АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

На правах рукописи
УДК: 539.142.3

НАРЗИКУЛОВ ЗАБАРДАСТ АХМАДОВИЧ

КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРЕХМЕРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ РЕШЕТОК И КВАНТОВЫХ МАГНЕТИКОВ ПРИ СВЕРХНИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени доктора философии (PhD)
по физико-математическим наукам

Научный руководитель:
Рахимов Абдулла Маннабович,
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник

Ташкент - 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность и востребованность темы диссертации. В мире в последние годы изучение конденсата Бозе-Эйнштейна (БЭК) стало чрезвычайно популярным предметом как теоретических, так и экспериментальных исследований. Несмотря на то, что БЭК наблюдался с бозонными атомами: в жидком гелии и холодных атомных газах, данная концепция носит гораздо более общий характер. Теория БЭК в оптических решетках открыла новые горизонты исследований в физике ультрахолодных атомов. Низкотемпературные свойства некоторых квантовых магнитов можно также объяснить теорией БЭК. Интересную физику демонстрирует двухкомпонентный БЭК, в котором межкомпонентную длину рассеяния можно контролировать Фешбах резонансом.

В настоящее время интенсивно изучаются фазовые переходы в оптических решетках, создаются модели решеток для двумерного и одномерного случая. Смешивание или не смешивание двухкомпонентного БЭК является очень актуальной задачей. Были исследованы термодинамические и магнитные свойства антиферромагнетиков с учетом анизотропии. Результаты этих исследований могут быть использованы для создания квантовых компьютеров и квантовых хранилищ информации. Исследование квантовых магнитов может предсказать их новые свойства, которые облегчат и оптимизируют их применение в компьютерных и информационных технологиях.

В нашей Республике уделяется большое внимание развитию физики, в частности экспериментальных и теоретических работ в области физики конденсированного состояния, а также проведению фундаментальных исследований в этом направлении на мировом уровне. Направления этих фундаментальных исследований, имеющих большое значение для развития

науки нашей страны и её дальнейшего практического применения, отражены в Стратегии[1] развития нового Узбекистана на 2022–2026 гг.

Исследования, проведенные в данной диссертационной работе, соответствуют задачам, предусмотренным в Указах Президента Республики Узбекистан № УП-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022–2026 гг.» от 28 января 2022 года, № УП-4958 “О дальнейшем совершенствовании системы послевузовского образования” от 16 февраля 2017 года, в Постановлении Президента Республики Узбекистан № ПП-2789 “О мерах по дальнейшему совершенствовании деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности” от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Диссертационное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий республики II. «Энергетика, энергосбережение и альтернативные источники энергии».

Степень изученности проблемы. В настоящее время многочисленные теоретические и практические исследования в области физики низких температур и квантовых магнетиков проводятся ведущими учеными мира, в том числе швейцарскими (А. Шиллинг, Р. Делл’Амор), итальянскими (В. Цапф, М. Хайме, К. Д. Батиста), японскими (Ф. Ямада, Т. Оно, Х. Танака, Г. Мисгуич, М. Осикава, Т. Сакакибара), российскими (В.И. Юкалов), узбекистанскими (А. Рахимов, Б. Байзаков, Ф. Абдуллаев, С. Джуманов, У. Валиев, Р. Галимзянов, Э. Кувондиков, Э. Арзикулов) и другими исследователями.

Ими изучены низкотемпературные фазовые переходы и свойства намагниченности в квантовых магнетиках, образование моттовского

[1] Указ Президента Республики Узбекистан № УП-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022-2026 гг.» от 28 января 2022 г.

изолятора и сверхтекучих фаз в оптических решетках; исследованы формирования топологических состояний материи и оптические решетки использованы в качестве квантовых симуляторов; исследованы поведения БЭК в присутствии сильных магнитных полей; изучены формирование и свойства спиновых текстур, таких как вихри; наблюдалось образование конденсатов Бозе-Эйнштейна с большими собственными магнитными дипольными моментами, а также образование экзотических магнитных состояний вещества; проделаны работы по контролю взаимодействия между атомами в смеси и изучению динамики этих систем.

Однако, остаются открытыми вопросы: подтверждаются ли расчеты Монте-Карло по зависимости критической температуры фазового перехода в состояние БЭК от силы взаимодействия; как влияет фактор заполнения на критическое значение параметра взаимодействия? Было предположено существование новых сверхтекучих фаз без конденсата в оптических решетках, однако, такая фаза не наблюдалась экспериментально, и не подтверждалась теоретически; не изучен магнетокалорический эффект ниже критической температуры фазового перехода в БЭК состояние в квантовых магнитах; для двухкомпонентных Бозе газов в качестве критерия смешиваемости до сих пор используют условие, полученное в приближении Боголюбова и нет температурной зависимости условия смешиваемости и стабильности, а также данных по возможным фазовым переходам.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационное исследование выполнено в рамках научно-исследовательских проектов Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан по темам: № ФА-Ф2-Ф079+Ф069 «Разработка и развитие уравнений электромагнитного и гравитационного полей в релятивистской астрофизике и космологии, а также феноменологических моделей КХД в описании адронов и их взаимодействий» (2009-2011), № Ф2-ФА-Ф113 “Гравитационные и электромагнитные процессы

в релятивистской астрофизике и космологии, системы бозонов при сверхнизких температурах” (2012-2016), № ОТ-Ф2-15 “Теоретическое исследование новых сверхпроводящих и сверхтекучих свойств высокотемпературных сверхпроводников и подобных им конденсированных систем ” (2017-2019), № UT-ФА-2020-3 “Ультрахолодные фазовые переходы в неупорядоченных квантовых магнетиках и атомарных газах с дальнодействующими взаимодействиями ” (2020-2022), а также утвержденной Постановлением Президента №ПП-4526 от 21 ноября 2019 года программы научно-исследовательских работ по теме: “Разработка высокоэффективных вариационных методов для решения задач квантовой физики многих тел” (2020-2024).

Целью исследования является определение термодинамических характеристик Бозе систем вблизи фазового перехода.

Задачи исследования:

разработать приближение для 3D оптических решеток при низких температурах и оценить сдвиг критической температуры T_c, обусловленный контактным взаимодействием, как в режиме слабого, так и сильного взаимодействий;

определить фазы и фазовую диаграмму для оптических решеток и квантовых магнитов со спиновой щелью;

получить выражения основных термодинамических величин для квантовых магнитов и сравнить их с экспериментальными данными;

получить выражение для магнитного параметра Грюнайзена и определить его поведение вблизи точки фазового перехода;

оценить магнетокалорический эффект выше и ниже критической температуры фазового перехода;

получить для двухкомпонентного Бозе газа фазовые диаграммы при нулевой и при конечной температурах;

установить условие смешиваемости двухкомпонентной Бозе смеси.

Объектом исследования являются Бозе конденсированные системы (оптические решетки, атомные газы и квантовые магниты).

Предметом исследования являются критическая температура перехода, изменение термодинамических величин вблизи фазового перехода.

Методы исследования: двухколлективная квантовая теория поля, вариационная пертурбативная теория, приближение Хартри-Фока-Боголюбова.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

разработано приближение, основанное на вариационной пертурбативной теории для трехмерных оптических решеток, двухкомпонентных атомных газов и квантовых магнитов в области низких температур;

получена оценка сдвига критической температуры фазового перехода в состояние конденсата Бозе-Эйнштейна в оптических решетках, обусловленная контактным взаимодействием;

впервые показано, что с адиабатным увеличением внешнего магнитного поля, выше критической температуры фазового перехода в состояние конденсата Бозе-Эйнштейна температура димеризованных квантовых магнитов со спиновой щелью понижается, а ниже критической температуры повышается;

получена впервые фазовая диаграмма сбалансированной симметричной конфигурации двухкомпонентной смеси Бозе-газов как при нулевой, так и при конечных температурах для произвольного значения газового параметра; показано, что при больших значениях константы межкомпонентного взаимодействия система остаётся стабильной и смешиваемой;

найдена зависимость соотношения скоростей звука от константы межкомпонентного взаимодействия для различных значений газового параметра в смеси, состоящий из конденсата Бозе-Эйнштейна атомов ^{23}Na в равной части двух сверхтонких основных состояний.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

развито приближение для объяснения фазового перехода сверхтекучесть – Мотт диэлектрик для оптических решеток при низких температурах;

получены магнитокалорические эффекты выше и ниже критической температуры фазового перехода, а также аналитические выражения для теплоемкости, энтропии, намагниченности, магнитного параметра Грюнайзена для димеризованных квантовых магнитов со спиновой щелью;

получены скорости звука для смеси атомов Na при фиксированных значениях газового параметра и константы межкомпонентного взаимодействия, а также относительная скорость звука в зависимости от константы межкомпонентного взаимодействия.

Достоверность результатов исследования подтверждается использованием современных методов физики конденсированных состояний и теоретической физики, а также высокоэффективных численных методов и алгоритмов; соответствием полученных результатов экспериментальным данным и результатам других авторов, согласованием выводов с основными положениями квантовой теории поля для оптических решеток и магнитных материалов.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключается как в развитии фундаментальных представлений о состоянии конденсации Бозе-Эйнштейна и новых фазовых переходах, так и в развитии прикладного материаловедения. Кроме того, результаты исследования способствуют более глубокому пониманию явлений в магнитных материалах и оптических решетках, позволяют взглянуть на природу БЭК с другой точки зрения.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что полученные результаты по квантовым магнитам и оптическим решеткам могут быть использованы для развития теории оптических решеток, для анализа сдвига критической температуры фазового перехода для различных геометрий оптических решеток, для прогнозирования свойств новых

магнитных материалов, которые входят в класс димеризованных квантовых магнитов со спиновой щелью.

Внедрение результатов исследования. развитое приближение, основанное на вариационной пертурбативной теории для трехмерных оптических решеток, двухкомпонентных атомных газов и квантовых магнитов было использовано зарубежными исследователями (ссылки в международных журналах: Soft Matter, 12. – P. 2523-2536, 2016; New J. Phys. 19, id.113002, 2017; Phys. Rev. A 88, 023607, 2013, Phys. Rev. E 90, 032124, 2014; Brazilian Journal of Physics v. 47. – P. 1-8, 2017; Canadian Journal of Physics. 92(5): 375-379. – P. 2013; Phys. Rev. A 88, 023607, 2013; Laser Phys. Lett., 12, 015202, 2015). Использование научных результатов позволило получить фазовые диаграммы для двух и трехмерных оптических решеток;

полученная аналитическая оценка сдвига критической температуры фазового перехода в БЭК в оптических решетках была использована зарубежными исследователями (ссылки в международных журналах: J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 50 085006, 2017; Brazilian Journal of Physics v. 47. – P. 1-8, 2017; Canadian Journal of Physics. 92(5): 375-379. – P. 2013; Phys. Rev. A 88, 023607, 2013; Laser Phys. Lett., 12, 015202, 2015; Canadian Journal of Physics. 94(7): 697-703, 2016). Использование научных результатов позволило получить температуру перехода Березинского–Костерлица–Таулесса в зависимости от кинетической энергии атомов и величины химического потенциала;

показанная разность магнетокалорического эффекта выше и ниже критической температуры фазового перехода была использована зарубежными исследователями (ссылки в международных журналах: Phys. Rev. B v. 100, id. 245435, 2019; Physics Letters A, v. 384, 16, id 126313, 2020; Annals of Physics, v.424, id. 168361, 2021; J. Phys.: Condens. Matter v. 33 id. 465401, 2021). Использование научных результатов позволило получить параметры Грюнайзена для моделей Либа-Линигера и Янга-Година, определить детальные границы магнитных фаз и пересечения спиновых

уровней, используя измерения намагниченности, электрической поляризации и магнетокалорического эффекта в импульсных магнитных полях до 60 Тл для квантового магнетика Ba2FeSi2O7;

полученная фазовая диаграмма двухкомпонентной смеси Бозе-газов для произвольного газового параметра была использована зарубежными исследователями (ссылки в международных журналах: Laser Phys. Lett. v.19, id. 103001, 2022; Eur. Phys. J. D 77, 37, 2023; Modern Physics Letters B, v. 37, 03, id. 2250206, 2023). Использование научных результатов позволило получить критическую температуру Раби связанной (Rabi coupled) симметричной Бозе-смеси;

выявленная стабильность и смешиваемость Бозе смеси при больших значениях константы межкомпонентного, а также стабильность и смешиваемость системы при больших значениях константы межкомпонентного взаимодействия была использована зарубежными исследователями (ссылки в международных журналах Laser Phys. Lett. v.19, id. 103001, 2022; Eur. Phys. J. D 77, 37, 2023; Modern Physics Letters B, v. 37, 03, id. 2250206, 2023). Использование научных результатов позволило получить условия стабильности смеси квантовых жидкостей.

