ніде інде у природі. Яскравими прикладами такого прояву квантових властивостей речовини на макрорівні є явища магнетизму, надплинності, надпровідності, колосального магнетоопору тощо. Не дивлячись на багатолітню історію як теоретичних, так і експериментальних досліджень подібних явищ, багато їх аспектів чи механізмів досі залишаються недостатньо зрозумілими й слугують предметом запеклих наукових дискусій по всьому світу – узяти, як приклад, хоча б явище високотемпературної надпровідності. Причина такого стану речей саме у зазначеній складності таких систем для послідовного опису на мікроскопічному рівні.

Неабиякою вдачею у згаданому сенсі є той факт, що серед вражаючого переліку квантових систем існують і такі, що можуть демонструвати яскраві квантові властивості на макрорівні, залишаючись, однак, достатньо простими для опису й передбачення у них тих самих явищ, що виникають і в більш складних системах. Тим самим, такі середовища можуть слугувати певними моделями, так званими універсальними квантовими симуляторами, для вивчення властивостей більш складних середовищ. Мова йде про новітні на даний час системи

– ультрахолодні квантові гази, які можуть послужити зручним плацдармом як для здобуття нових знань про речовину за надзвичайних умов, так і для технологій та завдань майбутнього.

Хоча й ультрахолодні гази є певною мірою спрощеною системою з точки зору побудови першопринципних теорій, вони залишаються нетривіальними системами для всебічного опису та послідовного розв'язку навіть модельних гамільтоніанів. Саме пошук розв'язків для систем, близьких до сучасних експериментів, призводить до необхідності застосування середньопольових підходів, зокрема й розвинутих у дисертаційній роботі. Теоретичні передбачення, таким чином, служать певним орієнтиром та системою відліку для нових експериментів із моделювання новітніх квантових станів матерії та посилення близькокритичних характеристик вже існуючих матеріалів.

Мета і завдання дослідження. Основна мета дисертаційної роботи полягає в розвиненні послідовного опису близькокритичних явищ у квантових газах в рамках першопринципних та середньопольових теорій.

Для досягнення поставленої мети було сформульовано наступні завдання:

- узагальнити теоретичний опис термодинамічних характеристик ідеальних бозе- і фермі-газів на інтервали температур, що відповідають режиму квантового виродження, але де відомі аналітичні наближення стають неточними;
- застосувати першопринципну теорію лінійного відгуку ідеальних газів на зовнішнє електромагнітне збурення, яку побудовано в кандидатській дисертації автора, для опису ефектів фільтрації оптичних сигналів та обміну енергії релятивістських частинок із газами у стані бозе-конденсації;
- теоретично описати явище магнітного впорядкування в незбалансованих двокомпонентних фермі-газах атомів в оптичних ґратках та отримати ефективні спінові гамільтоніани у границі сильного зв'язку;
- узагальнити динамічну теорію середнього поля та відповідні домішко-ві розв'язувачі на випадок багатоконпонентних ферміонних сумішей з високими спіновими симетріями;
- побудувати теорію бозе-конденсації спин-триплетних екситонів у кристалах оксидів кобальту;
- розвинути теоретичний підхід до опису ефективних спінових моделей та низькотемпературних фаз газу електронів у кобальтиках із домішками елементів групи лантану, кальцію, стронцію та фтору;
- дослідити дисперсійні характеристики збуджень та порівняти їх з наявними експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Об'єктом дослідження є ефекти, що виникають в околі низькотемпературних фазових переходів між різними багаточастинковими станами квантових

газів, а також при відгуку таких систем на збудження зовнішніми електромагнітними полями.

Предметом дослідження є ультрахолодні гази атомів лужних і лужноземельних металів та елементів групи лантану, оптичні ґратки, вироджені гази електронів у кристалах оксидів кобальту.

Методи дослідження. Для вирішення поставлених у дисертаційній роботі завдань були використані наступні методи теоретичної фізики: метод вторинного квантування, теорія лінійного відгуку, формалізм функцій Гріна, теорія збурень, спіново-хвильовий підхід, теорія середнього поля, динамічна теорія середнього поля, метод точної чисельної діагоналізації.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше здобуто наступні результати:

1. Наведено аналітичні вирази для залежностей хімічних потенціалів ідеальних квантових газів від температури, що можуть застосовуватись із достатньою точністю на всьому інтервалі температур.

2. Виявлено ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону газами атомів лужних металів у стані конденсації.

3. Передбачено ефект прискорення релятивістських частинок конденсатом та показано можливість визначення спектральних характеристик атомів лужних металів на основі детектування черенковського випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом.

4. Показано, що двокомпонентні фермі-гази з різними амплітудами тунелювання компонент мають переваги з точки зору досягнення у системі магнітно-впорядкованих фаз.

5. Здобуто низькотемпературні фази газів атомів, що мають як різні амплітуди тунелювання, так і різну густину компонент в оптичних ґратках.

6. Встановлено критичні температури переходів між три- та двопідґратковими антиферомагнітно-впорядкованими станами в SU(3)-симетричній моделі Габбарда.

7. Виявлено ефекти впливу спінових симетрій на феромагнітне впорядкування у дво- та триорбітальній моделі Габбарда.

8. Побудовано теорію бозе-конденсації спин-триплетних екситонів у кристалах оксидів кобальту в зовнішньому сталому магнітному полі.

9. Теоретично обраховано низькотемпературні фазові діаграми оксидів кобальту з домішками кальцію, стронцію, фтору та елементів групи лантану.

10. Обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень, що добре узгоджуються з наявними експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Практичне і наукове значення отриманих результатів полягає в доповненні та розширенні наявних уявлень про квантові гази і, зокрема, близькокритичні ефекти в таких системах. Результати, що стосуються обрахованих характеристик черенковского випромінювання в розріджених газах із бозе-конденсатом, можуть бути використані для більш точного визначення спектральних характеристик атомів лужних металів. Результати, що відносяться до ультрахолодних атомів у зовнішніх полях, можуть бути використані при розробці та побудові високоточних оптичних приладів та розробці універсальних квантових симуляторів. Останні можуть бути застосовані для точного вивчення більш складних твердотільних систем з метою посилення таких ефектів, як високотемпературна надпровідність, колосальний магнетопір, орбітальне та магнітне впорядкування тощо. Результати з близькокритичних явищ у кобальтитах можуть бути застосовані в спінтроніці та магнітних пристроях, що потребують високої стійкості по відношенню до термічних флуктуацій та зовнішніх полів.

Особистий внесок здобувача. Основні результати, викладені в дисертації, отримані дисертантом самостійно. Результати дисертації опубліковані у статтях [1-20] і тезах доповідей наукових конференцій [21-50]. Здобувач брав участь у постановці задач, вирішених у дисертації, формулюванні основних ідей та методів дослідження, проведенні найбільш складних аналітичних і чисельних розрахунків, а також виконував контроль та перевірку результатів, отриманих іншими співавторами.

У статті [1] здобувачем було запропоновано використання поліноміального наближення для параметризації хімічного потенціалу ідеальних квантових газів, що надало можливість вивчення термодинамічних характеристик квантових газів на всьому інтервалі температур. У роботах [2-5], із використанням числових методів було проаналізовано характеристики фільтрації сигналів оптичного діапазону в бозе-конденсаті атомів лужних металів та встановлено залежності характеристик фільтрації від зовнішнього сталого магнітного поля. У статті [6] здобувачем показано, що при прольоті релятивістської зарядженої частинки крізь атомну хмару з бозе-конденсатом може бути спостережено зворотний ефект Черенкова, тобто та обставина, що частинка може прискорюватись ультрахолодним газом.

У роботах [7,8] наведено магнітно-впорядковані фази та відповідні фазові переходи в двокомпонентних незбалансованих сумішах фермі-атомів в оптичних ґратках. У статтях [9,10] обчислено вплив просторової анізотропії оптичної ґратки та утримуючого гармонічного потенціалу пастки на термодинамічні характеристики газів.

У статтях [11,12] здобувачем розроблено теоретичний підхід та проведено числовий аналіз фазових переходів в $SU(3)$ -симетричній моделі Габбарда. У роботах [13-15] теоретично обраховано границі магнітно-впорядкованих фаз з

чотирма та шістьма типами ферміонів в ґратці, вплив неперервних симетрій, зв'язку Гунда та кількості орбітальних станів на критичні температури та ентропії квантових газів.

У статті [16] на прикладі двоорбітальної моделі Габбарда здобувачем запропоновано теорію бозе-конденсації екситонів у кристалах оксидів кобальту, що індукована зовнішнім магнітним полем. У статті [17] дисертантом теоретично розраховано низькотемпературні фази у кристалах оксидів кобальту з домішками празеодима. У статті [18] здобувачем виведено ефективну теоретичну модель для сполуки $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ та встановлено фазові переходи у системі під зовнішнім тиском. У роботах [19-20] здобувачем обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень для порівняння з експериментальними даними.