найденая зависимость соотношения скоростей звука от константы межкомпонентного взаимодействия для различных значений газового параметра в смеси состоящего из конденсата Бозе-Эйнштейна атомов 23Na в равной части двух сверхтонких основных состояний была использована зарубежными исследователями (ссылки в международных журналах Laser Phys. Lett. v.19, id. 103001, 2022; Eur. Phys. J. D 77, 37, 2023; Modern Physics Letters B, v. 37, 03, id. 2250206, 2023). Использование научных результатов позволило рассмотреть поведение наблюдаемых величин при расслоении квантовых смесей.

Апробация результатов исследования. Результаты исследования были обсуждены на 5 международных и республиканских научно-практических конференциях.

Опубликованность результатов. По теме диссертации опубликовано 10 научных работ, из них 5 научных статей в зарубежных научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, списка использованной литературы и приложения. Объем диссертации составляет 105 страниц.

Список опубликованных работ:

1. Rakhimov A., Narzikulov Z. Hohenberg-Martin Dilemma for Bose Condensed Systems and its Solution // NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics: Complex Phenomena in Nanoscale Systems. – Springer, Dordrecht (Netherlands), 2009. – pp. 165-175. (№ 3. Scopus; IF = 0.234).
2. Kleinert H., Narzikulov Z., Rakhimov A. Quantum phase transitions in optical lattices beyond the Bogoliubov approximation // Physical Review A. – American Physical Society (USA), 2012. – v. 85. – id. 063602. – 11 p. (№ 1. Web of Science; IF = 3.14).
3. Kleinert H., Narzikulov Z., Rakhimov A. Phase transitions in three-dimensional bosonic systems in optical lattices // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. – IOP Publishing (United Kingdom), 2014. – id. P01003. – 29 p. (№ 1. Web of Science; IF = 2.231)
4. Rakhimov A., Gazizulina A., Narzikulov Z., Schilling A., Sherman E.Ya. Magnetocaloric effect and Grüneisen parameter of quantum magnets with a spin gap // Physical Review B. – American Physical Society (USA), 2018. – Vol. 98. – id. 144416. – 12 p. (№ 1. Web of Science; IF = 3.14).
5. Rakhimov A., Abdurakhmonov T., Narzikulov Z., Yukalov V.I. Self-consistent theory of a homogeneous binary Bose mixture with strong repulsive interspecies interaction // Physical Review A. – American Physical Society (USA), 2022. – Vol. 106. – id. 033301. – p. 15. (№ 1. Web of Science;

IF = 3.14).

6. Narzikulov Z. Quantum corrections to the energy of Bose Einstein condensation state in optical lattices // “Nuclear Science and its Applications”: Book of Abstracts of the International Conference, Samarkand 25-28 September, 2012. – Tashkent, 2012. – pp. 58-59
7. Narzikulov Z. Phase transitions in three-dimensional optical lattices in auxiliary field approach // “Nuclear Science and its Application”: Book of Abstracts of the VII Eurasian Conference October 21-24, 2014. – Baku, 2014. – p. 415.
8. Narzikulov Z., Rakhimov A., Schilling A. The magnetocaloric effect in dimerized spin system with s=1/2 // 6th International Conference on Superconductivity and Magnetism, 29 April - 4 May 2018. – Antalya (Turkey), 2018. – pp.253
9. Narzikulov Z. Fluctuation of magnetization of triplons in TlCuCl3 //7th International conference “Superconductivity and Magnetism”, October 21-27, 2021. – Milas-Bodrum (Turkey), 2021. – p.646.
10. Narzikulov Z.A., Abdurakhmonov T., Rakhimov A. Strong repulsive interspecies interaction effects in two-component bose mixture // “Modern problems of condensed matter theory”: International conference October 17-22. – Dubna (Russia), 2022. – pp.53.

ГЛАВА I. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ОПТИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

Оптические решетки — это газы ультрахолодных атомов, в ловушке с периодическим потенциалом, который создается периодически расположенными пересекающимися стоячими волнами лазерного излучения. Так как атомы в узлах решетки расположены периодически в пространстве в литературе они иногда именуются искусственными кристаллами [1; pp.121-156, 2; pp.1464-4266, 3; pp.1455-1458]. Интерес к экспериментальным и теоретическим исследованиям этих искусственных кристаллов обусловлен двумя факторами [4; pp. 428-434]:

1) нейтральные атомы в этих оптических решетках имеют ряд интересных свойств, которые могут быть использованы для реализации квантового компьютера [5; p. 32];

2) их можно использовать для моделирования различных решетчатых структур, имеющих фундаментальное значение в физике конденсированного состояния, поскольку они позволяют контролируемым образом изучать физику твердого тела, в которой можно точно настроить силу взаимодействия для различной геометрии решеток. В частности, можно управлять параметрами гамильтониана и изучать различные режимы параметров системы.

Система бозонов с короткодействующим отталкивающим парным взаимодействием, захваченных в оптическую решетку, может быть описана гамильтонианом типа Бозе-Хаббарда:

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{g}{2}\sum_i^{N_s} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i + \sum_i^{N_s} (\varepsilon_i - \mu)\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i, \qquad (1.1)$$

где $\hat{b}_i{}^\dagger$ и $\hat{b}_i$ – бозонные операторы рождения и уничтожения в состоянии i; суммирование по $\langle i,j\rangle$ включает только пары ближайших соседей; J - амплитуда скачка (hopping amplitude), отвечающая за туннелирование атома с

одного узла на другой соседний узел; g – энергия отталкивания, и N_s – число состояний.

При нулевой температуре с целочисленным фактором заполнения $\nu \equiv N/N_s$, где N - полное число атомов, система бозонов, описываемая гамильтонианом (1.1), может находиться в SF или в фазе MI. Ясно, что КФП между этими двумя фазами связан безразмерным параметром силы взаимодействия $u = g/J$. При малых u в системе доминирует член скачка, поэтому она предпочитает находиться в SF-фазе. При больших $u \gg 1$ система находится в MI фаза.

Расчетами Монте-Карло [6; p.11] и экспериментальными данными [7; pp. 998–1004] для критической силы взаимодействия получено следующее значение $u_{crit} = 29.34$ при $d = 3$ и $\nu = 1$.

В сверхтекучей фазе существует конденсат, а значит спонтанно нарушается калибровочная симметрия. Также эта фаза имеет конечную сжимаемость и бесщелевой спектр возбуждения. Что касается фазы моттовского изолятора, то в этой фазе нет нарушения симметрии, и система несжимаема, так как количество атомов в узле фиксировано. В фазе моттовского изолятора все атомы локализованы, а в сверхтекучей фазе они могут туннелировать из одного состояния в другое.

Как было указано выше, фазы оптических решеток изучались с помощью КМК и экспериментально было получено, что происходит фазовый переход из конденсированного состояния в фазу нормальной жидкости при температуре $T = T_c$, где T_c – критическая температура фазового перехода. В работах [6; p.11, 7; pp. 998–1004] было установлено, что при переходе в фазу MI данная критическая температура понижается.

Имеются теоретические подходы, которые хорошо описывают границу фазового перехода [11; p.22, 12; p.12]. В этих подходах, основанных на модели Бозе-Хаббарда, параметр силы взаимодействия пертурбативно разлагается. Ясно, что они справедливы только для малых u, более того, они не имеют явных решений даже для случая $d = 1$ [8; p.485, 9; p 496, 10; p.368]. Что

касается непертурбативных подходов, здесь можно выделить приближения, в которых используется Гутцвиллер анзац [13; p.8, 14; p.8]. Эти подходы хорошо описывают динамику системы, но имеют свои недостатки: они не способны описать одномерный случай.

Нельзя не отметить наиболее мощную среднеполевую теорию, предложенную Бычук, Фоллхардт, Андрес и др. [15; p.17;16; p.1367-2630], которая также была основана на модели Бозе-Хаббарда. В этой теории, именуемой Бозонная динамическая теория среднего поля - B-DMFT, рассматривается резервуар, в котором находится смесь конденсированных и не конденсированных частиц. С помощью этой теории было точно описаны фазовые диаграммы, параметр порядка и другие наблюдаемые величины, что позволяет ставить ее на ряду с расчетами квантового Монте-Карло. К недостаткам B-DMFT можно отнести то, что не выполняется теорема Гугенгольца – Пайнса (см. рис. 10 в [16; p.1367-2630]) и в данном методе для решения уравнений необходимо использовать оценки КМК в непрерывном времени. Для этого нужны большие вычислительные ресурсы.

Применение непертурбативной теории ренормгруппы выявило новые масштабные свойства оптических решеток. Ранкон и Дюпюи [17; p.6] показали, что термодинамические величины модели Бозе-Хаббарда могут быть выражены с помощью универсальных масштабных функций класса универсальности разреженного Бозе-газа.

Для описания сверхтекучей фазы оптической решетки применима также теория Боголюбова. Изучая зависимость числа конденсированных частиц от параметра силы взаимодействия в приближении Хартри-Фока-Попова (HFP) [18; p.11], было отмечено, что в системе всегда будет присутствовать конденсат, даже в пределах сильной связи ($u \to \infty$), при этом подразумевается, что данное приближение не может предсказать КФП SF→MI. В другой работе этих авторов было применено двухпетлевое приближение [19; p.11]. Применяя данное приближение, они получили КФП с критическим значением параметра силы взаимодействия $u_{crit}(two - loop) \approx 6$, которая намного меньше

экспериментальных данных и результатов КМК и B-DMFT. Таким образом, вопрос о мощности приближения, основанного на теории среднего поля, отличном от B-DMFT, для адекватного описания фазовых диаграмм оптических решеток, остается открытым. Поэтому желательно разработать непертурбативный подход, который подходил бы для размерностей $d = 1,2,3$.

Альтернативный метод для решения задач разреженных Бозе-газов недавно был предложен Фредом Купером и др. [20; p.96-110, 21; p.21] под названием LOAF. Авторы нашли способ исправить вырождение при устранении взаимодействия вспомогательной коллективной парой и полями плотности путем выбора специальной формы обобщенного преобразования Хаббарда–Стратоновича. Несмотря на то, что данный подход не дает КФП для однородного Бозе-газа при нулевой температуре, он предсказывает желательный БЭК-переход второго рода при конечных температурах, также получен сдвиг критической температуры в положительную сторону, который согласуется с расчетами Монте-Карло и другими расчетами [22; p.1703-1709, 23; p.1011-1020]. Теория LOAF предсказывает новый тип сверхтекучей фазы – диатомный конденсат [24; p.10]. В этой фазе нет БЭК, но есть аномальная плотность в интервале температуры $T_c < T \leq T^*$, где T^* - температура перехода в нормальную фазу. Предполагается, что переход в диатомную фазу является фазовым переходом первого рода. Однако, данная фаза не была обнаружена еще экспериментально.

Как видно, нет единой теории, которая могла бы описать и фазовый переход, и сдвиг критической температуры. Исходя из этого в настоящей диссертационной работе предложено приближение, аналогичное приближению двухколлективной квантовой теории поля для оптических решеток, для решения следующих задач: предсказать квантовый фазовый переход из сверхтекучей фазы в Мотт инсуляторную фазу; получить сдвиг критической температуры фазового перехода при больших значениях параметра взаимодействия и рассмотреть возможную новую фазу, о которой было упомянуто ранее для оптических решеток.

Ниже мы используем $\hbar = k_B = 1$.

§ 1.1. Коллективная квантовая теория поля для трехмерной модели Бозе-Хаббарда

В представлении Ванье евклидово действие, соответствующее гамильтониану Бозе-Хаббарда, дается выражением [19; p.11]

$$\mathcal{A}(\psi^*,\psi) = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_i \psi^*(x_i,\tau)[\partial_\tau - \mu]\psi(x_i,\tau) - J \sum_{\langle i,j \rangle} \psi^*(x_i,\tau)\psi\big(x_j,\tau\big) \right.$$
$$\left. + \frac{g}{2} \sum_i \psi^*(x_i,\tau)\psi^*(x_i,\tau)\psi(x_i,\tau)\psi(x_i,\tau) \right\}, \qquad (1.2)$$

где μ – химический потенциал и $\beta = 1/T$. Точки решетки лежат в координатах

$$x_i = ia, \qquad (1.3)$$

a – параметр решетки, и

$$i \equiv (i_1, i_2, \dots, i_d), \qquad (1.4)$$

целочисленные вектора.