Таким чином, особистий внесок здобувача у вирішенні задач, поставлених у дисертації, є визначальним.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на семінарі інституту теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ, загальнофізичних семінарах фізико-технічного факультету Харківського національного університету ім. В.Н. Каразіна, семінарах фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна, семінарах за запрошенням у закордонних наукових установах: інститут теоретичної фізики, університет Гете, Франкфурт-на-Майні, Німеччина (2010 та 2014 рр.); фізичний факультет університету Стратклайда, Глазго, Великобританія (2012 р.); інститут лазерної фізики, університет Гамбурга, Німеччина (2014 р.); інститут фізики, університет Майнца ім. Йоганна Гутенберга, Німеччина (2014 р.); інститут фізики чеської академії наук, Прага, Чехія (2015 р.); фізичний факультет університету ім. Адама Міцкевича, Познань, Польща (2018 р.); фізичний факультет університету Масарика, Брно, Чехія (2019 р.). Також вони доповідались на наступних міжнародних наукових конференціях та школах: 13th International Conference on Quantum Optics and Quantum Information (Kyiv, Ukraine, May 28 – June 1, 2010), International Workshop and Summer school “Quo Vadis BEC?” (Dresden, Germany, August 2–20, 2010), DPG Physics School “Quantum Gases in Dilute Atomic Vapour” (Bad Honnef, Germany, March 28 – April 1, 2011), International Workshop “Strong Correlations in Multiflavor Ultracold Quantum Gases” (Hamburg, Germany, June 23–24, 2011), International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics (Kharkiv, Ukraine, August 29 – September 2, 2011), International Workshop “Modeling Materials With Cold Gases Through Simulations” (Zurich, Switzerland, November 9–11, 2011), DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Stuttgart, Germany, March 12–16, 2012), 6th International Workshop “Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence” (Lyon, France, June 5–8, 2012), 4th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications” (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2012), DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Hannover, Germany, March 18–22, 2013), International Conference “The New

Generation of Strongly Correlated Electron Systems” (Sestri Levante, Italy, July 1–5, 2013), DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Berlin, Germany, March 17–21, 2014), DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Heidelberg, Germany, March 23–27, 2015), VI International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics” (Kharkiv, Ukraine, June 2–5, 2015), The International Workshop FINES-2015: Finite-Temperature Non-Equilibrium Superfluid Systems (Sopot, Poland, September 14–18, 2015), DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016), DPG Spring Meeting of the Section SKM (Dresden, Germany, March 19–24, 2017), NGSCES 8th International Conference (Barcelona, Spain, September 4–8, 2017), FOR1807 Winter School “Numerical Methods in Strongly Correlated Quantum Systems” (Marburg, Germany, February 19–23, 2018), DPG Spring Meeting of the Section AMOP (Erlangen, Germany, March 4–9, 2018), DPG Spring Meeting of the Section SKM (Berlin, Germany, March 11–16, 2018), 42th International Conference of Theoretical Physics: correlations and coherence on different scales, CCDS 2018 (Ustron, Poland, September 9–14, 2018), DPG Spring Meeting of the Section SAMOP (Rostock, Germany, March 10–15, 2019), DPG Spring Meeting of the Section SKM (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019), X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019 (Kharkiv, Ukraine, June 3–7, 2019), 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2019), XIX National Conference on Superconductivity (Bronislawow, Poland, October 6–11, 2019).

Зв'язок праці з науковими програмами, планами, темами. Дисертацію виконано в Інституті теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України. Вона є складовою частиною наступних проектів:

- базова програма «Відомчий запит НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки та техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Теоретичні дослідження у статистичній фізиці конденсованих середовищ зі спонтанно порушеною симетрією і газоподібних систем і теоретико-групових методів в теорії поля» (номер державної реєстрації 080906UP0010, термін виконання 2006–2010 рр., виконавець);

- цільова програма наукових досліджень Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України «Фундаментальні проблеми у фізиці елементарних частинок, ядерній фізиці та ядерній енергетиці» за темою «Статистична механіка процесів і явищ, пов'язаних із взаємодією частинок і випромінювання з конденсованим середовищем», грант НАН України для молодих вчених № 55/51–2009 (номер державної реєстрації 0109U006375, термін виконання 2009–2010 рр., керівник);

- базова програма «Відомчий запит НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки та техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Розвиток методів статис-

тичної фізики і квантової теорії поля для дослідження проблем конденсованих і газоподібних середовищ і динаміки полів і суперсиметричних подовжених об'єктів» (номер державної реєстрації 0111U009549, термін виконання 2011–2015 рр., виконавець);

- базова програма «Відомчий запит НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки та техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темою «Дослідження класичних і квантових симетрій в теоретико-польових і струнних моделях і проблем статистичної механіки конденсованих середовищ» (номер державної реєстрації 0116U007065, термін виконання 2016–2020 рр., виконавець).

У 2018–2020 рр. робота над дисертацією проводилася в докторантурі Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут».

Публікації. Результати дисертації опубліковані у 50 наукових працях: 20 статтях у фахових вітчизняних і міжнародних періодичних виданнях та 30 тезах доповідей на вітчизняних і міжнародних наукових конференціях.

Структура і обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел із 353 найменувань на 38 сторінках та одного додатку. Робота містить 82 рисунка, 1 з яких займає всю сторінку, і 2 таблиці. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 328 сторінок, обсяг основної частини складає 261 сторінку.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовується актуальність та важливість досліджень, пов'язаних із темою дисертаційної роботи, сформульовано мету, основні завдання та методи досліджень, представлено основні результати роботи, їх наукову новизну і практичне значення. Наведено також інформацію про апробацію результатів дисертаційної роботи, особистий внесок здобувача й описано структуру дисертації.

У **першому розділі** наведено загальні положення теоретичних підходів до опису явищ у квантових газах, тісно пов'язані з питаннями, що вивчаються в дисертації. Розглянуто термодинамічні властивості ідеальних бозе- та фермі-газів за відсутності зовнішніх полів. Зокрема, вказано на відсутність наявних простих аналітичних виразів для хімічних потенціалів квантових газів у проміжній області температур, де мають істотний прояв ефекти обмінної взаємодії між частинками, а відомі низько- або високотемпературні розкладання стають досить неточними для належного опису ефектів у відповідних експериментах. Задля вирішення наявної проблеми побудовано поліноміальне наближення, що спирається на отриманих числових залежностях для хімічних потенціалів від температури і має достатній рівень точності (див. рис. 1).

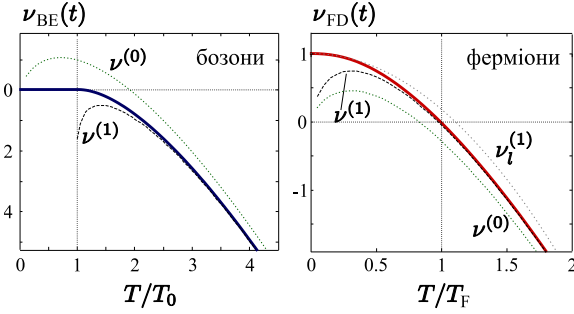


Рис 1: Залежності хімічних потенціалів від температури для ідеальних газів бозонів і ферміонів в одиницях критичної температури бозе-конденсації та енергії Фермі, відповідно. Аналітичні розкладання для відомих граничних випадків позначено пунктирними лініями.

Окрім наведеної методології опису термодинамічних характеристик ідеальних газів за відсутності зовнішніх полів, розглянуто загальні положення лінійної теорії відгуку бозе-газів на зовнішнє збурення електромагнітним полем [1*], де в якості складових частинок виступають атоми лужних металів, що можуть розглядатися як зв'язані стани двох ферміонів різних сортів та для яких розвинуто належне формулювання методу вторинного квантування [2*]. Цей теоретичний підхід добре себе зарекомендував при описі явища уповільнення електромагнітних сигналів у газах атомів лужних металів [3*]. У дисертаційній роботі він надалі використовується задля теоретичного опису явища фільтрації оптичних сигналів та обміну енергією між релятивістськими зарядженими частинками та газом у стані бозе-конденсації.

Властивості квантових газів за присутності періодичних потенціалів ґраток представляють собою велике та активне поле для сучасних досліджень [4*]. Насамперед, це стосується систем, що можуть описуватися ґратковою моделлю Габбарда,

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

де $c^\dagger$ (c) – оператори народження (знищення) частинки зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ на вузлі i та $n = c^\dagger c$ – оператор числа частинок із власними значеннями 0 або 1. Символьне написання $\langle i, j \rangle$ означає підсумовування по сусідніх вузлах ґратки, μ – хімічний потенціал частинок, V_i – амплітуда зовнішнього (утримуючого) потенціалу. Серед величин, що визначаються за допомогою функцій Ваньє в наближенні сильного зв'язування на ґратці: U – амплітуда локальної взаємодії, t_{ij} – амплітуда тунелювання з вузла ґратки i на вузол j .

Наведена модель Габбарда не має точного теоретичного розв'язку в загальному випадку при наявності взаємодії між фермі-частинками. Однак, існує ряд добре зарекомендованих теоретичних підходів: спіново-хвильовий підхід [5*], розкладання в границі сильного зв'язку [6*], середньопольовий підхід для ефе-

ктивної бозонної моделі, динамічна теорія середнього поля [7*], що, маючи власні межі застосовності, є потужними підходами для опису сучасних експериментів та передбачення нових ефектів у квантових газах.

Зокрема, згідно зі спіново-хвильовим підходом [5*], якщо гамільтоніан системи можливо наблизити до білінійної форми запису,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j} \left(A_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} B_{ij} \hat{a}_i \hat{a}_j + \frac{1}{2} B_{ji}^* \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \right),$$

де A_{ij} та B_{ij} – характерні амплітуди процесів на ґратці з відповідними операторами народження $a^\dagger$ та знищення a частинок, то, використовуючи перетворення Боголюбова, його можна записати у термінах квазічастинок,

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}},$$

де E_0 – енергія нульових коливань (або енергія вакуумного стану в системі квазічастинок), а $\omega(\mathbf{k})$ – енергія квазічастинки з хвильовим вектором $\mathbf{k}$,

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega(\mathbf{k}) - A_{\mathbf{k}}], \quad \omega(\mathbf{k}) = \sqrt{A_{\mathbf{k}}^2 - |B_{\mathbf{k}}|^2}.$$

В іншому граничному випадку, коли локальна взаємодія є домінуючою в системі багатьох частинок на ґратці, добре зарекомендованими є методи розкладання в границі сильного зв'язку [6*]. Зокрема, розкладаючи гамільтоніан Габбарда в наближенні $U \gg t$ і в околі заповнення зони провідності наполовину ($n \approx 1$), можна перейти до ефективної спінової моделі, що описується гамільтоніаном

$$\hat{\mathcal{H}}' = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right),$$

де $J=4t^2/U$ є амплітудою ефективного антиферромагнітного зв'язку в обмінному доданку типу Гейзенберга з векторними операторами спіну $\mathbf{S}$, що виражаються через матриці Паулі звичайним чином. Наведений гамільтоніан відповідає так званій t - J моделі, яку застосовують до опису сильно корельованих електронних систем. Зокрема, ця модель активно використовується для обчислення станів високотемпературних надпровідників в легованих антифероманетиках.

Середньопольові теоретичні підходи є потужними методами розв'язання задач у фізиці твердого тіла, насамперед задач, пов'язаних із магнітними властивостями матеріалів, що описуються ефективними спіновими моделями. Найбільш відомим є приклад розв'язку моделі Ізінга, де використовується середньопольова теорія Вейса. При розгляданні більш загальних типів гамільтоніанів виводяться рівняння самоузгодження та досліджуються критичні властивості системи. При розгляді ефективних моделей, де в якості елементарних об'єк-

тів виступають частинки, що підкорюються статистиці Бозе-Ейнштейна, стандартне формулювання середньопольового наближення є достатнім. Однак, при застосуванні аналогічного підходу до моделі Фермі-Габбарда, необхідним є перехід до формулювання в рамках динамічної теорії середнього поля [7*], де ефективне (статичне) поле Вейса замінюється його динамічним аналогом – функціями Вейса, які, завдяки рівнянням самоузгодження, визначають локальні функції Гріна і, таким чином, дають змогу теоретично досліджувати термодинамічні характеристики квантових газів.

Наведені основні першопринципні та середньопольові методи використовуються в наступних розділах дисертаційної роботи для опису як ультрахолодних атомів в оптичних ґратках, так і вироджених електронних газів у кристалічних структурах оксидів кобальту.

У **другому розділі** досліджено близькокритичні явища в ультрахолодних бозе-газах при взаємодії з зовнішнім електромагнітним полем. Зокрема, у першому підрозділі продемонстровано можливість фільтрації світлових сигналів за допомогою ультрахолодного газу атомів лужних металів у стані з конденсатом Бозе-Ейнштейна. Фільтрація імпульсів оптичного діапазону зумовлена резонансною взаємодією світлового імпульсу з газом в фазі з БЕК. У результаті цієї взаємодії частина компонентів початкового імпульсу поглинається системою, інші ж компоненти рухаються з різними значеннями групової швидкості, частина з яких сильно уповільнюється. У границі слабкої інтенсивності збуджуючого електромагнітного поля дані характеристики обраховуються відповідно до формул для групової швидкості $v_g(\omega, B)$ та інтенсивності $I(\omega, B)$ пройде-ного сигналу:

$$v_g(\omega, B) = c / [n'(\omega, B) + \omega(\partial n' / \partial \omega)], \quad I(\omega, B) = I_0(\omega) \exp[-n''(\omega, B)kL],$$

де ω та k – частота та хвильове число електромагнітного поля, B – напруженість сталого магнітного поля, що впливає на енергетичні стани атомів газу за рахунок ефекту Зеемана, c – швидкість світла у вакуумі, n' і n'' – показник заломлення і декремент загасання оптичного середовища (атомної хмари з лінійним розміром L), що виражаються через дійсну та уявну частини діелектричної проникності середовища, яка, в свою чергу, повністю визначається в рамках формалізму функцій Гріна [3*].

Як приклад використання бозе-конденсату атомів в якості фільтру для сигналів оптичного діапазону, обрано розріджений ультрахолодний газ атомів натрію в двох квантових станах надтонкої структури, а саме: стан «1» з повним моментом $F=1$ та його проекцією $m_F=1$ і стан «2» з $F=2$ і $m_F=2$. Для простоти, густини атомів у цих станах обрано однаковими та рівними типовому значенню 10^{12} см^{-3} . В якості сигналу для фільтрації обрано хвильовий пакет з максимумом інтенсивності на частоті $\omega_0=508.848 \text{ ТГц}$ (безпосередня близькість до резонансної D_2 лінії натрію) і гаусівським розподілом інтенсивності з відповідною дисперсією $\sigma=50 \text{ МГц}$. Для такої системи на рис. 2 наведено результати

теоретичних розрахунків із прикладами використання конкретних значень магнітного поля та часів відсікання задля оптимальної фільтрації.

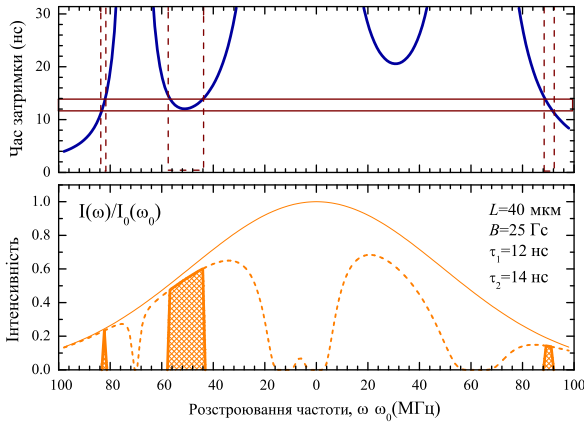


Рис 2: Частотні залежності часової затримки сигналу і його спектральної інтенсивності при проходженні через двокомпонентний бозеконденсат. Реєстрація сигналу проводиться з 12 по 14 нс, що відповідає заштрихованій області у відповідному розподілі інтенсивності.

Додаткові розрахунки показують, що при використанні бозеконденсатів атомів лужних металів, як правило, достатньо двох проходжень світлового імпульсу крізь атомну хмару для практично ідеального відокремлення корисного сигналу.

Підрозділ 2.2 присвячено дослідженню ефектів, пов'язаних із проходженням зарядженої частинки крізь бозеконденсат газів атомів лужних металів. Показано, що для появи ефекту Вавілова-Черенкова в досліджуваній системі частинки повинні мати високу (релятивістську) швидкість, так як в розріджених газах показник заломлення близький до одиниці в області резонансних частот. На основі виразів для діелектричної проникності газу $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ визначено зміни енергії частинки при прольоті крізь бозеконденсат. Зміни енергії для частоти ω та хвильового вектора $\mathbf{k}$ описуються виразом

$$E_{\omega\mathbf{k}} = \frac{e^2 \omega}{\pi^2} \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \text{Im} \frac{v^2 / c^2 - 1 / \varepsilon}{\omega^2 \varepsilon / c^2 - k^2}.$$

У наведеному виразі e – заряд частинки, $\mathbf{v}$ – її швидкість, а $\delta(\omega)$ – дельта-функція Дірака. Показано, що ефект гальмування (прискорення) частинки в таких системах є малим, тому що розміри атомних хмар зазвичай не перевищують декількох міліметрів, а характерні зміни енергії частинки з початковою швидкістю $0.99c$ на одиниці відстані для розріджених парів натрію оцінено як 10^{-5} еВ/см. Досліджено принципову схему випадку, коли релятивістська частка може додатково прискорюватися розрідженим газом, атоми якого знаходяться при температурі, близькій до абсолютного нуля, див. рис. 3.

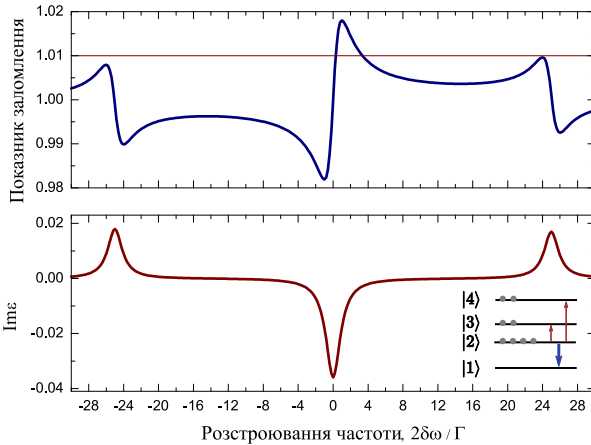


Рис 3: Дисперсійні характеристики газу атомів натрію, в якому можливе прискорення частинки з початковою швидкістю $0.99c$ на резонансному переході з інверсною заселеністю. Для простоти ймовірності переходів обрані однаковими та рівними Γ , а густини атомів у станах 3 та 4 удвічі менші за густину атомів у стані 2, що обрана рівною 10^{13} см^{-3} .

Додатково вивчено можливості визначення спектральних характеристик атомів на підставі ефекту Вавілова-Черенкова в газі з БЕК. Показано, що за допомогою варіювання швидкості частинки і визначення таким чином максимуму показника заломлення газу, може бути визначена природна ширина рівнів, якщо відомі додаткові спектральні або мікроскопічні характеристики атомів.

У підрозділі 2.3 теоретичний опис дисперсійних характеристик газів узагальнено на випадок температур, вищих за температури переходу газів до стану з конденсатом Бозе-Ейнштейна. На прикладі трирівневої системи обчислено групову швидкість та інтенсивність пройденого світла при різних температурах та параметрах системи. Показано, що у випадках, що відповідають експериментам з ультраохолодних атомів лужних металів, сам стан з БЕК не є визначальним, а явище уповільнення світла може спостерігатися в газах атомів при температурах, що набагато перевищують критичні.

У **третьому розділі** продемонстровано переваги незбалансованих двокомпонентних сумішей ультраохолодних ферміонів над збалансованими сумішами для наближення до квантового магнетизму в оптичних ґратках [4*]. Теоретичний аналіз проведено в рамках динамічної теорії середнього поля (ДТСП) [7*] для моделі Габбарда, що описується гамільтоніаном

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=A,B} t_{\alpha} (\hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha} + \text{H.c.}) + U \sum_i \hat{n}_{iA} \hat{n}_{iB} + \sum_i \sum_{\alpha=A,B} (V_i - \mu_{\alpha}) \hat{n}_{i\alpha},$$

де t_{α} – амплітуда тунелювання ферміонів типу α (в якості двох різних компонент можуть виступати як різні атоми, наприклад, ^6Li та ^{40}K , так і однакові атоми в двох різних квантових станах надтонкої структури) з відповідними опера-

торами народження та знищення ферміонів на вузлах i та j , відповідно, U – амплітуда локальної взаємодії на вузлі ґратки i , V_i – амплітуда зовнішнього потенціалу оптичної пастки, μ_α – хімічний потенціал для атомів сорту α . Показано також, що, використовуючи перетворення Шріффера-Вольфа в границі сильного зв'язку $t_{A,B} \ll U$ та в околі заповнення зони наполовину, $n_{Ai} + n_{Bi} \approx 1$, можна перейти до ефективної спінової моделі – анізотропної моделі Гейзенберга (моделі XXZ) в ефективному зовнішньому магнітному полі,

$$\hat{\mathcal{H}}' = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^Z \hat{S}_j^Z + J_2 \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{S}_i^X \hat{S}_j^X + \hat{S}_i^Y \hat{S}_j^Y) - \Delta\mu \sum_i \hat{S}_i^Z,$$

де спінові оператори S визначаються через матриці Паулі звичайним чином, $J_1 = 2(t_A^2 + t_B^2)/U$ і $J_2 = 4t_A t_B/U$ – амплітуди магнітного зв'язку, а різниця хімічних потенціалів $\Delta\mu = (\mu_A - \mu_B)$ відіграє роль напруженості зовнішнього поля.