Статистическая сумма Z и большой термодинамический потенциал Ω находятся по следующим формулам:

$$Z = \int D\psi^* D\psi e^{-A(\psi^*,\psi)}, \qquad (1.5)$$

$$\Omega = -TlnZ. \qquad (1.6)$$

Ожидаемое значение основного состояния оператора $\hat{O}(\psi^*,\psi)$ можно выразить как функциональный интеграл:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int D\psi^* D\psi \hat{O}(\psi^*,\psi) e^{-A(\psi^*,\psi)} \qquad (1.7)$$

С помощью преобразования Хаббарда-Стратоновича член взаимодействия в (1.2) можно исключить, добавив к действию в экспоненте (1.5) фиктивное действие:

$$\mathcal{A}_{pair}[\psi^*,\psi,\Delta,\Delta^*] = \int_0^\beta d\tau \sum_i \left\{\frac{1}{2U} \vee |\Delta(\boldsymbol{x}_i,\tau) - g\psi(x_i,\tau)\psi(x_i,\tau)|^2\right\}. \quad (1.8)$$

содержащее парное поле Δ. После этого составим континуальный интеграл $\int D\Delta D\Delta^* e^{-A_{pair}[\psi^*,\psi,\Delta,\Delta^*]}$, и проинтегрируем по парному полю ψ. Это приведет к умножению статистической суммы Z на тривиальный постоянный множитель.

В работе [25; p.487] подчеркивалось, что эта процедура является сильно вырожденной. На самом деле, вместо (1.8) можно было бы с таким же успехом ввести плазмонное поле $\varphi(x,\tau)$, добавив к действию в (1.5) фиктивное

$$\mathcal{A}_{pl}[\psi^*,\psi,\varphi] = \int_0^\beta d\tau \sum_i \left\{-\frac{1}{2U}[\varphi(x_i,\tau) - g\psi^*(x_i,\tau)\psi(x_i,\tau)]^2\right\}, \quad (1.9)$$

и образуя функциональный интеграл $\int D\varphi e^{-A_{pair}[\psi^*,\psi,\varphi]}$, который опять умножается на Z с константой.

В принципе, мы также можем добавить комбинацию $\mathcal{A}_{pair}$ и $\mathcal{A}_{pl}$,, оставив при этом физические свойства системы неизменными. Например, $\mathcal{A}_{pl}cosh^2\theta - \mathcal{A}_{pair}sinh^2\theta$. Однако схематически вырождение не может быть легко проверено, поскольку вычисление диаграмм во всем порядке действительно невозможно. Это может быть выполнено только в некотором конечном порядке, например, в петлевом разложении, так что математическая эквивалентность поначалу мало пригодна.

Один из способов избежать вырождения и сделать подход коллективного поля уникальным был указан давно [26; p. 187-232]. Он основан на расширении стандартного эффективного действия $\Gamma[\Psi^*,\Psi]$, члены функционального разложения которого являются одночастичными неприводимыми вершинными функциями теории. Символ Ψ обозначает математические ожидания поля $\psi(x,\tau)$. Уникальная версия коллективных полей может быть введена путем перехода к *более высокому эффективному*

действию $\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi, \Delta, \Delta^*, \Phi]$. Тогда как обычное эффективное действие $\Gamma[\Psi^*, \Psi]$ получается из преобразования Лежандра производящего функционала теории $W[\eta, \eta^*]$, в которое добавлены дополнительные исходные члены $\eta\psi^* + \eta^*\psi$ к действию, более высокое эффективное действие получается из преобразования Лежандра производящего функционала $W[\eta, \eta^*, j, K, K^*]$, в котором к действию, связанному с плотностью и плотностью, добавлены дополнительные источники - парные поля. Более высокое эффективное действие будет зависеть от ожиданий полей $\psi, \psi^*, \rho \propto \psi^*\psi, \Delta \propto \psi\psi$ и $\Delta^* \propto \psi^*\psi^*$. Наконец, его нужно просто экстремизировать и никакие дополнительные функциональные интегралы не могут вызвать двойной подсчет диаграмм Фейнмана. Члены разложения в более высоком эффективном действии представляют собой двухчастичные неприводимые вершинные функции теории.

Другой метод, который также отказывается от флуктуаций коллективных полей в пользу коллективного классического поля, был разработан в последние годы на основе обобщения вариационного подхода с континуальным интегралом [27; p. 5080-5084] на все порядки теории возмущений. Данный метод оказался чрезвычайно успешным, что привело к наиболее точному теоретическому описанию критических явлений, именуемых в литературе ВПТ (см. обзорную статью в [28; p. 487]).

В третьем методе, который был недавно предложен и применен [20; p.96-110, 21; p. 21], используется комбинация двух вышеупомянутых методов: полностью флуктуирующих коллективных полей, с вышеупомянутым фиктивным действием $\mathcal{A}_{pl} cosh^2\theta - \mathcal{A}_{pair} sinh^2\theta$ для конкретного значения $sinh\theta = 1$. Этот выбор предпочтительнее, если мы хотим, чтобы приближение среднего поля демонстрировало возбуждения, не имеющие энергетической щели, в соответствии с теоремой Намбу-Голдстоуна. После тривиальной замены нормировки плазмонного и парного полей в полном действии $\mathcal{A} + \mathcal{A}_{pl} cosh^2\theta - \mathcal{A}_{pair} sinh^2\theta$ получаем

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{\psi}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}_{\varphi}[\varphi] + \mathcal{A}_{\Delta}[\Delta, \Delta^*], \#(1.10)$$

здесь

$$\mathcal{A}_{\psi}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\beta} d\tau \sum_i \{\psi^*(x_i, \tau)[\partial_\tau - \mu + \varphi(x_i, \tau) cosh\theta]\psi(x_i, \tau)$$

$$-\frac{1}{2} sinh\theta[\Delta\psi^*(x_i, \tau)\psi^*(x_i, \tau) + \Delta^*\psi(x_i, \tau)\psi(x_i, \tau)]\Big\} -$$

$$J \int_0^{\beta} d\tau \sum_{i,j} \psi^*(x_i, \tau)\psi(x_j, \tau), \qquad (1.11)$$

$$\mathcal{A}_{\varphi}[\varphi] = -\int_0^{\beta} d\tau \sum_i \frac{\varphi^2(x_i,\tau)}{2U}, \mathcal{A}_{\Delta}[\Delta, \Delta^*] = \int_0^{\beta} d\tau \sum_i \frac{\Delta(x_i,\tau)\Delta^*(x_i,\tau)}{2U}. \qquad (1.12)$$

На уровне полностью флуктуирующих полей φ, Δ, Δ^* параметр θ остается произвольным, что будет исправлено в следующем разделе.

Теперь рассмотрим отдельно две области, конденсированную и не конденсированную фазы.

§ 1.1.1. Конденсированная фаза

В этой фазе калибровочная симметрия $U(1)$ спонтанно нарушается. Наиболее удобный способ нарушения калибровочной симметрии для Бозе-систем – это Боголюбовский сдвиг, когда полевой оператор системы без конденсата заменяется следующим полевым оператором [29; p. 686–699]

$$\psi(x_i, \tau) = \psi_0 + \tilde{\psi}(x_i, \tau) \qquad (1.13)$$

здесь

$$\psi_0 = \sqrt{\nu n_0}. \qquad (1.14)$$

где $n_0 = N_0/N$ – доля конденсата. В отсутствии магнитной ловушки эта величина постоянна. Поле флуктуации $\tilde{\psi}(x_i, \tau)$ должно удовлетворять следующее условие:

$$\int_0^{\beta} d\tau \sum_i \tilde{\psi}(x_i, \tau) = 0. \qquad (1.15)$$

Подставляя (1.13) в (1.11), и разлагая квантовое поле $\tilde{\psi}(x_i,t)$ на реальную и мнимую части $\psi_1(x_i,t)$ и $\psi_2(x_i,t)$ в виде

$$\tilde{\psi}(x_i,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\psi_1(x_i,t) + i\psi_2(x_i,t)\big),$$

$$\tilde{\psi}^{\dagger}(x_i,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\psi_1(x_i,t) - i\psi_2(x_i,t)\big), \qquad (1.16)$$

Для однородной системы конденсат однороден и флуктуации удобно разложить в ряд Фурье следующим образом [30; p.7]:

$$\tilde{\psi}_a(x_i,\tau) = \frac{1}{\beta\sqrt{N_s^d}}\sum_{q,\omega_n}{}' \int_0^{\beta} \psi_a(q,\omega_n)e^{-i\omega_n\tau}\, exp\big[ix_i p_q\big] \qquad (1.17)$$

где $\omega_n = 2\pi nT$ – частоты Мацубары, и $p_q \equiv \{q_1, q_2, \dots, q_d\}2\,\pi/N_s\,a$ с q_i имеющие дискретные значения от 1 до $N_s - 1$- векторы импульса в зоне Бриллюэна. Суммирование по импульсам явно выглядит следующим образом

$$\frac{1}{N_s}\sum_{q}{}' \equiv \frac{1}{N_s^d}\sum_{q_1=1}^{N_s-1}\sum_{q_2=1}^{N_s-1}\dots\sum_{q_d=1}^{N_s-1} \qquad (1.18)$$

Штрих у суммирования означает, что $p = 0$ исключен, поскольку он содержится в вычитаемом ψ_0 . Будет полезно избежать возможных инфракрасных расхождений, особенно для $d < 3$.

В импульсном пространстве квадратичный член примет вид

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{2}\sum_{q,q',m,n} \psi_a(q,\omega_n)G_{ab}^{-1}(q,\omega_n;q',\omega_m)\psi_b(q',\omega_m) \qquad (1.19)$$

здесь

$$G(\omega_n,q) = \frac{1}{\omega_n^2 + E^2(q)}\begin{pmatrix} \varepsilon(q) + X_2 - Jz_0 & \omega_n \\ -\omega_n & \varepsilon(q) + X_1 - Jz_0 \end{pmatrix}, \qquad (1.20)$$

где начальная дисперсия (bare dispersion) $\varepsilon(q)$ и дисперсия фононов $E(q)$ задаются следующим образом

$$\varepsilon(q) = 2J\left(d - \sum_{\alpha=1}^{d} cos(2\pi\, q_\alpha/N_s)\right), \qquad (1.21)$$

Интегралы по флуктуирующим коллективным полям для определения термодинамического потенциала невозможно точно посчитать. В этом случае, воспользуемся приближением Седловой точки (saddle point approximation), применение которой описывается в [31; p. 1742-5468].

Отметим, что на решетках интегралы импульса всегда конечны, поэтому нет необходимости в перенормировке константы связи. В этом заключается отличие от атомных газов.

Для термодинамического потенциала из Ω вычитается «идеальный» случай:

$$\Omega(U=T=0)=\frac{1}{2}\sum_q(\varepsilon(q)-\mu-Jz_0)=\frac{1}{2}\sum_q(\varepsilon(q)+\varphi'), \tag{1.22}$$

и остается только вычитаемое выражение

$$\Omega_{ren}=\Omega(U,T)-\Omega(g=0,T=0)$$

$$=\frac{1}{2}\sum_q(E(q)-\varepsilon(q)-\varphi')+N_s\nu n_0(\varphi'-\Delta)+\frac{N_s\Delta^2}{2Usinh^2\theta}-N_s \tag{1.23}$$

$$+T\sum_q ln\left(1-e^{-\beta E(q)}\right),$$

Для дисперсии Боголюбовских фононов получим известное выражение

$$E(q)=\sqrt{\varepsilon(q)}\sqrt{\varepsilon(q)+2\Delta}, \tag{1.24}$$

которая является линейной по q для малых импульсов, что соответствует теореме Намбу-Голдстоуна.

Минимизируя термодинамический потенциал Ω по Δ получим следующее уравнение:

$$\Delta=gsinh^2\theta\left[\nu n_0+\frac{\Delta}{N_s}\sum_q\frac{c_q}{E(q)}\right], \tag{1.25}$$

где c_q означает

$$c_q=\frac{1}{2}+f_\beta\big(E(q)\big)=\frac{1}{2}coth(\beta E\,(q)/2),$$
$$f_\beta(\omega)=1/\left(e^{\beta\omega}-1\right).$$

Минимизация Ω относительно φ' , тем самым учитывая соотношение $\partial E\,(q)/\partial\,\varphi' = (\varepsilon(q) + \varphi')/E\,(q)$, дает следующее уравнение:

$$N_s \nu n_0 + \sum_q \left[\frac{(\varepsilon(q)+\varphi')c_q}{E(q)} - \frac{1}{2}\right] - \frac{N_s(\varphi'+\mu+Jz_0)}{g cosh^2\theta} = 0. \qquad (1.26)$$

Данной формулой воспользуемся для определения неконденсированной доли n_u.