Для різних значень дисбалансу порівняно між собою критичні температури та ізоентропічні криві. Показано, що для незбалансованих сумішей критичну область може бути досягнуто при більш високих значеннях ентропії, ніж для збалансованих сумішей. Також показано, що ультраохолодні фермі-гази з незбалансованими амплітудами тунелювання в упорядкованому стані Нееля мають додатковий параметр порядку у вигляді хвилі зарядової густини, що забезпечує їх альтернативною ознакою для виявлення квантового магнетизму в оптичних ґратках.

Вивчено антиферромагнітно впорядковані фази, які виникають у двокомпонентних ультраохолодних ферміонних сумішах з дисбалансом амплітуд тунелювання і густини. Аналіз проведено в рамках ДТСП та її узагальнення для координатного простору при ненульовій температурі. Вказується, що два типи дисбалансу надають перевагу різним типам антиферромагнітно (АФМ) упорядкованих фаз: дисбаланс тунелювання сприяє феримагнітній фазі, в той час як дисбаланс густини призводить до нахиленої антиферромагнітної фази. За відсутності дисбалансу густини теоретично показано переваги масово незбалансованих сумішей, тобто підвищення критичної температури та можливість охолодження системи шляхом адіабатичної зміни сили взаємодії до температур нижчих, ніж це можливо для сумішей з однаковими амплітудами тунелювання. Керуючись точними значеннями критичної ентропії у граничних випадках моделей Гейзенберга та Ізінга, виявлено, що ДТСП дає кращий прогноз критичної ентропії для незбалансованих сумішей порівняно зі збалансованими, що робить системи з дисбалансом тунелювання ще вигіднішими для спостереження явищ магнітного впорядкування в оптичних ґратках.

За наявності обох типів дисбалансу густини і тунелювання отримано фазові діаграми з відповідними фазовими переходами першого роду між різними магнітними станами – АФМ з паралельно орієнтованими магнітними моментами (так званого ферімагнетика, Z-АФМ) і нахилоного антиферромагнетика (ХУ-

АФМ), а також з безперервними фазовими переходами між цими станами та парамагнітними (ПМ) станами ізолятора і фермі-рідини, див. рис. 4.

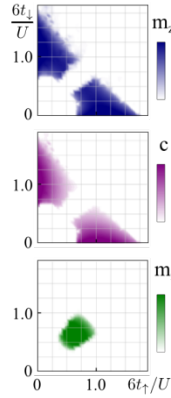
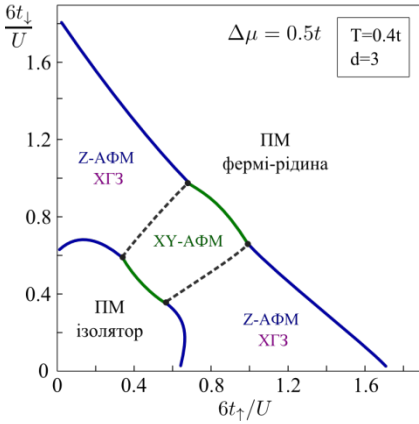


Рис 4: Фазова діаграма суміші з дисбалансом густини та тунелювання компонентів при напівзаповненій зоні та ненульовій температурі $T=0.4t$, що отримана ДТСП для кубічної ґратки. Штрихові та суцільні лінії відповідають фазовим переходам першого та другого роду, відповідно.

Виявлено, що АФМ впорядкування є найбільш нестабільним до термальних флуктуацій в областях з потрійною точкою. Із цією метою проведено аналіз стабільності впорядкованих фаз відносно дисбалансу густини при різних температурах. При нульовій температурі виявлено, що при всіх поляризаціях розвивається АФМ впорядкування. Також отримано розподіл густини та намагніченості в координатному просторі незбалансованих сумішей у потенціалах гармонічних пасток. Показано, що, залежно від загальної поляризації, суміш з різними амплітудами тунелювання може мати різні впорядковані фази в центральній частині та різні магнітні оболонки. Детальний опис цих ефектів може допомогти не тільки у підготовці сумішей до відповідних магнітних рівноважних станів, а й у виявленні АФМ кореляцій в ультрахолодних газах.

У підрозділі 3.3 теоретично вивчено перспективи оптичних ґраток, залежних від внутрішнього стану атомів, що були реалізовані в роботі [8*], з метою наближення та спостереження квантових станів багатьох частинок з дальніми магнітними кореляціями в ультрахолодних двокомпонентних ферміонних сумішах. Зроблено висновок, що з урахуванням зовнішнього гармонічного потенціалу немає додаткових переваг сумішей з великим дисбалансом амплітуд тунелювання для наближення до квантового магнетизму при фіксованому значенні ентропії на частинку в системі. Найсильніший ефект у цьому випадку виникає від структури металевих оболонок, які мають ненульову намагніченість і, таким чином, містять менше ентропії, ніж у збалансованому випадку. Ентропія s , що приходить на вузол ґратки, обраховується в рамках динамічної теорії середнього поля за допомогою інтегрування співвідношення Максвелла $\partial s / \partial \mu = \partial n / \partial T$,

$$s(r_0) = 2V \int_{r_0}^{R_{\max}} \frac{\partial n(r, U, T)}{\partial T} r dr,$$

де r_0 – відстань від обраного вузла ґратки до центру оптичної пастки, V – амплітуда гармонічного потенціалу пастки, $R_{\max}$ – відстань, на якій при заданій точності обчислень можна вважати $n=0$.

Проаналізовано можливість керувати напрямом порушення спінової симетрії за допомогою оптичних ґраток, тунелювання в яких залежить від внутрішнього стану атомів. Показано, що системи з невеликим ненульовим дисбалансом тунелювання мають чіткі переваги серед інших для спостережень на основі вимірювань кількості частинок і, зокрема, в розроблених експериментальних методах, що використовують квантовий газовий мікроскоп для ультрахолодних ферміонів [9*]. Отримано характерні розподіли густини атомів у координатному просторі ґраток та проведено статистичний аналіз їх структури, який дозволив визначити значення для ентропії на частинку, що відповідає появі АФМ упорядкованих доменів в системі.

У підрозділі 3.4 вивчено вплив анізотропії тунелювання на фізичні властивості фермі-газів в оптичних ґратках з простою кубічною геометрією. Аналіз побудовано на обчисленнях ДТСП для параметрів тунелювання $t_x = t_y \equiv t$ і t_z/t , що змінюється в інтервалі $[0.0, 1.0]$. Виявлено, що всі характерні властивості системи багатьох частинок і квантові фази системи залежать від t_z . Зокрема, проаналізовано суттєві зміни на магнітних фазових діаграмах, які залежать від сили взаємодії нетривіальним способом: критична температура для АФМ фази зменшується з t_z при малих значеннях локальної взаємодії U , але збільшується з t_z в режимі сильного зв'язку. Така поведінка узгоджується з аналітичними виразами із підходів середнього поля для граничних випадків сильного та слабого зв'язку, які мають різну залежність від координаційного числа Z ґратки. Аналіз локалізаційних властивостей показав, що експериментально можливо змінити стисливість системи, просто змінивши t_z і підтримуючи постійними інші параметри (амплітуду взаємодії U і температуру T). Подвійна заселеність вузлів ґратки збільшується зі збільшенням t_z і показує виражену залежність від магнітної фази системи. Таким чином, в експериментах подвійну заселеність можна використовувати для визначення наявності магнітних кореляцій у системі або для вимірювання температури.

У поєднанні з наближенням локальної густини проаналізовано ентропію та профілі густини у координатному просторі для системи в зовнішньому гармонічному потенціалі пасток. При аналізі ентропії виявлено, що область з наявністю ефекту Померанчука збільшується зі збільшенням t_z . При постійній ентропії температура зазвичай знижується з t_z , що просто пояснюється збільшенням координаційного числа. Однак, коли спочатку АФМ упорядкована система переходить у парамагнітний стан, температура знову підвищується. Аналіз розподілу густини частинок у координатному просторі показав, що при слабкій

силі взаємодії перехід у АФМ упорядкований стан відповідає появі плато в профілі густини. Таким чином, ця ознака також може бути використана для виявлення антиферомагнітної фази в експериментах.

У **четвертому розділі** виявлено особливості магнітного впорядкування в трикомпонентних сумішах ультрахолодних ферміонів зі взаємодіями відштовхування в оптичних ґратках за допомогою динамічної теорії середнього поля, що узагальнена для координатного простору. Показано, що при наповненні зони на $1/3$ ($n=1$) з підвищенням температури система, що описується $SU(3)$ -симетричною моделлю Габбарда,

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{\alpha} (\hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha} + \text{H.c.}) + \sum_{i, \beta > \alpha} U_{\alpha\beta} \hat{n}_{i\alpha} \hat{n}_{i\beta} + \sum_{i, \alpha} (V_i - \mu_{\alpha}) \hat{n}_{i\alpha},$$

знає послідовних термічно-індукованих переходів між різними типами підґраткового впорядкування, що узгоджується в границі сильного зв'язку з попередніми розрахунками для $SU(3)$ -симетричної моделі Гейзенберга, див. рис. 5.

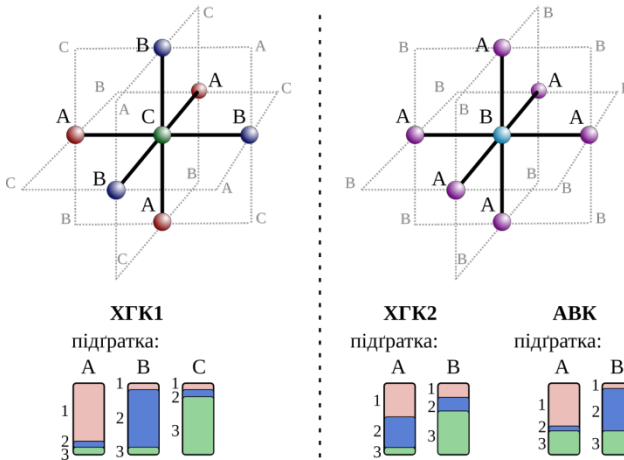


Рис. 5: Два типи підґраткового порядку та відповідні три типи магнітних фаз, що спостерігаються при $n=1$ для трикомпонентної суміші ферміонів. Двопідґраткові стани (праворуч): хвиля густини кольору (ХГК2) – атоми 1 та 2 є у протифазі до 3, антиферомагнетик з виділеним кольором (АВК) – атоми 3 не беруть участі у впорядкуванні.

Також обчислено критичні температури для магнітного впорядкування в трикомпонентних сумішах з різними амплітудами взаємодії між компонентами, що реалізується в ультрахолодних атомах лужних металів за допомогою резонансів Фешбаха. Показано, що асиметрична взаємодія цього типу знімає виродження в двопідґраткових фазах і призводить до пригнічення відповідних критичних температур.

Розроблено теоретичний підхід, який дозволяє детально вивчити магнітну фазову діаграму трикомпонентних ферміонних сумішей в оптичних ґратках з простою кубичною геометрією при кінцевій температурі та заповненням однією частинкою на вузол. При слабкому зв'язку для $SU(3)$ -симетричної суміші

спостережено повне пригнічення магнітних фаз, які виникають лише в області відповідного кросоверу до стану ізолятора Мотта. У рамках узагальнень ДТСП для двох підграток та для координатного простору побудовано магнітні фазові діаграми. Незважаючи на складнішу структуру магнітних фаз, при аналізі ентропії виявлено можливі переваги цих сумішей порівняно з двокомпонентними аналогами для наближення до квантового магнетизму в оптичних ґратках за рахунок більш вираженого охолодження, що обумовлено сильнішим ефектом Померанчука.

Проведено теоретичний аналіз термодинамічних властивостей чотириккомпонентних ферміонних сумішей у періодичній ґратці з простою кубічною (тривимірною) геометрією при наповненні зони наполовину. Результати динамічної теорії середнього поля для $SU(4)$ -симетричних сумішей вказують на фазовий перехід першого порядку між парамагнітною фермі-рідиною та антиферомагнітним ізолятором за ненульових температур. Інша особливість, що відрізняє $SU(4)$ -симетричну модель, – це близькість критичної точки Мотта до магнітного переходу, див. також рис. 6, де наведено відповідне порівняння.

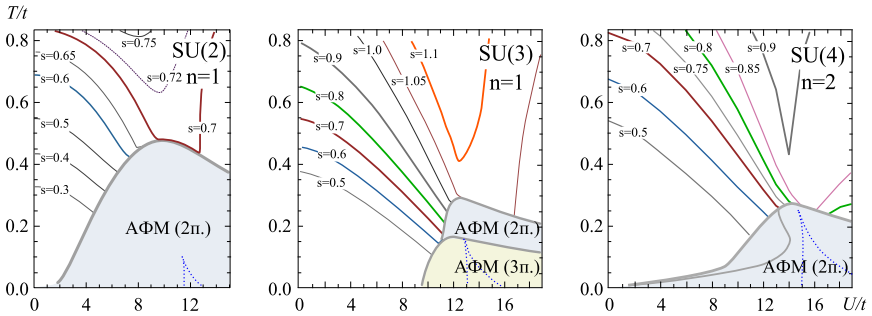


Рис 6: Ізоентропні лінії, що відповідають ентропії на частинку, магнітні фази та області співіснування ПМ метал-ізолятор (пунктирні лінії всередині фаз) для трьох різних моделей Габбарда з симетрією $SU(N)$ на кубічній ґратці.

Встановлено також, що точне порушення $SU(4)$ симетрії завдяки введенню в теоретичний аналіз членів з прямою міжорбітальною та обмінною взаємодіями (аналог зв'язку Гунда в мультиорбітальних моделях електронних станів у твердому тілі) збільшує критичну температуру впорядкування, але зменшує критичну ентропію, яка фактично є більш важливою характеристикою в експериментах, що використовують ультрахолодні атоми в оптичних ґратках.

Виявлено вплив спінової симетрії гамільтоніана на феромагнітне (ФМ) упорядкування за допомогою ДТСП в мультиорбітальній моделі Габбарда,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\gamma=1}^m (\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} + \mu_{\gamma}) c_{\mathbf{k}\gamma\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\gamma\sigma} + U \sum_{i\gamma} n_{i\gamma\uparrow} n_{i\gamma\downarrow} + U' \sum_{i\sigma, \gamma < \gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma} + \\ + (U' - J) \sum_{i\sigma, \gamma < \gamma'} n_{i\gamma\sigma} n_{i\gamma'\sigma} + \alpha J \sum_{i, \gamma < \gamma'} (c_{i\gamma\uparrow}^{\dagger} c_{i\gamma'\downarrow}^{\dagger} c_{i\gamma\downarrow} c_{i\gamma'\uparrow} + \text{H.c.}),$$

де $\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma}$ – енергія вільних частинок з квазіімпульсом $\mathbf{k}$ на орбіталі γ , U та U' – амплітуди локальної взаємодії, J – амплітуда гундівського зв'язку, а α – так званий параметр анізотропії Ізінга. Спостережено сильні ефекти пригнічення ФМ фаз при врахуванні повної спіново-обертальної симетрії у двоорбітальній системі (на відміну від слабших ефектів для АФМ упорядкування). Розглядаючи триорбітальну модель, показано, що ці ефекти слабшають (тобто, ФМ упорядкування ефективно відроджується) зі збільшенням кількості активних орбіталей, що добре узгоджується з аргументами на основі пригнічення квантових флуктуацій через наближення до границі класичних спінів, див. рис. 7.

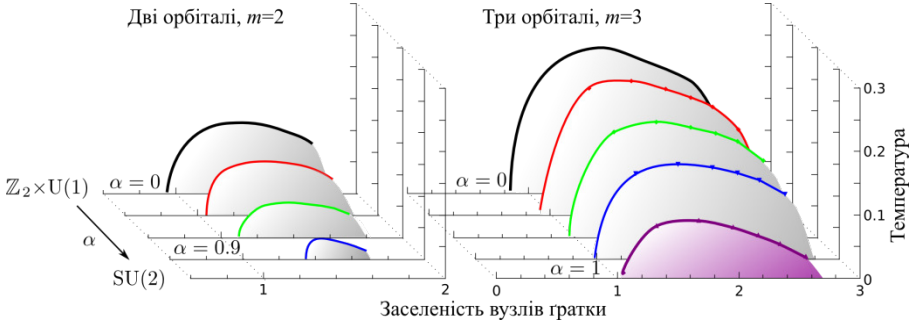


Рис 7: Фазові діаграми, що вказують на еволюцію феромагнітних фаз у дво- та триорбітальній моделі Габбарда при зміні параметра анізотропії Ізінга $\alpha=0, 0.6, 0.8, 0.9, 1$ при $U=12$ та $J=3$.

Аналіз поширено на випадок розділених орбіталей, де спостерігається відповідний перехід від режиму Стонера до режиму подвійного обміну, але ефект пригнічення, що виникає при включенні процесів спін-фліпа, залишається значним. Результати для двоорбітальної моделі також важливі з точки зору експериментів ультрахолодних атомів, орієнтованих на наближення до феромагнітного Кондо режиму в оптичних ґратках. Розроблений теоретичний підхід дозволяє також вивчити вплив квантових флуктуацій у двоорбітальних моделях із $SU(N)$ -симетричними взаємодіями, де очікується пригнічення магнітного впорядкування зі збільшенням N (кількості компонентів псевдоспіну), на відміну від дослідженого напрямку $SU(2)$ -симетричних взаємодій та збільшення m (кількості активних орбіталей), де ФМ стабілізується зі збільшенням m .

У п'ятому розділі для моделювання впливу зовнішнього магнітного поля на фазовий перехід в околі спінового кросоверу в LaCoO_3 використано двоорбітальну модель Габбарда. Виявлено, що для цієї сполуки експериментально спостережений нахил $dh_c/dT > 0$ [10*] відповідає конденсації спин-триплетних екситонів і є несумісним з упорядкуванням спінових станів, див. рис. 8.

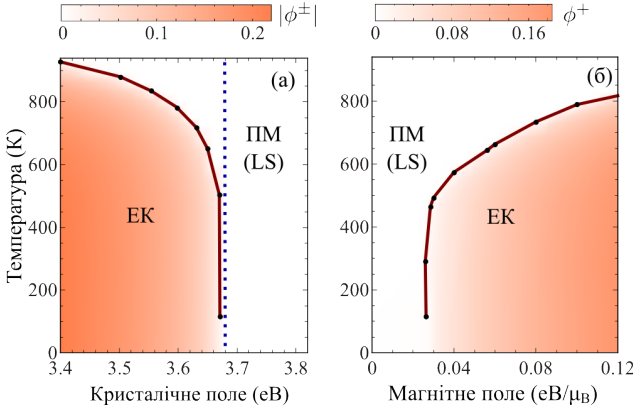


Рис. 8: Залежність ЕК параметра порядку ϕ^+ від розщеплення кристалічного поля при $h=0$ (а) та від магнітного поля h при $\Delta=3.68$ еВ (б). Обраховану критичну температуру T_c позначено суцільною лінією. Інші параметри: $U=4$, $J=1$, $t_{aa}=0.4$, $t_{bb}=-0.2$ і $t_{ab}=0.05$.

Показано, що індукований полем перехід відповідає типу ізолятор-ізолятор. Оцінено дисперсію проміжностінових (IS) та високостінових (HS) збуджень на фоні основного низькостінового (LS) стану та виявлено значну ширину зони для збуджень IS порядку декількох 100 меВ, тоді як відповідна ширина зони збуджень HS є на порядок меншою. Зроблено висновок, що індукований полем перехід є Бозе-Ейнштейнівською конденсацією екситонів зі спіном $S=1$. Мобільні збудження IS є ключовою властивістю режиму низьких температур, який необхідно враховувати при описі LaCoO_3 .

Вивчено пригнічення екситонного конденсату (ЕК) магнітним полем у двозонній моделі Габбарда. Спостережувана поведінка якісно узгоджується з експериментами в сполуках оксидів кобальту з домішками празеодима та елементів групи лантану [11*]. Показано, що індукований полем фазовий перехід при фіксованому хімічному потенціалі супроводжується істотною зміною електронної густини. Наведено аргументи, що кероване полем пригнічення стану екситонного конденсату в сполуках оксидів кобальту з домішками празеодима призводить до валентного кросоверу між іонними станами Pr^{4+} та Pr^{3+} .