§ 1.1.2. Нормальная и аномальная плотности

Согласно общим правилам статистической механики общее число частиц N связаны с химическим потенциалом:

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V}. \qquad (1.27)$$

Учитывая, что $N \equiv N_0 + N_u$, здесь N_0 число конденсированных атомов и $n_0 = N_0/N_s\,\nu$ – конденсированная доля, доля неконденсированных атомов будет

$$n_u = \frac{N_u}{N} = \frac{1}{\nu N_s}\sum_q \left[\frac{(\varepsilon(q)+\varphi')c_q}{E(q)} - \frac{1}{2}\right]. \qquad (1.28)$$

Естественно, удовлетворяется соотношение $n_0 + n_u = 1$.

При нарушении калибровочной симметрии U(1), Бозе-система характеризуется не только математическими ожиданиями флуктуирующей части ψ -поля с нормальной плотностью $n_u = \langle\tilde{\psi}^*\,\tilde{\psi}\rangle$, но и с аномальной плотностью, которая определяется соотношением

$$\sigma(x_i,\tau,x_j,\tau') = \langle\tilde{\psi}(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_j,\tau')\rangle. \qquad (1.29)$$

Понятно, что для однородной системы в состоянии равновесия, в частности для периодических оптических решеток без магнитной ловушки, σ не зависит от координат, т.е. $\sigma(x_i,\tau,x_j,\tau') = const$, как подчеркивалось в [32; p.521]. Пренебрежение аномальной плотностью делает все расчеты несогласованными, динамику - несохраняющей, а термодинамику -

некорректной. Это нарушает порядок фазового перехода и приводит к нестабильности системы. В [32; p.521] также было показано, что подход среднего поля, называемый в литературе приближениями HFP, приводит к разрыву в кривой намагничивания антиферромагнетика с триплонным БЭК. Таким образом, всегда надо учитывать $\sigma \neq 0$.

$$\sigma = \frac{1}{2\nu N_s \beta} \sum_n \sum_q \frac{2\Delta}{\omega_n^2 + E^2(q)}$$

$$= \frac{\Delta}{\nu N_s} \sum_q \frac{c_q}{E(q)} = \frac{\Delta}{\nu N_s} \sum_q \frac{1}{E(q)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(q)} - 1} \right). \qquad (1.30)$$

Единственный параметр, который пока остается свободным в начальном действие (1.11), — это θ. Ее можно выбрать так, чтобы энергия квазичастиц $E(q)$, исходя из теоремы Голдстоуна для разреженного Бозе-газа со спонтанной нарушенной симметрией (которая эквивалентна знаменитой теореме Гугенгольца-Пайнса [33; p. 599-639]), сводилась [19; p.11] к бесщелевой Боголюбовской дисперсии

$$E(\mathbf{q})_{one\ loop} = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{q})}\sqrt{\varepsilon(\mathbf{q}) + 2g\nu} \qquad (1.31)$$

Таким образом фиксируем θ для удовлетворения условия

$$sinh^2\theta = 1, cosh^2\theta = 2,$$

Наконец, напишем полное выражение для Ω:

$$\Omega = \frac{1}{2}\sum_q \left[E(q) - \varepsilon(q) - \Delta\right] + \frac{N_s\Delta^2}{2g} - N_s + T\sum_q ln\left(1 - e^{-\beta E(q)}\right), \qquad (1.32)$$

где

$$\mu = 2\nu g - \Delta - Jz_0. \qquad (1.33)$$

Собственная энергия Δ в уравнениях (1.32) и (1.35) определяется из следующей системы нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{gathered} \Delta = g\nu(n_0 + \sigma), n_0 = 1 - n_u, \\ n_u = \frac{1}{\nu N_s}\sum_q \left[\frac{c_q(\varepsilon(q)+\Delta)}{E(q)} - \frac{1}{2}\right], \\ \sigma = \frac{\Delta}{\nu N_s}\sum_q \frac{c_q}{E(q)}, \end{gathered} \qquad (1.34)$$

где c_q дано в (1.25) и g, J, ν, T являются входными параметрами.

§ 1.1.3. Симметричная фаза

При $n_0 = 0$ Гамильтониан (1.1) симметричен относительно преобразования $\psi \to e^{i\alpha}\psi$. Тогда $\varphi' \neq \Delta$ и энергетический спектр имеет щель с дисперсией

$$E(q) = \sqrt{(\varepsilon(q) + \varphi' - \Delta)(\varepsilon(q) + \varphi' + \Delta)}. \tag{1.35}$$

Основное уравнение в этом режиме при $T > T_c$ будет

$$\begin{gathered} \Delta = g\nu\delta, \sigma = \frac{\Delta}{\nu N_s}\sum_q \frac{c_q}{E(q)}, \\ \nu = \frac{1}{N_s}\sum_q \left[\frac{(\varepsilon(q)+\varphi')c_q}{E(q)} - \frac{1}{2}\right]. \end{gathered} \tag{1.36}$$

Система уравнений (1.36) с энергетическим спектром (1.35) может иметь решение $\Delta \neq 0, \varphi' > \Delta$, приводящее к экзотическому состоянию без конденсата, но с конечной аномальной плотностью: $n_0 = 0, \sigma \neq 0$. В работе [24; p. 10] было показано в, что эта фаза имеет ненулевую долю SF. Верхняя граница такого состояния обозначается T^*, и определяется путем решения уравнений (1.36) с учетом $\Delta = 0, \varphi' > 0$. Таким образом, было теоретически предсказано, что ультрахолодные разреженные атомные газы обладают сверхтекучим состоянием без Бозе-конденсации [24; p. 10]. Однако до настоящего времени такие состояния экспериментально не наблюдались. Мы исследуем возможность существования такого состояния для оптических решеток с отрицательным результатом.

§ 1.2. Вариационная пертурбативная теория в оптических решетках

Интересно сравнить наши результаты с результатами вариационной теорией возмущения [28; p. 489]. В низшем порядке это эквивалентно приближению HFB, используемому в операторном формализме [34; p.57-64].

Для этого сформулируем приближение HFB для оптических решеток в рамках функционального интеграла.

Отправной точкой снова является (1.2), в котором мы выполняем сдвиг Боголюбова (1.13) и разделим действие следующим образом

$$A = A_{(0)} + A_{(1)} + A_{(2)} + A_{(3)} + A_{(4)}, \tag{1.37}$$

где

$$A_{(0)} = \beta N_s \nu n_0 \left[\frac{g}{2}\nu n_0 - \mu - Jz_0\right]$$

$$A_{(1)} = \sqrt{\nu n_0}[-\mu - Jz_0 + U\nu n_0] \int d\tau \sum_i \left(\tilde{\psi}(x_i,\tau) + \tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\right)$$

$$A_{(2)} = \int_0^\beta d\tau \left\{\sum_i \tilde{\psi}^*(x_i,\tau)[\partial_\tau - \mu]\tilde{\psi}(x_i,\tau) + \frac{g}{2}\nu n_0 \right.$$

$$\times \sum_i \left[\tilde{\psi}(x_i,\tau) + 4\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_i,\tau) + \tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\right]$$

$$\left. -J \sum_{\langle i,j\rangle} \tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_j,\tau)\right\} \tag{1.38}$$

$$A_{(3)} = g\sqrt{\nu n_0} \int_0^\beta d\tau \sum_i \left[\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}^2(x_i,\tau) + \tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_i,\tau)\right]$$

$$A_{(4)} = \frac{g}{2}\int_0^\beta d\tau \sum_{\boldsymbol{i}} \left[\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_i,\tau)\right]^2.$$

Далее добавим и вычтем следующий член

$$A_{(\Sigma)} = \int_0^\beta d\tau \sum_i \left\{\Sigma_{cl}\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_i,\tau)\right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\Delta_{cl}\left[\tilde{\psi}^*(x_i,\tau)\tilde{\psi}^*(x_i,\tau) + \tilde{\psi}(x_i,\tau)\tilde{\psi}(x_i,\tau)\right]\right\} \tag{1.39}$$

с вариационными параметрами Σ_{cl} и Δ_{cl}. Нижние индексы cl подчеркивают, что это вариационные параметры, которые, в отличие от предыдущих полей φ и Δ, не предназначены для функционального интегрирования.

Используя снова действительную и мнимую части комплексных полей $\tilde{\psi}, \tilde{\psi}^*$, найдем следующий термодинамический потенциал:

$$\Omega = N_s \nu n_0 \left(-\mu - Jz_0 + \frac{g}{2}\nu n_0\right)$$
$$+\frac{1}{2}\sum_q \left[E(q) - \varepsilon(q) + \mu + Jz_0\right]$$
$$+T\sum_q ln\left(1 - e^{-\beta E(q)}\right) + \frac{g\nu}{8N}\left[3\sigma_1^2 + 3\sigma_2^2 + 2\sigma_1\sigma_2\right] \quad (1.40)$$
$$+\frac{1}{2}\sigma_1(3g\nu n_0 - Y_1 - Jz_0 - \mu)$$
$$+\frac{1}{2}\sigma_2(g\nu n_0 - Y_2 - Jz_0 - \mu),$$

где мы опять вычли $\Omega(T = 0, g = 0)$. Здесь

$$\sigma_1 = T\sum_{q,n} \frac{\varepsilon_q + Y_2}{\omega_n^2 + E^2(q)}, \sigma_2 = T\sum_{q,n} \frac{\varepsilon_q + Y_1}{\omega_n^2 + E^2(q)}, \quad (1.38)$$

Параметры Σ_{cl} и Δ_{cl} теперь определяются вариационно из требования минимизации термодинамического потенциала [35; p.9],

$$Y_1 = 3g\nu n_0 - \mu - Jz_0 + \frac{g}{2N_s}(3\sigma_1 + \sigma_2),$$
$$Y_2 = g\nu n_0 - \mu - Jz_0 + \frac{g}{2N_s}(\sigma_1 + 3\sigma_2). \quad (1.39)$$

Условие без щелевого энергетического спектра накладывается вручную. Из (1.38) получим $Y_2 = 0$, что приводит к дисперсии

$$E(q) = \sqrt{\varepsilon(q)}\sqrt{\varepsilon(q) + 2\Delta}, \quad (1.40)$$

где $\Delta = Y_1/2$. Тогда получим следующие уравнения

$$\Delta = g\nu n_0 + \frac{g}{2N_s}(\sigma_1 - \sigma_2),$$
$$\mu + Jz_0 = g\nu n_0 + \frac{g}{2N_s}(\sigma_1 + 3\sigma_2). \quad (1.41)$$

§ 1.2.1. Нормальная и аномальная плотности в ВПТ

Единственное различие между этими двумя приближениями заключается в знаке аномальной плотности: $\sigma > 0$ в коллективной квантовой теории поля и $\sigma < 0$ в ХФБ.

Подводя итог, приведём все основные уравнения обеих приближений:

$$\Delta = g\nu(n_0 + \sigma), n_0 = 1 - n_u,$$
$$\sigma = \xi\frac{\Delta}{\nu N_s}\sum_q \frac{c_q}{E(q)},$$

$$E(q) = \sqrt{\varepsilon(q)}\sqrt{\varepsilon(q) + 2\Delta}, \tag{1.42}$$

$$c_q = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(q)} - 1},$$

$$\mu = 2g\nu - \Delta - Jz_0,$$

$$\xi = \begin{cases} -1, & HFB \\ +1, & Two\ Collective\ Quantum\ Fields\ and\ LOAF, \end{cases}$$

где n_u дано в (1.34).

Отметим, что аналогичные соотношения справедливы и для атомных газов. Разницу можно увидеть только в фазе $T > T_c$. Здесь можно использовать замены, которые перечислены в приложении B. В нормальной фазе, $n_0 = 0$, теория ХФБ дает следующее

$$\Delta = g\nu\sigma = -\frac{\Delta}{\nu N_s}\sum_q \frac{c_q}{E(q)}. \tag{1.43}$$

Поскольку левая часть этого уравнения отрицательная, а правая положительная, по крайней мере для оптических решеток уравнение (1.43) имеет единственное решение $\sigma = 0$. Это значит, что в нормальной фазе $\sigma = 0$ и $n_0 = 0$ (см. уравнение (1.42)) одновременно. Следовательно, теория ХФБ не предсказывает сверхтекучую фазу без конденсата, что противоречит результатам Купера и др. [24; p.10] на уровне среднего поля.