Для шаруватої сполуки LaSrCoO_4 виявлено, що стан екситонного конденсату є стабільним із загальною енергією, меншою, ніж у парамагнітного стану, на значній частині досліджуваної фазової діаграми UJ . Стабільні рішення ЕК мають орбітальну симетрію d_{xy} - $d_{x^2-y^2}$. Виведено ефективну модель в границі сильного зв'язку,

$$\hat{\mathcal{H}}' = \sum_{ij, \alpha\beta} (\varepsilon_{1\alpha\beta}^{ij} \hat{d}_{i\alpha}^\dagger \hat{d}_{j\beta} \hat{s}_i^\dagger \hat{s}_j + \varepsilon_{2\alpha\beta}^{ij} \hat{d}_{i\alpha}^\dagger \hat{d}_{j\beta}^\dagger \hat{s}_i \hat{s}_j) + \text{H.c.} + \hat{\mathcal{H}}_{int}$$

Тут стан LS із відповідними операторами народження (знищення) $s^\dagger$ (s) розглядається як бозонний вакуум, а інші стани з низькоенергетичного набору конфігурації d^6 – як різні бозонні компоненти α , що характеризуються відповідними операторами народження (знищення) $d^\dagger$ (d) на вузлі ґратки i . Амплітуди ε_1 і ε_2 процесів, що впливають на дисперсійні характеристики збуджень на ґратці, обраховуються згідно перетворень Шріффера-Вольфа. Порівняння з LaCoO_3 в рамках спіново-хвильового підходу для даної моделі при нехтуванні останнім доданком зі взаємодією між збудженнями дозволяє припустити, що шаруватий кобальтит є ближчим до нестабільності ЕК або, що конденсація вже має місце за відсутності зовнішніх полів. Експериментальні дослідження поведінки такої сполуки під тиском та у сильних магнітних полях [10*, 11*], таким чином, є дуже бажаними.

Проведено теоретичне дослідження шаруватого кобальтиту $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ під тиском за допомогою підходів розкладання сильного зв'язку та динамічної теорії середнього поля. На відміну від ізоелектронних сполук LaCoO_3 і LaSrCoO_4 , виявлено, що мобільні проміжноспінові збудження не грають важливої ролі у фізиці низьких енергій $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$. Мобільні d_{xy} , $d_{x^2-y^2}$ проміжноспінові збудження мають енергетичну щільну понад 0.5 еВ через тетрагональне розщеплення кристалічного поля, тоді як інші проміжноспінові збудження включають внески d_{z^2} орбіталі, що має низьку рухливість завдяки асиметричній гібридації між атомами Co і верхівковими атомами O і F, див. рис. 9.

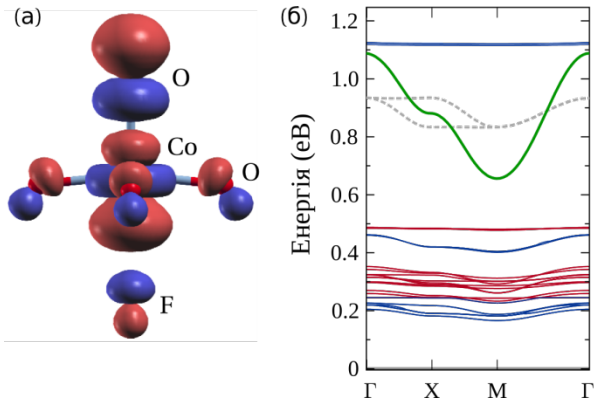


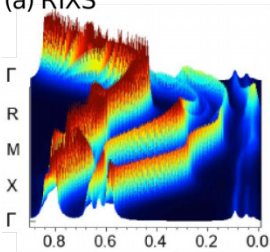
Рис. 9: (а) d_{z^2} функції Ваньє електронної оболонки Co, з відповідними вагами, що зображені як ізоперфні, де червоний (синій) колір відповідає позитивній (негативній) амплітуді. (б) Енергії збуджень, отримані в границі сильного зв'язку зі спіново-хвильовим аналізом при $P=12.2$ ГПа, $J=0.62$ еВ та $\zeta=56$ меВ.

Показано, що фізика низьких енергій сполуки $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ визначається близькосусідньою взаємодією між атомними мультиплетними збудженнями, а модель сильного зв'язку зводиться до узагальненої моделі Блуме-Емери-Гріффіса. Як і в останній, між низькоспіновою та антиферромагнітними фазами утворю-

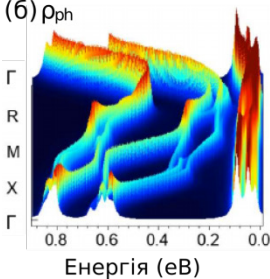
ється фаза впорядкування спінових станів. Результати підходу в границі сильного зв'язку підтверджуються відповідністю до результатів динамічної теорії середнього поля. Існування підґраток з двома різними станами атомів кобальту у фазі впорядкування спінових станів робить її виявлення прямолінійним. Наприклад, очікується значна диспропорція довжини з'єднань Co-O.

Для кристалів LaCoO_3 теоретично обчислено дисперсійні характеристики збуджень та проведено пряме порівняння з експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння (RIXS) при 20 К [20,12*]. Експериментальні дані добре узгоджуються з теоретичними розрахунками в експериментально доступній частині зони Бріллюена, а їх екстраполяції вказують на важливу роль збуджень IS у фізиці низьких енергій матеріалу, див. рис. 10.

(a) RIXS



(б) ρ_{ph}



Енергія (eV)

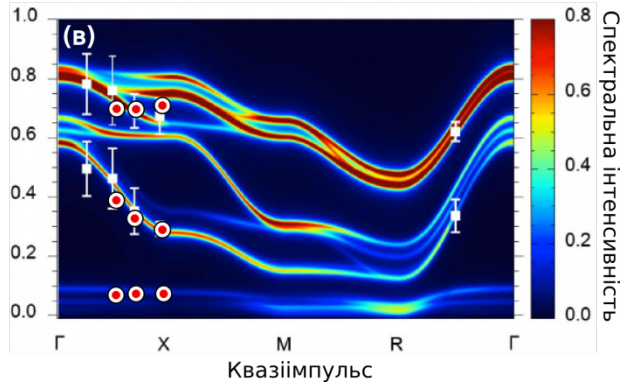


Рис 10: Обраховані спектральні інтенсивності процесу RIXS (а,в) крізь симетричні точки зони Бріллюена. (б) Тривимірний графік, що показує повну спектральну густину збуджень частинка-дірка ρ_{ph} . Експериментальні точки на графіку (в) узяті з робіт [20] (білі квадрати з індикаторами похибок) і [12*] (круги).

Дисперсія, в якій переважають процеси обміну між найближчими атомами кобальту, дозволяє здійснити надійну екстраполяцію. Поліпшення енергетичної роздільної здатності та поляризаційного аналізу дозволило б зменшити опору на теоретичну модель і тому є дуже бажаним.

Результати напряду вказують, що односкладові відповіді на традиційне питання, яке збудження – HS чи IS є найнижчим у LaCoO_3 , не є коректними для розуміння фізики системи. Хоча мало сумнівів, що найнижчими атомними збудженнями є стани HS, рухливість станів IS на гратці змінює картину в розширеній системі. Тому LaCoO_3 слід розглядати не як статичний набір іонів у конкретних атомних станах, а як газ рухливих бозонних екситонів IS над LS-вакуумом. Високоспінові стани відіграють роль сильно пов'язаних і, по суті, нерухомих бі-екситонів. Запропонована картина дає природне пояснення, чому впорядкування спінових станів, що супроводжується диспропорцією довжин зв'язків Co-O, не спостерігається в LaCoO_3 , незважаючи на низьку енергію збуджень HS.

Упорядкування спінових станів було запропоновано в контексті LaCoO_3 досить давно, але експериментально досі не спостерігалось. Згідно з результатами проведених теоретичних досліджень, можна зробити висновок, що причиною тому є мобільні низькоенергетичні збудження проміжноспінових станів. Відсутність або присутність їх у сполуках $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ та LaCoO_3 , відповідно, можуть пояснити їх різні магнітні властивості – антиферомагнітне впорядкування у сполуці $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ проти феромагнітних кореляцій у кристалі LaCoO_3 і феромагнітного впорядкування в натягнутих плівках LaCoO_3 . Теоретично досліджені сполуки оксидів кобальту та отримані результати, таким чином, забезпечують важливу систему відліку для розуміння фізики Co^{3+} перовскітів.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено важливу задачу теоретичної фізики, а саме: узагальнено та успішно застосовано першопринципні та середньопольові підходи до опису близькокритичних явищ у таких квантових системах багатьох частинок, як розріджені гази лужних або лужноземельно-подібних атомів в оптичних пастках при можливій наявності додаткових просторово-періодичних потенціалів та взаємодіючих квантових газах вироджених електронів в кристалічних структурах оксидів кобальту.

Основні результати дисертаційної роботи, усі з яких отримано вперше, сформульовані в наступних пунктах:

1. Розроблено теоретичний підхід, що дозволив отримати аналітичні вирази для залежностей хімічних потенціалів ідеальних квантових газів від температури, що можуть застосовуватись з достатньою точністю на всьому інтервалі температур.
2. Виявлено оптимальні фільтраційні характеристики газів атомів лужних металів у стані конденсації при пропусканні сигналів оптичного діапазону слабкої інтенсивності.

3. Передбачено ефект прискорення релятивістських частинок та показано можливість визначення спектральних характеристик атомів лужних металів на основі детектування черенковського випромінювання в розріджених газах з бозе-конденсатом.

4. Узагальнено динамічну теорію середнього поля та показано, що двокомпонентні фермі-гази з різними амплітудами тунелювання компонент мають переваги з точки зору досягнення магнітно-впорядкованих фаз.

5. Здобуто низькотемпературні фази газів атомів, що мають як різні амплітуди тунелювання, так і різну густину компонент в оптичних ґратках.

6. Установлено критичні температури переходів між три- та двопідґратковими антиферомагнітно-впорядкованими станами в $SU(3)$ -симетричній моделі Габбарда.