Из вышеприведенных рассуждений легко понять, что ВПТ сдвиг критической температуры T_c в результате взаимодействия не наблюдается. $\Delta T_c = T_c - T_c^0 = 0$.

§ 1.3. Результаты и обсуждение

§ 1.3.1. Квантовый фазовый переход в теории двух коллективных квантовых полей и ВПТ

Сначала обсудим возможность КФП в оптических решетках в теории двух коллективных квантовых полей на уровне среднего поля и в приближении ХФБ. Было показано, что для разреженных атомных Бозе газов

приближение коллективного квантового поля не предсказывает КФП [21; p. 1011–1020], в то время как приближение ХФБ предсказывает КФП [32; p.521]. Ниже покажем, что в случае трехмерной оптической решетки ситуация обратная. Это можно объяснить следующим образом. Перепишем основное уравнение при $T = 0$ в виде:

$$n_0(\Delta) = \frac{\Delta}{g\nu} - \sigma(\Delta). \tag{1.44}$$

Ясно, что для взаимодействующей системы $g \neq 0$ и $\Delta \neq 0$. Поскольку в коллективной квантовой теории поля $\sigma(\Delta) > 0$, уравнение (1.44) может иметь решение $n_0(\Delta) = 0$ с $\Delta \neq 0$ (см. таблицу 1.1). Однако, в приближении HFB $\delta(\Delta) < 0$ и $n_0(\Delta)$ в (1.43) может иметь в качестве единственного решения $n_0 > 0$ для $\Delta \neq 0$. Отметим, что в случае разреженных атомных газов при $T = 0$ [36; p.1-16]

$$\delta(\Delta) = \begin{cases} -8\rho\sqrt{\gamma/\pi} < 0 \text{ Two} - \text{Collective Quantum Field} \\ +8\rho\sqrt{\gamma/\pi} > 0 \text{ HFB,} \end{cases}$$

с безразмерным газовым параметром $\gamma = a_s^3\rho$, что характеризует силу взаимодействия газа после перенормировки. Он формируется из длины s-волнового рассеяния a_s и плотности частиц ρ. Эта смена знака обусловлена тем, что разреженные атомные газы имеют КФП в приближении HFB, но не в двухколлективной квантовой теории поля на уровне среднего поля. На рис. 1.1 представлена конденсированная доля n_0 как функция от $u = g/J$ для $\nu = 1,2,3,4$. Видно, что n_0 плавно стремится к нулю и обращается в ноль при u_{crit}. Для сравнения приведено $u_{crit} = 6\left(\sqrt{\nu} + \sqrt{\nu + 1}\right)^2$, полученное в приближении Гуцвиллера. Можно сравнить со следующими результатами приближения Гуцвиллера: $u_{crit}(\nu = 1) = 34.97$, $u_{crit}(\nu = 2) = 59.39$, $u_{crit}(\nu = 3) = 83.56$, $u_{crit}(\nu = 4) = 107.66$. Видно, что несмотря на довольно большие значения u_{crit} (см. Таблицу 1.1) в двух коллективной квантовой теории поля, она дает желаемый фазовый переход второго рода.

Таблица 1.1

Критические параметры модели Бозе-Хаббарда в зависимости от фактора заполнения ν в приближении двух коллективных квантовых полей

ν	1	2	3	4	5
$u_c = (g/J)_c$	56.08	95.4	134.3	173	211.7
$t_c^0 = T_c^0/J$	5.6	9.69	13.70	17.70	21.67
t_c^0 in small q approx.	5.06	10.07	15.2	20.25	25.32

Примечание: $u_c = (g/J)_c$ указывается во второй строке; в третьей строке указаны критические температуры идеальных оптических решеток при $d = 3$ в единицах J; в четвертой строке представлены приблизительные значения t_c^0 [см. (1.45)]

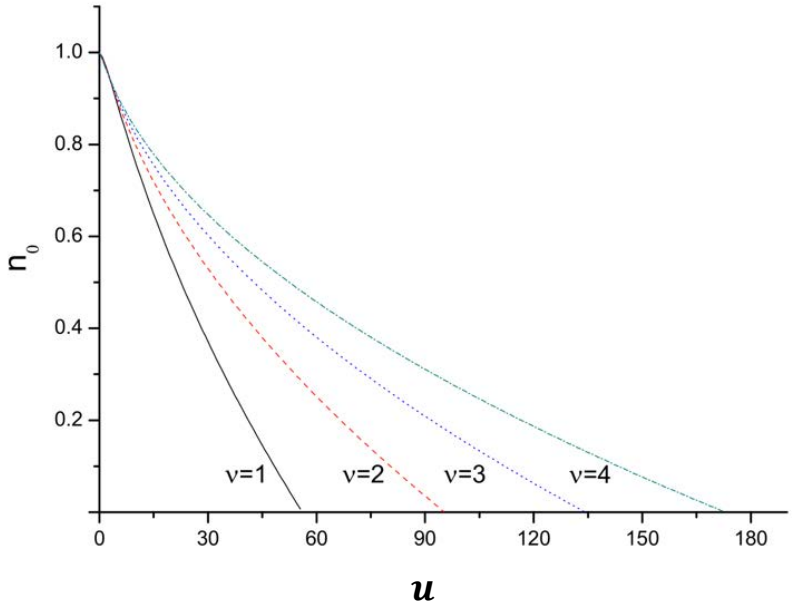


Рис.1.1. Конденсированная фракция n_0 при нулевой температуре как функция $u = g/J$ для различных факторов заполнения ν

§ 1.3.2. Критическая температура T_c^0 в идеальных случаях

Перед тем как рассмотреть сдвиг T_c, оценим критическую температуру T_c^0 для оптической решетки с $g = 0$. Предполагая $\Delta = 0$ в уравнении (1.34) и

вводя безразмерные параметры $t_c^0 = T_0^c/J$, $\hat{\varepsilon}_q = \varepsilon_q/2J = \sum_{\alpha=1}^{3}(1 - cos\pi q_\alpha)$, получим известную формулу

$$\nu = \int_0^1 dq_1 dq_2 dq_3 \frac{1}{e^{2\hat{\varepsilon}_q/t_c^0} - 1} \tag{1.45}$$

которую можно рассматривать как нелинейное уравнение для t_c^0 при заданном факторе заполнения ν. Полученные численные оценки для t_c^0 приведены в таблице 1.1. Видно, что для $\nu = 1$ $T_c^0 = 5.6J$, что согласуется с другими оценками, приведенными в справочной литературе [6; p.11, 29; p. 686–699].

Отметим, что T_c^0 можно аппроксимировать как $T_c^0 = 5.6J\nu^{0.825}$ в диапазоне $\nu \in (1,5)$, включая также нецелочисленные значения. В третьей строке таблицы 1.1 представлены приблизительные значения t_c^0.

§ 1.3.3. Сдвиг T_c, обусловленный взаимодействием

Оценим теперь сдвиг $\Delta T_c/T_c^0 = (T_c - T_c^0)/T_c^0$ аналитически. Выше было показано, что сдвиг $\Delta T_c/T_c^0 = 0$ для ВПТ или эквивалентен для ХФБ. Для LOAF из основных уравнений при $T \to T_c$ для $n_0 = 0, n_u = 1$ и вводя безразмерные переменные

$$\begin{gathered} \Delta = u^2\kappa^2 T_c^0, T_c = T_c^0\alpha, T_c^0 = Jt_c^0, \\ \varepsilon_q = 2J\hat{\varepsilon}_q, E(q) = 2JE(q), \end{gathered} \tag{1.46}$$

здесь $\hat{\varepsilon}_q = \sum_\alpha (1 - cos\pi q_\alpha), E(q) = \sqrt{\hat{\varepsilon}_q}\sqrt{\hat{\varepsilon}_q + u^2\kappa^2 t_c^0}, \Delta T_c/T_c^0 = \alpha - 1$ и t_c^0 дан в третьей строке таблицы 1.1. Проинтегрировав получим (подробно указано в [31; p. 1742-5468])

$$\alpha = \frac{2\sqrt{2}\pi^2\kappa}{\sqrt{t_c^0}\mathrm{acrtan}\tilde{\theta}}, \tag{1.47}$$

$$0 = 4\kappa\pi^{8/3}6^{1/3} - \sqrt{2t_c^0}\left[(6\pi^2)^{\frac{1}{3}} + 2u\kappa^2\pi^2\right]\mathrm{acrtan}\tilde{\theta} \tag{1.48}$$

где $\tilde{\theta} = \frac{\sqrt{2}(6\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{2\kappa u\sqrt{t_c^0}}$.

Теперь рассмотрим отдельно два режима:

(1) Слабовзаимодействующий режим. Для слабовзаимодействующего режима получим

$$\alpha = 1 + \frac{ut_c^0}{12}\left(\frac{6}{\pi^4}\right)^{2/3} + O(u^2), \tag{1.49}$$

и отсюда

$$\frac{\Delta T}{T_c^0} = \alpha - 1 = \frac{ut_c^0}{12}\left(\frac{6}{\pi^4}\right)^{2/3} + O(u^2), \tag{1.50}$$

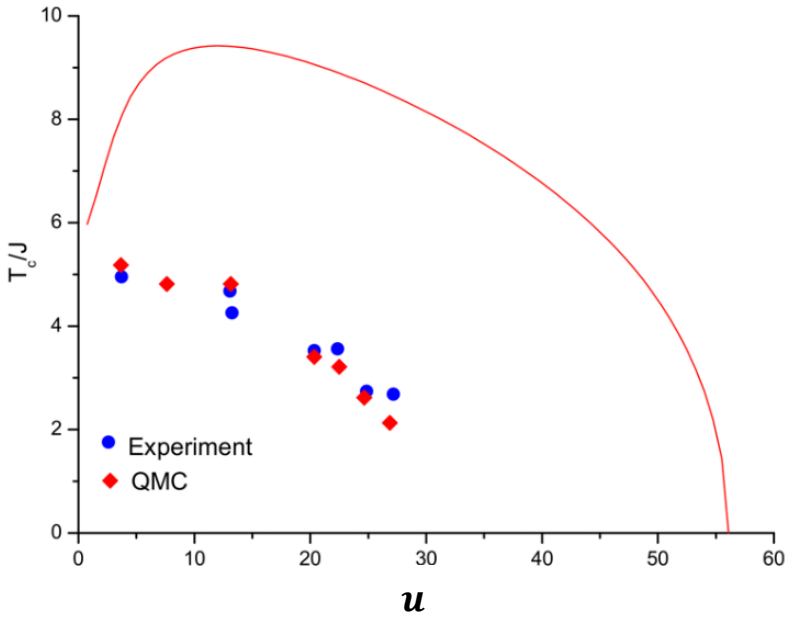
что означает, что для малой константы связи, т.е. $(U/J) < 1$, сдвиг положительный и увеличивается с увеличением g/J.

(2) Сильно взаимодействующий режим. В этом режиме можно заключить, что T_c уменьшается с увеличением u [подробно смю в [31; p.29]], т.е.

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^0} = \alpha - 1 = \frac{-ut_c^0}{ut_c^0 + 2\pi^{8/3}6^{1/3}} < 0. \tag{1.51}$$

Таким образом, наша аналитическая оценка показывает, что критическая температура T_c как функция константы связи g, т.е. функция $T(u)$ сначала увеличивается, а затем уменьшается с увеличением u для оптических решеток. Уменьшение T_c при большой константе связи согласуется с экспериментальными измерениями [7; p. 998–1004].

На рис. 1.2 представлена зависимость T_c (в единицах J) от u для $\nu = 1$. Сплошная линия соответствует точному численному расчету. Экспериментальные точки (кружки) взяты из [7; p. 998–1004], закрашенные ромбы взяты из расчетов методом Монте-Карло [6; p.11]. Уменьшение T_c при большой константе связи обнаруживается также для целых ν≥1, как показано на рис. 1.3.