7. Теоретично розраховано ефекти впливу спінових симетрій на феромагнітне впорядкування в дво- та триорбітальній моделі Габбарда.

8. Побудовано теорію бозе-конденсації спін-триплетних екситонів в кристалах оксидів кобальту в зовнішньому сталому магнітному полі.

9. Отримано низькотемпературні фазові діаграми оксидів кобальту з домішками кальцію, стронцію, та елементів групи лантану.

10. Теоретично обчислено дисперсійні характеристики екситонних збуджень, що добре узгоджуються з наявними експериментальними даними з резонансного непружного рентгенівського розсіяння на кристалах оксидів кобальту.

Таким чином, усі поставлені завдання виконані, і мета дисертаційної роботи досягнута.

Одержані результати доповнюють і розширюють наявні уявлення про квантові гази і, зокрема, близькокритичні ефекти в таких системах. Результати, що відносяться до ультрахолодних атомів у зовнішніх полях, можуть бути використані при розробці та побудові високоточних оптичних приладів та розробці універсальних квантових симуляторів. Останні можуть бути застосовані для точного вивчення більш складних твердотільних систем задля посилення таких ефектів як високотемпературна надпровідність, колосальний магнетоопір, орбітальне та магнітне впорядкування тощо. Результати з близькокритичних явищ у кобальтитах можуть бути використані в спінтроніці та магнітних пристроях, що потребують високої стійкості по відношенню до термічних флуктуацій та зовнішніх полів.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Sotnikov A. G., Sereda K. V., Slyusarenko Y. V. Chemical potentials and thermodynamic characteristics of ideal Bose- and Fermi-gases in the region of quantum degeneracy. *Low Temp. Phys.* 2017. Vol. 43, No. 1. P. 144–151.
2. Slyusarenko Yu. V., Sotnikov A. G. Feasibility of using Bose-Einstein condensates for filtering optical pulses. *Low Temp. Phys.* 2010. Vol. 36. P. 671–676.
3. Sotnikov A. Magnetic field dependence and the possibility to filter ultraslow light pulses in atomic gases with Bose-Einstein condensates. *Phys. Scr.* 2010. Vol. T140, P. 014061.
4. Sotnikov A. G. On some peculiarities of propagation of weak electromagnetic pulses in Bose-Einstein condensates of alkali-metal atoms. *Opt. and Spectr.* 2011. Vol. 111, No. 4. P. 639–646.
5. Слюсаренко Ю. В., Сотніков А. Г. Унікальні ефекти відгуку ультрахолодних газів атомів лужних металів у стані з Бозе-Ейнштейнівським конденсатом на збудження електромагнітним полем. *Вісн. Нац. Акад. Наук Укр.* 2016. Т. 7. С. 19–26.
6. Slyusarenko Y., Sotnikov A. Propagation of relativistic charged particles in ultracold atomic gases with Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A.* 2011. Vol. 83. P. 023601.
7. Sotnikov A., Cocks D., Hofstetter W. Advantages of mass-imbalanced ultracold fermionic mixtures for approaching quantum magnetism in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 065301.
8. Sotnikov A., Snoek M., Hofstetter W. Magnetic phases of mass- and population-imbalanced ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A.* 2013. Vol. 87. P. 053602.
9. Golubeva A., Sotnikov A., Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *Phys. Rev. A.* 2015. Vol. 92. P. 043623.
10. Sotnikov A. Perspectives of optical lattices with state-dependent tunneling in approaching quantum magnetism in the presence of the external harmonic trapping potential. *Phys. Lett. A.* 2016. Vol. 380, No. 11–12. P. 1184–1188.
11. Sotnikov A., Hofstetter W. Magnetic ordering of three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A.* 2014. Vol. 89. P. 063601.
12. Sotnikov A. Critical entropies and magnetic-phase-diagram analysis of ultracold three-component fermionic mixtures in optical lattices. *Phys. Rev. A.* 2015. Vol. 92. P. 023633.

13. Golubeva A., Sotnikov A., Cichy A., Kuneš J., Hofstetter W. Breaking of SU(4) symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95. P. 125108.
14. Cichy A., Sotnikov A. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. A*. 2016. Vol. 93. P. 053624.
15. Sotnikov A., Cichy A., Kuneš J. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97. P. 235157.
16. Sotnikov A., Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO₃. *Sci. Rep.* 2016. Vol. 6. P. 30510.
17. Sotnikov A., Kuneš J. Competing phases in a model of Pr-based cobaltites. *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 96. P. 245102.
18. Afonso J. F., Sotnikov A., Kuneš J. Theoretical investigation of excitonic magnetism in LaSrCoO₄. *J. Phys. Condens. Matter*. 2018. Vol. 30, No. 13. P. 135603.
19. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y. et al. Excitonic dispersion of the intermediate spin state in LaCoO₃ revealed by resonant inelastic x-ray scattering. *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 035149.
20. Afonso J. F., Sotnikov A., Hariki A., Kuneš J. Pressure-induced spin-state ordering in Sr₂CoO₃F. *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 99. P. 205118.
21. Slyusarenko Yu. V. and Sotnikov A. G. Effects in the linear response of atomic Bose-Einstein condensates to an external electromagnetic perturbation. *3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics: Book of abstracts* (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.
22. Sotnikov A. and Hofstetter W. Quantum phase transitions of ultracold atoms in optical lattices: dynamical mean field theory studies. *3rd International Conference on Quantum Electrodynamics & Statistical Physics: Book of abstracts* (August 29 – September 2, Kharkov, Ukraine, 2011). Kharkov, 2011. P. 168–169.
23. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP: Book of abstracts, section A 35* (Stuttgart, Germany, March 12–16, 2012). Stuttgart, 2012. P. 1.
24. Sotnikov A. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *6th International Workshop "Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence": Book of abstracts* (Lyon, France, June 5–8, 2012). Lyon, 2012. P. 90.
25. Slyusarenko Yu. V. and Sotnikov A. G. Perspectives of Bose-Einstein condensates for filtering of light pulses and acceleration of relativistic charged par-

- ticles. *4th Conference "Statistical Physics: Modern Trends and Applications"*: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2012). Lviv, 2012. P. 188.
26. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 29 (Hannover, Germany, March 18–22, 2013). Hannover, 2013. P. 2.
 27. Sotnikov A., Cocks D., Snoek M., and Hofstetter W. *Quantum magnetism of mass-imbalanced fermionic mixtures. International Conference "The New Generation of Strongly Correlated Electron Systems"*: Book of abstracts (Sestri Levante, Italy, July 1–5, 2013). Sestri Levante, 2013. P. 22.
 28. Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Effects of anisotropy in simple lattice geometries on many-body properties of ultracold fermions in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 34 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 2.
 29. Sotnikov A. and Hofstetter W. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 50 (Berlin, Germany, March 17–21, 2014). Berlin, 2014. P. 1.
 30. Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Real-Space Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric fermionic Hubbard model and its extensions. Magnetic orderings and Hund's coupling. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section Q 15 (Heidelberg, Germany, March 23–27, 2015). Heidelberg, 2015. P. 4.
 31. Sotnikov A.G. Magnetic ordering in three-component ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *VI International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics"*: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 2–5, 2015). Kharkiv, 2015. P. 46.
 32. Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the Two-Band Hubbard Model. Magnetic orderings and Hund's coupling. *The International Workshop FINES-2015: Finite-Temperature Non-Equilibrium Superfluid Systems*: Book of abstracts (Sopot, Poland, September 14–18, 2015). Sopot, 2015. P. 44.
 33. Cichy A., Golubeva A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Orbital magnetism of ultracold fermionic gases in a lattice: Dynamical Mean-Field Approach. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.
 34. Golubeva A., Cichy A., Sotnikov A., and Hofstetter W. Dynamical Mean-Field Theory of the SU(4)-symmetric Fermi-Hubbard model and its extensions. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 9 (Hannover, Germany, February 29 – March 4, 2016). Hannover, 2016. P. 1.

35. Sotnikov A. and Kuneš J. Field-induced exciton condensation in LaCoO_3 . *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, section MA 68 (Dresden, Germany, March 19–24, 2017). Dresden, 2017. P. 1.
36. Sotnikov A. Field-induced exciton condensation in d^6 perovskites. *NGSCES 8th International Conference*: Book of abstracts (Barcelona, Spain, September 4–8, 2017). Barcelona, 2017. P. 64.
37. Sotnikov A. Influence of continuous symmetries on magnetic ordering in the Hubbard model with multiple spin and orbital components. *FOR1807 Winter School “Numerical Methods in Strongly Correlated Quantum Systems”*: Book of abstracts (Marburg, Germany, February 19–23, 2018). Marburg, 2018. P. 33.
38. Cichy A. and Sotnikov A. Breaking of $\text{SU}(4)$ symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section AMOP*: Book of abstracts, section A 5 (Erlangen, Germany, March 4–9, 2018). Erlangen, 2018. P. 1.
39. Fernandez Afonso J., Sotnikov A., and Kuneš J. Theoretical investigation of excitonic magnetism in LaSrCoO_4 . *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 146.
40. Sotnikov A., and Kuneš J. Competing phases in the model of Pr-based cobaltites. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 199.
41. Wang R.-P., Hariki A., Sotnikov A., Frati F., Okamoto J., Huang H.-Y., Singh A., Huang D.-J., Tomiyasu K., Du C.-H., Kuneš J., de Groot F. M. F. Excitonic dispersion of the intermediate-spin state in LaCoO_3 revealed by resonant inelastic X-ray scattering. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Berlin, Germany, March 11–16, 2018). Berlin, 2018. P. 205.
42. Cichy A. and Sotnikov A. Breaking of $\text{SU}(4)$ symmetry and interplay between strongly correlated phases in the Hubbard model. *42th International Conference of Theoretical Physics: correlations and coherence on different scales, CCDS 2018*: Book of abstracts (Ustron, Poland, September 9–14, 2018). Ustron, 2018. P. 105.
43. Zambrano Y., Sotnikov A., and Cichy A. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *DPG Spring Meeting of the Section SAMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 18.
44. Cichy A., Sotnikov A., and Zambrano Y. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring*

- Meeting of the Section SAMOP*: Book of abstracts, Atomic Physics Division (Rostock, Germany, March 10–15, 2019). Rostock, 2019. P. 42–43.
45. Fernandez Afonso J., Sotnikov A., Hariki A., and Kuneš J. Pressure-induced spin-state ordering in $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Low Temperature Physics Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 6.
 46. Cichy A. and Sotnikov A. Suppression and revival of long-range ferromagnetic order in the multiorbital Fermi-Hubbard model. *DPG Spring Meeting of the Section SKM*: Book of abstracts, Magnetism Division (Regensburg, Germany, March 31 – April 5, 2019). Regensburg, 2019. P. 37.
 47. Raspopova D.M. and Sotnikov A.G. Slowing of electromagnetic pulses in the proximity of phase transition to Bose-Einstein condensate in ultracold atomic gases. *X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019*: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019. P. 153.
 48. Sotnikov A.G. Orbital ordering of ultracold fermionic mixtures in optical lattices. *X International Conference for Professionals & Young Scientists ICPYS-LTP 2019*: Book of abstracts (Kharkiv, Ukraine, June 3-7, 2019). Kharkiv, 2019. P. 157.
 49. Sotnikov A. and Kuneš J. Ferromagnetism of LaCoO_3 . *5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications*: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3–6, 2019). Lviv, 2019. P. 68.
 50. Cichy A., Sotnikov A., and Zambrano Y. Low-temperature phases in the two-band Hubbard model realized with ultracold atomic four-component mixtures in optical lattices. *XIX National Conference on Superconductivity*: Book of abstracts (Bronisław ow, Poland, October 6–11, 2019). Bronisław ow, 2019. P. 42.

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1*. Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977.
- 2*. Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V. Second quantization method in the presence of bound states of particles. *J. Math. Phys.* 2005. Vol. 46, No. 2. P. 022301.
- 3*. Сотников А. Г. Теория замедления электромагнитных волн слабой интенсивности в бозе-конденсате газа атомов щелочных металлов: Дисс. кандидата наук / Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт». Харьков, 2010. 131 с.
- 4*. Bloch I., Dalibard J., Zwerger W. Many-body physics with ultracold gases. *Rev.Mod. Phys.* 2008. Vol. 80. P. 885–964.

- 5*. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. Спиновые волны. М.: Наука, 1967.
- 6*. Schrieffer J. R., Wolff P. A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Phys. Rev.* 1966. Vol. 149. P. 491–492.
- 7*. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* 1996. Vol. 68. P. 13–125.
- 8*. Jotzu G., Messer M., Görg F., Greif D., Desbuquois R., Esslinger T. Creating state-dependent lattices for ultracold fermions by magnetic gradient modulation. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. P. 073002.
- 9*. Haller E., Hudson J., Kelly A., Cotta D. A., Peaudecerf B., Bruce G. D., Kuhr S. Single-atom imaging of fermions in a quantum-gas microscope. *Nat. Phys.* 2015. Vol. 11, No. 9. P. 738–742.
- 10*. Ikeda A., Nomura T., Matsuda Y. H., Matsuo A., Kindo K., Sato K. Spin state ordering of strongly correlating LaCoO_3 induced at ultrahigh magnetic fields. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93. P. 220401.
- 11*. Ikeda A., Lee S., Terashima T. T., Matsuda Y. H., Tokunaga M., Naito T. Magnetic-field-induced spin crossover of Y-doped $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{CoO}_3$. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94. P. 115129.
- 12*. Hariki A., Wang R.-P., Sotnikov A., Tomiyasu T., Betto D., Brookes N. B. et al. Melting of excitonic dispersion in LaCoO_3 : theory and experiment. *ArXiv e-prints*. 2019. [1912.02564](https://arxiv.org/abs/1912.02564).

АНОТАЦІЇ

Сотніков А. Г. Першопринципні та середньопольові теоретичні підходи до опису близькокритичних явищ у квантових газах. — На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, Харків, 2020.

У дисертаційній роботі представлені результати досліджень близькокритичних явищ та фазових переходів у квантових газах за допомогою першопринципних та середньопольових теоретичних підходів. Досліджено термодинамічні характеристики ідеальних газів в режимі квантового виродження на всьому інтервалі температур, у тому числі, де розкладання в рамках теорії збурень є непридатними. Виявлено ефекти фільтрації сигналів оптичного діапазону ультрахолодними бозе-газами атомів лужних металів та показано принципову можливість прискорення релятивістських частинок такими системами у стані бозеконденсації. Узагальнено теоретичний підхід динамічної теорії середнього по-

ля на випадки опису взаємодіючих фермі-газів з різними амплітудами тунелювання, густиною частинок, високими спіновими симетріями та за наявності обмінної взаємодії між частинками по типу зв'язку Гунда. Отримано фазові діаграми магнітних фаз та представлено ефективні спінові моделі у границях сильного зв'язку для ультрахолодних газів фермі-атомів в оптичних ґратках. Теоретично передбачено явище конденсації спин-триплетних екситонів у кристалах оксидів кобальту та пояснена гістерезисна поведінка таких сполук у зовнішньому сильному магнітному полі. Отримано та проаналізовано низькотемпературні фазові діаграми групи кристалів на основі оксидів кобальту з домішками елементів групи лантану, кальцію, стронцію та фтору. Досліджено дисперсійні характеристики екситонних збуджень у таких системах та показано, що результати розвинутих теоретичних підходів добре узгоджуються з проведеними експериментами з резонансного непружного рентгенівського розсіювання. Одержані результати доповнюють і розширюють існуючі уявлення про квантові гази як у відсутності, так і за наявності зовнішніх полів, у тому числі таких, що утворюють просторово-періодичні ґраткові структури. Таким чином, дослідження, проведені в дисертації, є актуальними та мають як фундаментальне, так і прикладне значення.

Ключові слова: квантовий газ, ультрахолодні атоми, оптичні ґратки, фазові переходи, електромагнітне збурення, функції Гріна, модель Габбарда, спіновихвильовий підхід, теорія середнього поля, магнітне впорядкування, спінові симетрії, кристали оксидів кобальту, багатоелектронні стани, екситонний конденсат, дисперсія збуджень.

Сотников А. Г. Первопринципные и среднеполевые теоретические подходы к описанию близкокритических явлений в квантовых газах. — На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 «Теоретическая физика» (104 – Физика и астрономия). — Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт» НАН Украины, Харьков, 2020.

В диссертационной работе представлены результаты исследования близкокритических явлений и фазовых переходов в квантовых газах с помощью первопринципных и среднеполевых теоретических подходов. Исследованы термодинамические характеристики идеальных газов в режиме квантового вырождения на всем интервале температур, в том числе, где разложения в рамках теории возмущений являются неприменимыми. Установлено эффекты фильтрации сигналов оптического диапазона ультрахолодными бозе-газами атомов щелочных металлов и показано принципиальную возможность ускорения релятивистских частиц такими системами в состоянии бозе-конденсации. Обобщено теоретический подход динамической теории среднего поля на случаи описания взаимодействующих ферми-газов с разными амплитудами туннелирования,

плотностью частиц, высокими спиновыми симметриями и при наличии обменного взаимодействия между частицами по типу связи Хунда. Получены фазовые диаграммы магнитных фаз и представлены эффективные спиновые модели в пределе сильной связи для ультрахолодных газов ферми-атомов в оптических решетках. Теоретически предсказано явление конденсации спин-триплетных экситонов в кристаллах оксидов кобальта и объяснено гистерезисное поведение таких соединений во внешнем сильном магнитном поле. Получено и проанализировано низкотемпературные фазовые диаграммы группы кристаллов на основе оксидов кобальта с примесями элементов группы лантана, кальция, стронция и фтора. Исследованы дисперсионные характеристики экситонных Возбуждений в таких системах и показано, что результаты развитых теоретических подходов хорошо согласуются с проведенными экспериментами по резонансному неупругому рентгеновскому рассеянию. Полученные результаты дополняют и расширяют текущие представления о квантовых газах как в отсутствие, так и при наличии внешних полей, в том числе таких, которые образуют пространственно-периодические решеточные структуры. Таким образом, исследования, проведенные в диссертации, являются актуальными и имеют как фундаментальное, так и прикладное значение.

Ключевые слова: квантовый газ, ультрахолодные атомы, оптические решетки, фазовые переходы, электромагнитное возбуждение, функции Грина, модель Хаббарда, спиново-волновой подход, теория среднего поля, магнитное упорядочение, спиновые симметрии, кристаллы оксидов кобальта, многоэлектронные состояния, экситонный конденсат, дисперсия возбуждений.

Sotnikov A. G. First-principle and mean-field theoretical approaches to the description of near-critical phenomena in quantum gases. — Manuscript copy-right.

Thesis for a Doctoral Degree in Physics and Mathematics: Specialty 01.04.02 “Theoretical physics” (104 – Physics and Astronomy). – National Science Center “Kharkiv Institute of Physics and Technology” NAS of Ukraine, Kharkiv, 2020.

The Doctoral Thesis presents the results of the research on the near-critical phenomena in quantum gases by means of the first-principle and mean-field theoretical approaches. In particular, thermodynamic characteristics of ideal gases in the regime of quantum degeneracy are studied on the whole temperature range including those intervals, where the perturbation-theory expansions become inaccurate. Effects of filtering of optical pulses by ultracold gases of alkali atoms are studied and a principal possibility of acceleration of relativistic charged particles in these systems in the state with a Bose-Einstein condensate are shown. The dynamical mean-field theoretical approach is generalized for the cases of interacting Fermi-gases with different tunneling amplitudes, particle densities, high spin symmetries and the presence of the Hund-type exchange terms. For ultracold gases of Fermi-atoms in optical lattices, phase diagrams with magnetic phases are obtained and effective spin models

in the strong-coupling limits are derived. The Bose-condensation phenomenon of spin-triplet excitons in cobalt oxide crystals is predicted and hysteresis behavior in external strong magnetic field is explained. Low-temperature phase diagrams of the cobalt-oxide crystals doped by lanthanum-group elements, calcium, strontium, and fluorine are studied. Dispersive characteristics of the excitations in these systems are analyzed and it is shown that the results of the developed theoretical approaches agree well with the experiments performed with the resonant inelastic X-ray scattering.

Key words: quantum gas, ultracold atoms, phase transitions, optical lattices, electromagnetic perturbation, Green's functions, Hubbard model, spin-wave approach, mean-field theory, magnetic ordering, spin symmetries, cobalt oxides, many-electron states, exciton condensate, dispersion of excitations.