Кружками показаны экспериментальные значения, приведенные в [7; p. 998–1004], сплошные ромбы взяты из расчетов Монте-Карло [6; p.11]. Отметим первоначальный подъем, который был обнаружен также в атомных газах [23; p. 1011–1020]

Рис. 1.2. T_c (в единицах J) как функция g/J в приближении седловой точки двухколлективной теории поля для $\nu = 1$

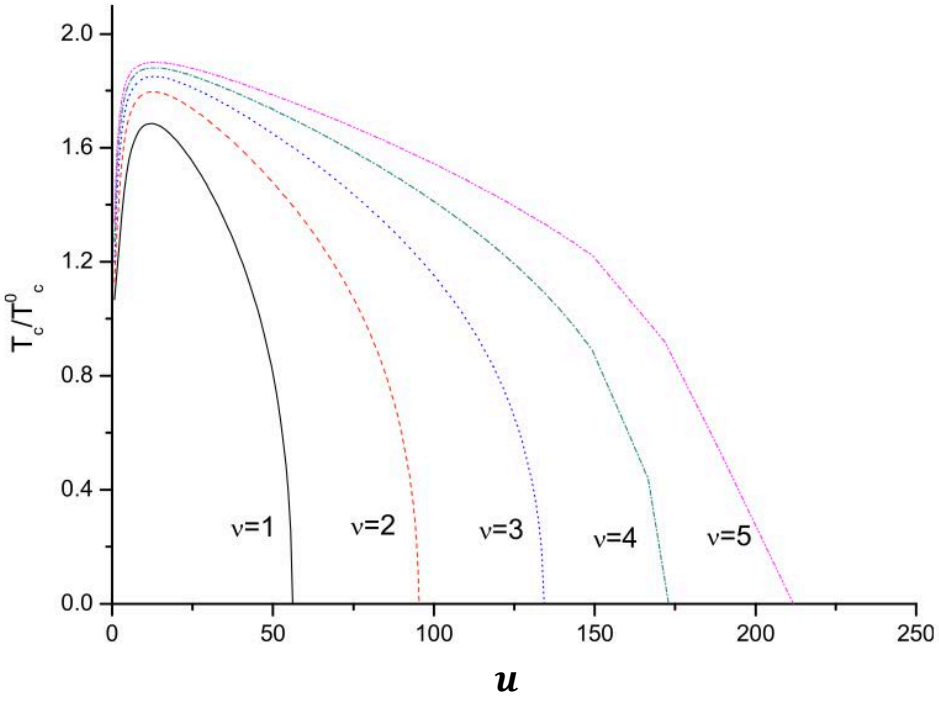


Рис. 1.3. Критическая температура T_c (в единицах J) как функция g/J для $\nu = 1, 2, 3, 4, 5$

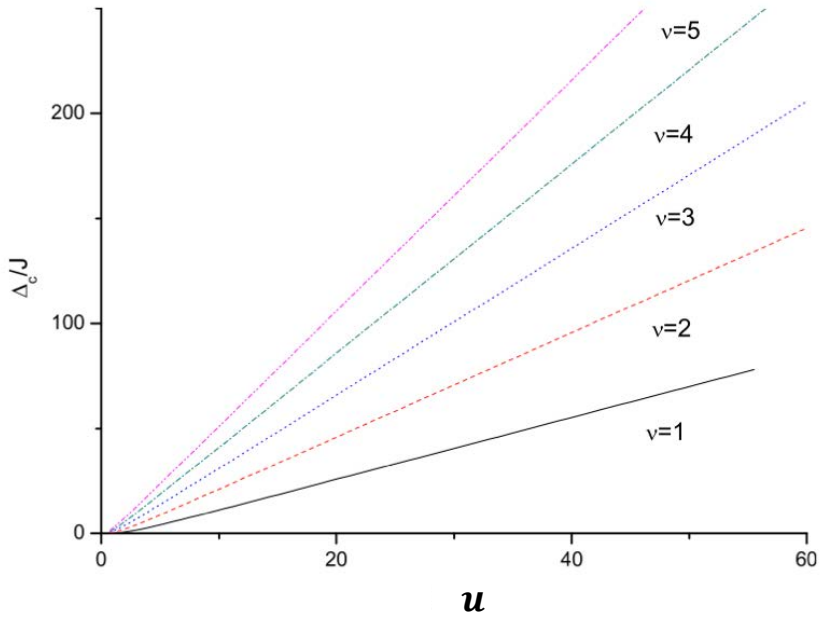


Рис. 1.4. Критическое значение Δ_c в зависимости от u для различных коэффициентов заполнения ν

На Рис. 1.4 представлены критические значения собственной энергии $\Delta_c = \Delta(T = T_c)$ в единицах J относительно (g/J). Отметим, что при фиксированном J Δ_c увеличивается с увеличением u и ν. С другой стороны, мы обнаружили, что Δ_c в единицах $T_c^0(\nu)$, то есть $\Delta_c\,(T = T_c)/T_c^0\,(\nu)$ в зависимости от u практически не зависит от ν, например, $(\Delta_c/T_c^0)|_{\nu=1} = 7.656$ и $(\Delta_c/T_c^0)|_{\nu=4} = 7.780$ при $u = 42.0$.

Теперь рассмотрим поведение Δ при $T > T_c$. Купером и др. [24; p. 10] было предложено, что в интервале температур $T \in (T_c, T^*)$ существует $U(1)$-симметричная фаза с $n_0 = 0$, но $\sigma \neq 0$. Это означало бы существование сверхтекучего состояния без конденсата. Однако, для оптических решеток мы не нашли решения с $\Delta \neq 0, \varphi' \neq 0$ в уравнении (1.46) для Δ и φ'. Вместо этого уравнения при $T > T_c$ имеют решение $\Delta = 0, \varphi' = 2g\nu - Jz_0 - \mu$. В этом нормальном состоянии с $\sigma = 0$ коэффициент заполнения, характеризующий плотность частиц, определяется известным уравнением

$$\nu = \frac{1}{N_s}\sum_q \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_q - 2U\nu - Jz_0 - \mu)} - 1}$$

$$\int_0^1 dq_1 dq_2 dq_3 \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_q - 2U\nu - Jz_0 - \mu)} - 1},$$

с чистой дисперсией $\varepsilon_q = 2J\sum_{\alpha=1}^{3}(1 - cos\pi q_\alpha)$.

Химический потенциал взаимодействующих бозонов в $T > T_c$ можно рассчитать последовательно из (1.34) с входными параметрами ν, J, g, и T, или с заданным внешним магнитным полем, как в случае триплонов.

§ 1.4. Выводы по первой главе

В данной главе разработаны коллективная квантовая теория поля и теория вариационных возмущений для 3D оптических решеток при низких температурах. Оба приближения удовлетворяют теореме Гугенгольца-Пайнса. Показано, что рассмотренная теория двух коллективных квантовых полей в приближении седловой точки предсказывает квантовый фазовый переход второго рода, который отсутствует в ВПТ [37; p.11]. К сожалению, предсказанное критическое значение, например, при $\nu = 1$ почти вдвое больше экспериментального. Отметим, что основные уравнения ранее упомянутого приближения LOAF [24; p.10] и ВПТ формально совпадают. Отличие заключается в знаке аномальной плотности σ, как это видно из уравнений (1.42). Получена аналитическая оценка сдвига критической температуры T_c, обусловленная контактным взаимодействием, как в режиме слабого, так и сильного взаимодействий. Сдвиг равен нулю для ВПТ, хотя имеет нетривиальную зависимость от силы связи (g/J) в приближении коллективного квантового поля, а также в приближении LOAF. Общее поведение фазовой диаграммы качественно хорошо согласуется с существующими экспериментальными и неэмпирическими квантовыми результатами Монте-Карло. Подобное поведение, например, подавление критической температуры при большом газовом параметре для однородных взаимодействующих бозе-газов также было обнаружено в моделировании континуальных интегралов в методе Монте - Карло [38; p.1-87].

Относительно зависимости критической температуры от коэффициента заполнения показано, что T_c/T_c^0 увеличивается с увеличением ν при фиксированном g/J. Из рисунков 1.1 и 1.2 можно заключить, что для более точного описания фазовых переходов в оптических решетках настоящая теория должна быть расширена за пределы приближения седловой точки, используемого для определения термодинамического потенциала или расширена в рамках B-DMFT [16; p.11]. При применении данной теории не обнаружено экзотическое сверхтекучее состояние с конечной аномальной плотностью, но было обнаружено отсутствие конденсата (с присутствием аномальной плотности). Следовательно, температуры T^* и T_c, введенные Купером и др. [24; p.10] совпадают. Система находится в сверхтекучем состоянии при $0 \leq T \leq T_c$, и в нормальном состоянии при $T > T_c$.

ГЛАВА II. КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ МАГНИТОВ СО СПИНОВОЙ ЩЕЛЬЮ

Свойства конденсированного состояния при низких температурах всегда были в центре внимания. Повышенный интерес вызывали такие явления как сверхтекучесть/сверхпроводимость, квантовый фазовый переход или различные виды топологических порядков. Для конденсированных систем П. Дебай [39; p. 1154-1160] и У.Ф. Джиок [40; p. 1864–1870] независимо друг от друга в 1926 г. предложили использовать МКЭ в парамагнитных материалах для достижения температуры значительно ниже 1 К. Эффект, описывающий изменение температуры магнитного материала, которое происходит с адиабатным изменением внешнего магнитного поля, является основой магнитных холодильников. Исследования МКЭ при комнатной температуре стали еще одним направлением в этой области (см. работы Вольфа [41; p.35]).

Теоретически МКЭ описывается магнитным параметром Грюнейзена,

$$\Gamma_H = \frac{1}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S \tag{2.1}$$

который соответствует температурному градиенту в плоскости T(H) вдоль изонетропической (постоянная энтропия) линии и определяет охлаждение или нагрев материала при изменении внешнего магнитного поля, а энтропия системы остается неизменной. Данный процесс является адиабатическим, и следовательно

$$\delta Q = TdS = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H dT + T\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T dH = 0, \tag{2.2}$$

отсюда

$$\Gamma_H = -\frac{1}{C_H}\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T, \tag{2.3}$$

где $C_H = T(\partial S/\partial T)_H$ теплоемкость при постоянном магнитном поле H. Экспериментально параметр Грюнайзена можно получить, измеряя

температуру при постоянной энтропии плавно меняя магнитное поле, и подставляя в уравнение (2.1). Аналогичное выражение для параметра Грюнайзена можно получить, используя намагниченность M

$$\Gamma_H = -\frac{1}{C_H}\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H, \tag{2.4}$$

из термодинамического потенциала Ω и соответствующего соотношения Максвелла $d\Omega = -SdT - Nd\mu - MdH$. Объем и давление системы остается постоянной. Здесь μ химический потенциал и N число частиц.

В работе [42; p.4], используя масштабный анализ авторы пришли к выводу, что параметр Грюнайзена расходится в любой ККТ. В работе [43; p.10] авторы рассматривали знак Γ_H по обе стороны ККТ. Ими установлены следующие особенности магнитного параметра Грюнайзена:

1) Вблизи критического значения магнитного поля при T=0 интервал до ККТ характеризуется безразмерным параметром $r(H) = \frac{H-H_c}{H_c}$. Тогда

$$\Gamma_H(T \to 0, r) = G_r \frac{1}{H-H_c} \tag{2.5}$$

где $G_r \geq 0$ множитель, который связан со следующими критическими индексами [42; p.4, 43; p.10]: корреляционная функция ν, динамический индекс z и размерность критической функции d :

$$G_r = \nu(d - z) \tag{2.6}$$

К примеру, для модели Изинга с поперечным магнитным полем можно получить $G_r = 1$, а для разреженного Бозе газа в фазе с нарушенной симметрией $G_r = \frac{1}{2}$ [43; p.10].

2) Температурная зависимость Γ_H в критическом режиме при низких температурах также расходится,

$$\Gamma_H(T, H \to H_c) \sim \frac{1}{T^x} \tag{2.7}$$

здесь $x = \frac{1}{z\nu}$

3) Было предсказано, что Γ_H меняет знак при ККТ, т.е. параметр Грюнайзена имеет различный знак в разных сторонах фазового перехода.

Эти характеристичные расходимости, а также смена знака параметра Грюнайзена являются отличительным сигналом для определения квантовых критических точек.

Эти свойства Γ_H были экспериментально подтверждены Гегенвартом и др., которые разработали низкочастотное переменное поле для измерения Γ_H при низких температурах [44; p.4] для различных классов магнитных систем от тяжелых фермионных соединений до фрустрированных магнитов [45; p. 3415-3427]. И в действительности они обнаружили универсальность параметра Грюнайзена с $\Gamma_H = G_r(H - H_c)^{-1}$, здесь $G_r \simeq 0.3$ и $\Gamma_H \sim \frac{1}{T^x}$, x изменяется от 1 до 3 с некоторым расхождением от предсказанной теорией Герц-Миллиса $x = 1$ [46; p. 11].

Существует класс материалов, которые в литературе именуются как квантовые магниты с безполевой щелью (zero field gap quantum magnets) [47; p. 563-616, 48; p. 198-204]. В подклассе этих материалов два спина ½ образуют димер, и энергетическая щель между основным синглетным и возбужденным трипленым состояниями перекрывается при магнитном поле выше критического значения H_c, под действием эффекта Зеймана. В результате возникают бозонные квазичастицы, которые именуются в литературе как «триплоны». Триплоны могут конденсироваться при температуре ниже критической T_c. Несмотря на то, что существует много экспериментальных данных о термодинамических свойствах таких систем (см лит [47; p. 563-616, 48; p. 198-204]), измерений МКЭ и связанного с ним параметра Грюнайзена очень мало [47; p. 563-616, 49; p. 27]. С экспериментальной точки зрения сложно изучать свойства Γ_H при сверхнизких температурах. Данная область для этих материалов не изучалась систематически ни теоретически, ни экспериментально, не считая единичные исключения [49; p. 27].

Простой аргумент, свойства $\Gamma_H \sim \frac{1}{T^x}$ для невзаимодействующего Бозе газа можно легко получить, учитывая $C_H(T \to 0) \sim t^{\frac{3}{2}}$ $M \sim M(0) - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}$. Из уравнения (2.4), все материалы принадлежащие невзаимодействующим Бозе газам должны подчиняться закону $\Gamma_H \sim \frac{1}{T}$ т.е. $x = 1$[49; p. 27]. Тем не менее, рассматриваемые нами бозонные квазичастицы – триплоны в магнитной ловушке являются взаимодействующим Бозе газом [47; p. 563-616, 48; p. 198-204, 50; p. 58-68], и учет эффектов взаимодействия на параметр Грюнейзена так же является интересной задачей. В данной главе изучиено свойства Γ_H в таких материалах в рамках вариационной пертурбативной теории.

§ 2.1. Свободная энергия и энтропия триплонного газа

Для $H > H_{c1} \equiv H_c$ термодинамические свойства димеризированного квантового магнита определяются системой триплонных квазичастиц с целым спином, если не учитывать вклад фононов в импульс. При постоянном магнитном поле число триплонов сохраняется и они могут перейти в состояние БЭК [47; p. 563-616, 48; p. 198-204, 50; p. 58-68]. Несмотря на то, что критическую температуру T_c или плотность БЭК триплонов можно получить в рамках Гамильтонианного формализма [51; p. 4, 52; p.16, 53; p. 18], удобно получить термодинамический потенциал в рамках континуальных интегралов, используя вариационную теорию возмущения [33; p. 599-639].

В этом формализме запишем действие

$$A[\psi^\dagger, \psi] = \int_0^\beta d\tau \int d^3r \left\{\psi^\dagger \left[\frac{\partial}{\partial\tau} - \widehat{K} - \mu\right]\psi + \frac{g}{2}(\psi^\dagger\psi)^2\right\} \qquad (2.8)$$

где $\beta = \frac{1}{T}$, μ химический потенциал, который задаётся в виде $\mu = \mu_B g_L(H - H_c)$, здесь g_L – Ланде фактор [47; p. 563-616, 48; p. 198-204, 50; p. 58-68] и μ_B магнетон Бора. $\widehat{K}$ - оператор кинетической энергии определяет исходную дисперсию триплонов ε_k в виде или в представлении оператора связи [54; p.20,

55; p. 3429-3434], или в «релятивистской» форме спектра с щелью [56; p.4]. g – константа отталкивающего контактного триплон-триплонного взаимодействия [57; p.12]. Комплексные поля, $\psi^\dagger$ и ψ удовлетворяют стандартным условиям бозонной периодичности в том смысле, что $\psi(\tau, r)$ и $\psi^\dagger(\tau, r)$ периодичны по τ с периодом β. Интегрирование в координатном пространстве можно провести в первой зоне Бриллюэна [19; p.11] объемом V, который мы устанавливаем здесь $V = 1$. Тогда термодинамический потенциал Ω можно получить из

$$\Omega = -T\ln Z \tag{2.9}$$

где большая каноническая статистическая сумма Z задается континуальным интегралом (path integral)

$$Z = \int D\psi^\dagger D\psi e^{-A[\psi^\dagger,\psi]}. \tag{2.10}$$

Данный континуальный интеграл невозможно точно вычислить, что обусловлено сложностью члена ψ^4 в уравнении (2.8). Здесь будем пользоваться ВПТ [28], которая была разработана в предыдущей главе и в работах [31; p 1742-5468, 58; p.9] для систем с конечным числом частиц. Детали расчетов приведены в опубликованной нами работе [59; p.12], из которой полученные для термодинамического потенциала Ω выражения запишем в следующем виде

$$\begin{aligned}
&\Omega = \Omega_{cl} + \Omega_2 + \Omega_4 \\
&\Omega_{cl} = -\mu_0\rho_0 + \frac{g\rho_0^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_k \left(E_k - \varepsilon_k - \frac{X_1}{2}\right) + T\sum_k \ln\left(1 - e^{-\beta E_k}\right), \\
&\Omega_2 = \frac{1}{2}[A_1(g\rho_0 - X_2 - \mu) + A_2(3g\rho_0 - X_1 - \mu)], \\
&\Omega_4 = \frac{g}{8}(3A_1^2 + 2A_1A_2 + 3A_2^2),
\end{aligned} \tag{2.11}$$

и для (i, j) = (1,2) или (2,1), соответственно,

$$A_i = G_{jj}(\tau, r, \tau', r')|_{r\to r',\tau\to\tau'} = T\sum_{\mathrm{n}}\sum_k \frac{\varepsilon_{\mathrm{k}} + X_i}{\omega_{\mathrm{n}}^2 + E_k^2} = \sum_k \frac{\varepsilon_k + X_i}{E_k} W_k, \tag{2.12}$$

где

$$W_k = \frac{1}{2}\coth\left(\frac{\beta E_k}{2}\right) = \frac{1}{2} + n_B(E_k),$$
$$n_B(x) = \frac{1}{e^x - 1}, \tag{2.13}$$

здесь

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k + X_1}\sqrt{\varepsilon_k + X_2} \tag{2.14}$$

дисперсионное соотношение квазичастиц, где X_1 и X_2 вариационные параметры

$$X_1 = -\mu + g(2\rho_1 + 3\rho_0 + \sigma),$$
$$X_2 = -\mu + g(2\rho_1 + \rho_0 - \sigma). \tag{2.15}$$

Нормальная ρ_1 и аномальная σ плотности находятся из

$$\rho_1 = \int \langle\tilde{\psi}^\dagger\tilde{\psi}\rangle d^3r = \frac{A_2 + A_1}{2},$$
$$\sigma = \int \langle\tilde{\psi}\tilde{\psi}\rangle d^3r = \frac{A_2 - A_1}{2}, \tag{2.16}$$

соответственно. Отметим, что для рассматриваемой здесь системы учет аномальной плотности σ [35] известен как приближение Хартри-Фока-Боголюбова. Данное приближение позволяет получить непрерывную намагниченность вдоль перехода БЭК, которая в случае пренебрежения аномальной плотности имела бы разрыв, что исходит из приближения Хартри-Фока-Попова. Сравнение этих подходов и результаты численных расчетов приведены в [51] и в [52]. Другая модель, обеспечивающая непрерывное поведение параметра порядка, анализировалась в [53].

Из условия стабильности $\frac{d\Omega}{d\rho_0} = 0$ вытекает

$$\mu_0 - g\rho_0 - 2g\rho_1 - g\sigma = 0, \tag{2.16}$$

где ρ_0 – плотность конденсированных частиц, которая в сумме с плотностью неконденсированных частиц дает общую плотность $\rho = \rho_0 + \rho_1$, и μ_0 – множитель Лагранжа. Явные выражения для всех термодинамических

величин можно получить из Ω, приведенного в уравнении (2.11). В частности, дифференцируя Ω по температуре, можно получить энтропию

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_H = -\sum_k \ln[1-\exp(-\beta E_k)] + \beta\sum_k \frac{E_k}{e^{\beta E_k}-1}, \qquad (2.17)$$

а теплоемкость при постоянном магнитном поле находится следующим образом:

$$C_H = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H = \beta^2\sum_k \frac{E_k(E_k - TE'_{k,T})e^{\beta E_k}}{(e^{\beta E_k}-1)^2}. \qquad (2.18)$$

В результате магнитный параметр Грюнайзена выглядит следующим образом:

$$\Gamma_H = -\frac{g\mu_B}{C_H}\left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_T = \frac{\mu_B g\beta^2}{C_H}\sum_k \frac{E_k E'_{k,\mu} e^{\beta E_k}}{(e^{\beta E_k}-1)^2}, \qquad (2.19)$$

где $E'_{k,T} = (dE_k/dT)_H$ и $E'_{k,\mu} = (dE_k/d\mu)_T$, точное выражение которых дается в Приложении В. Здесь и далее суммирование по k подразумевает суммирование по зоне Бриллюэна: $B = \{k: -\pi \le k_\alpha \le \pi\}$. Далее будем обсуждать нормальную ($T \ge T_c$) и конденсированную фазу ($T < T_c$) по отдельности.

§ 2.2. Нормальная фаза, $T \ge T_c$

При температуре выше критической $T \ge T_c$, конденсированная часть, а также аномальная плотность исчезают, т.е., $\rho_0 = \sigma = 0$, и $\rho_1 = \rho$.

Основные уравнения (2.16) имеют те же тривиальные решения, что и

$$X_1 = X_2 = 2g\rho - \mu. \qquad (2.20)$$

Подставляя это выражение в уравнение (2.14) получим

$$E_k(T \ge T_c) \equiv \omega_k = \varepsilon_k - (\mu - 2g\rho) \equiv \varepsilon_k - \mu_{\mathrm{eff}}, \qquad (2.21)$$

определяя эффективный химический потенциал как μ_{eff}. Дифференцируя обе стороны уравнения (2.21) по T и используя уравнение (2.18), получим следующее выражение для теплоёмкости:

$$C_H(T \ge T_c) = \beta^2\sum_k \frac{\omega_k e^{\beta\omega_k}(\omega_k - 2U\rho'_T)}{(e^{\beta\omega_k}-1)^2}. \qquad (2.22)$$

Продольная намагниченность (т.е. компонента параллельная H) определяется плотностью триплонов следующим образом:

$$M = -\frac{\partial\Omega}{\partial H} = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\frac{\partial\mu}{\partial H} = \mu_B g_L \rho, \tag{2.23}$$

В свою очередь плотность является решением нелинейного уравнения

$$\begin{aligned}\rho(T) = \rho_1 = \frac{A_1+A_2}{2} = \sum_k \frac{1}{e^{\beta\omega_k-1}} \\ = \sum_k \frac{1}{e^{(\varepsilon_k-\mu+2g_L\rho)\beta}-1},\end{aligned} \tag{2.24}$$

Отметим, что в этой фазе перпендикулярная (staggered) намагниченность $M_\perp$, которая является отличительной чертой состояния БЭК в димеризированных квантовых системах, исчезает.

Для параметра Грюнайзена из уравнений (2.4) и (2.23) имеем

$$\Gamma_H(T > T_c) = -\frac{g_L\mu_B}{C_H}\rho'_T, \tag{2.25}$$

где $\rho'_T = \frac{d\rho}{dT}$ можно получить из ур. (2.27).

Критическая плотность ρ_c, т.е. плотность квазичастиц при критической температуре T_c , достигается, как только эффективный потенциал μ_{eff} обращается в ноль, и отсюда

$$\rho_c = \rho(T_c) = \frac{\mu}{2g}. \tag{2.26}$$

С этим условием мы можем получить критическую температуру как решение уравнения

$$\frac{\mu}{2g} = \sum_k \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k}{T_c}}-1}, \tag{2.27}$$

Данное уравнение будет ниже использовано для оптимизации входных параметров предложенной модели путем сравнения полученной зависимости $T_c(H)$ с экспериментальными данными.

Нужно отметить, что для системы, состоящей из однородного атомного газа с $\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m}$ интегрирование по импульсу в (2.27) можно вычислить аналитически и получить известное решение [60; p.4]

$$T_c^0 = \frac{2\pi}{m}\left(\frac{\mu}{2g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{2.28}$$

где $\zeta(x)$ – функция Римана.

§ 2.3. Конденсированная фаза, $T < T_c$

В конденсированной фазе, где спонтанно нарушается калибровочная симметрия $U(1)$, нужно применить теорему Гугенгольца-Пайнза [61; p. 489-506], которая связывает нормальную Σ_{n} и аномальную $\Sigma_{\mathrm{a}n}$ собственные энергии:

$$\Sigma_{\mathrm{n}} - \Sigma_{\mathrm{a}n} = \mu. \tag{2.29}$$

Из теоремы Гугенгольца-Пайнза вытекает, что энергия возбуждения должна быть без щелевой,

$$E_k(T < T_c) \equiv E_k = \sqrt{\varepsilon_k + X_1}\sqrt{\varepsilon_k} = ck + O(k^2), \tag{2.30}$$

где $c = \sqrt{\frac{\Delta}{m}}$ скорость (the first sound) фононов для частиц с эффективной массой m и $\Delta = \frac{X_1}{2}$. Для основного уравнения имеем

$$\Delta = \mu + 2g(\sigma - \rho_1), \tag{2.31}$$

здесь (происхождение члена ½ в (2.33) см. в [62; p. 27-62])

$$\sigma = -\Delta \sum_k \frac{W_k}{E_k}, \tag{2.32}$$

$$\rho_1 = \sum_k \left[\frac{W_k(\varepsilon_k + \Delta)}{E_k} - \frac{1}{2}\right], \tag{2.33}$$

и

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k}\sqrt{\varepsilon_k + 2\Delta}. \tag{2.34}$$

Для теплоемкости имеем

$$C_H(T < T_c) = \beta^2 \sum_k \frac{e^{\beta E_k}\left(E_k^2 - T\varepsilon_k \Delta_T'\right)}{(e^{\beta E_k} - 1)^2}, \tag{2.35}$$

где Δ_T' определено в Приложении В.

Для практических расчетов ур. (2.31) можно переписать как

$$Z = 1 + \tilde{\sigma}(Z) - \tilde{\rho}_1(Z), \tag{2.36}$$

где $Z = \frac{\Delta}{\mu}$, $\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{\rho_c}$, и $\tilde{\rho}_1 = \frac{\rho_1}{\rho_c}$. После решения уравнения (2.36) продольная и поперечная намагниченности M и $M_\perp$ в конденсированной фазе, соответственно, становятся

$$\begin{aligned} M(T \le T_c) &= g_L \mu_B \rho = g_L \mu_B \rho_c (Z + 1), \\ M_\perp^2(T \le T_c) &= \frac{1}{2} g_L^2 \mu_B^2 \rho_0 = \frac{1}{2} g_L^2 \mu_B^2 \rho_c (2Z - \tilde{\sigma}), \end{aligned} \tag{2.37}$$

где мы использовали

$$\rho = \frac{\Delta + \mu}{2g}, \qquad \rho_0 = \frac{\Delta}{g} - \sigma. \tag{2.38}$$

Для параметра Грюнайзена учетом уравнений (2.37) и (2.38) получим

$$\Gamma_H(T \le T_c) = -\frac{g_L \mu_B \rho_T'}{C_H} = -\frac{g_L \mu_B \Delta_T'}{2g C_H}, \tag{2.39}$$

где C_H дано в ур. (2.35).

§ 2.4. Низкотемпературное расширение

В этом разделе мы приведем аналитические выражения в пределе $T \to 0$. Проведем низкотемпературное разложение по безразмерному параметру $Tm = \tilde{T}$. Фактически, для большинства квантовых магнитов со спиновой щелью эффективная масса m мала, например $m \approx 0.02 \ \ K^{-1}$ для $TlCuCl_3$ [55, 63], так что ряд по малому параметру $\tilde{T}$ должен быстро сходиться. Используя Дебая-подобное приближение [29; p. 686–699] интегрирование по импульсу в зоне Бриллюэна заменим сферой Дебая, радиус которой k_D ($k_D = Q_0\pi$, $Q_0 = (6/\pi)^{\frac{1}{3}} \approx 1.24$ - безразмерный радиус Дебая), а простую симметричную трехмерную чистую дисперсию заменим на

$$\varepsilon_k = J_0\left(3 - \cos k_x - \cos k_y - \cos k_z\right), \tag{2.40}$$

которое часто используется в качестве модельного дисперсионного соотношения в квантовых магнитах со спиновой щелью [48; p. 198-204].

Для низкотемпературного предела большинство интегралов можно явно вычислить в терминах логарифмических и полилогарифмических функций $\mathrm{L}i_s(z)$ с аргументом $z = \exp(-Q_0 c\pi\beta)$, т.е. как функцию $F(T,z)$ [64; p.678 - 694]. Поскольку z быстро уменьшается с увеличением β, мы можем разложить $F(T,z)$ по степеням z, чтобы извлечь главный член. Более подробная информация о расчетах приведена в опубликованной нашей работе [59; p.12]. Окончательный результат для энтропии имеет вид

$$S = \frac{2\pi^2\tilde{T}^3}{45\gamma^3} + O\left(\tilde{T}^5\right) \tag{2.41}$$

здесь $\gamma = cm = \frac{1}{\sqrt{2}\xi}$, ξ корреляционная длина (healing length) [65; p. 571] и $\tilde{T} \equiv Tm$. Производная от (2.41) по T дает теплоемкость

$$C_H = T\frac{dS}{dT} \approx \frac{2\pi^2\tilde{T}^3}{15\gamma^3} = \frac{2\pi^2 T^3}{15c^3}, \tag{2.42}$$

что является общим для взаимодействующих БЭК-систем с момента его измерения в сверхтекучем гелие [66; p. 601]. Отметим, что для идеального Бозе-газа, т.е. для системы невзаимодействующих частиц, дисперсия не линейная, а квадратичная, и $C_H \sim T^{\frac{3}{2}}$ [67; p. 22].

Выражение для параметра Грюнайзена примет вид

$$\Gamma_H = \frac{15 g_L \mu_B \alpha_1 \gamma^2}{4\pi^2 g}\frac{1}{\tilde{T}^2} + \frac{15 g_L \mu_B \left(2\gamma\alpha_3 - \alpha_1^2\right)}{8 g \pi^2 \gamma} + O\left(\tilde{T}^2\right). \tag{2.43}$$

здесь

$$\alpha_1 = \frac{2}{3}\frac{g\pi\gamma}{gQ_0\gamma + \pi c}, \tag{2.44}$$

$$\alpha_3 = \frac{g\pi^2}{45\gamma^3}\frac{\left(6gQ_0\pi\gamma + 6\pi^2 c + 5g\gamma^2\right)}{\left(gQ_0\gamma + \pi c\right)^2}. \tag{2.45}$$

Для низкотемпературных разложений намагниченностей имеем [59; p.12]:

$$M = g_L \mu_B \rho(T) = M(0) - \frac{g_L \mu_B \alpha_1}{4 g \gamma m}\tilde{T}^2 + O\left(\tilde{T}^4\right) \tag{2.46}$$

и

$$M_{\perp}^{2} = M_{\perp}^{2}(0) - \frac{g_L^2 \mu_B^2 c(3\alpha_1 + Um)}{24 g \gamma^2} \tilde{T}^2 + O(\tilde{T}^4). \qquad (2.47)$$

В пределе низких температур обе величины изменяются как $-T^2$, тогда как для невзаимодействующего конденсата Бозе-Эйнштейна мы имеем $M - M(0) \sim -T^{\frac{3}{2}}$.

§ 2.5. Свойства вблизи T_c

Поведение термодинамических величин в области температур $T \to T_c \pm 0$ имеет решающее значение для определения природы фазового перехода. Согласно классификации Эренфеста, разрыв во второй производной от Ω в точке T_c, с непрерывной первой производной указывает на то, что данный переход является переходом второго порядка [68; p. 506]. Далее рассмотрим $C_H^{(\pm)} \equiv C_H(T_c \pm 0)$, $\Gamma_H \equiv \Gamma_H(T_c \pm 0)$ и $S^{(\pm)} \equiv S^{(\pm)}(T_c \pm 0)$.

$$\Delta C_H = C_H^{(-)} - C_H^{(+)} = -\beta_c \sum_k \frac{\varepsilon_k \Delta_T' e^{\beta_c \varepsilon_k}}{(e^{\beta_c \varepsilon_k} - 1)^2} > 0, \qquad (2.48)$$

$$\Delta \Gamma_H = \Gamma_H^{(-)} — \Gamma_H^{(+)} = -\frac{g_L \mu_B \Delta_T'}{2 g C_H^{(-)}} > 0, \qquad (2.49)$$

где Δ_T' и $C_H^{(-)}$ приведены в Приложении. Из (2.48) и (2.49) видно, что не только C_H, но и параметр Грюнайзена имеет конечный скачок вблизи критической температуры, и, следовательно, данный переход – фазовый переход второго порядка по классификации Эренфеста.

§ 2.6. Обсуждение

§ 2.6.1. Изменение знака Γ_H при T_c

Выше было показано, что $\Gamma_H^{(+)} = 0$ при критической температуре T_c, а также, имея $\frac{d\rho}{dT} > 0$ и $\Gamma_H(T) < 0$ для $T > T_c$ видно, что $\Gamma_H(T)$ меняет знак в

этой области, приближаясь к критической температуре снизу, где $\frac{d\rho}{dT} < 0$, $\Gamma_H(T) > 0$ для $T < T_c$. Эта смена знака в $\Gamma_H(T)$ была предсказана Гарстом и др. [43; p.10], и предполагалось, что она универсальна для систем с магнитно-управляемой критической точкой, которая также справедлива при H_c в триплонных системах, которые мы рассматриваем.

§ 2.6.2 Расходимость Γ_H вблизи перехода

Переписывая низкотемпературное разложение Γ_H, которое задано в (2.43) в пределе $r = \frac{H-H_c}{H_c} \to 0$ в компактном виде (см. Приложение С в [59]), получим

$$\Gamma_H \approx \frac{G_t(H-H_c)}{T^2} + \frac{G_r}{H-H_c}, \tag{2.50}$$

где

$$G_t = \frac{5g_L^2\mu_B^2}{\pi^2(1+4a_sQ_0)^2}G_r \tag{2.51}$$

и

$$G_r = \frac{2}{Q_0\pi} + \frac{2}{gmQ_0^2} \simeq 0.51 + \frac{0.1}{a_s} \tag{2.52}$$

где члены более высокого порядка $O(\tilde{T}^2)$ и $O(r)$, соответственно. Здесь мы использовали соотношение

$$g = \frac{4\pi a_s}{m}, \tag{2.53}$$

где a_s – длина s-волнового рассеяния. Первый член в формуле (2.50) доминирует при фиксированном магнитном поле $H > H_c$ для температур $T \ll \eta(H-H_c)$, с $\eta \approx \frac{0.48g}{1+5a_s}$ (в единицах К/Тл), в то время как второй член доминирует в противоположном пределе, когда H приближается к H_c сверху при фиксированной низкой температуре T.

Расхождение $\Gamma_H \sim \frac{1}{T^2}$ при достаточно низких температурах для квантовых магнитов со спиновой щелью является одним из наших главных результатов. Отметим, что классификация ряда магнитных систем от соединений с тяжелыми фермионами до фрустрированных магнитов, сделанная Гегенвартом и др. [45; p. 3415-3427] показывает, что большинство из этих материалов действительно демонстрируют сходное поведение, за некоторыми исключениями, такими как в [49; p.27]. Чувствительность критических параметров к размерности и другим свойствам системы делает их принадлежностью к разным классам универсальности. Фазовая граница между конденсированным и неконденсированным состояниями в квантовых магнетиках со спиновой щелью может быть выражена степенным законом вида $T_c \propto (H - H_c)^{\phi(T_c)}$ с скейлинговым анализом квантовых фазовых переходов, предсказывая $1/\phi(T_c \to 0) = z\nu$ [69; p.16]. Зависимость ϕ от T_c может возникать из-за непараболической затравочной дисперсии триплонов [55 p. 3429-3434, 56; p.4] и учитывается в нашем расчете по формуле (2.35). Эта непараболичность, однако, не меняет качественных особенностей термодинамических величин.

Зависимость $\Gamma_H \simeq G_r(H - H_c)^{-1}$, которая установлена в работах [43; p.10, 45; p.3415-3427], очевидно, также реализуется в системах, которые рассматриваются в настоящей работе. Отметим, однако, что это соотношение не может быть непосредственно применено к непрерывным системам, таким как атомные газы, где $Q_0 \to \infty$. В этом случае процедуры перенормировки могут привести к различным зависимостям.

Обсудим, является ли значение безразмерного параметра G_r, приведенное в (2.52), универсальным для триплонных систем со спиновой щелью. Для начала отметим, что два разных квантовых магнита принадлежат к одному классу, т.е. имеют одинаковый G_r, если у них одинаковые a_s. Во-вторых, G_r приближается к универсальному значению $G_r = 0.5$, предсказанному Гарстом и др. [43; p.10] в пределе унитарности (in the unitarity

limit): $1/a_s \to 0$. Однако следует отметить, что в реальных системах из-за возможной анизотропии [53; p.18] энергетический спектр может иметь щель и формула (2.34) видоизменяется, следовательно, длинноволновое приближение неприменимо.

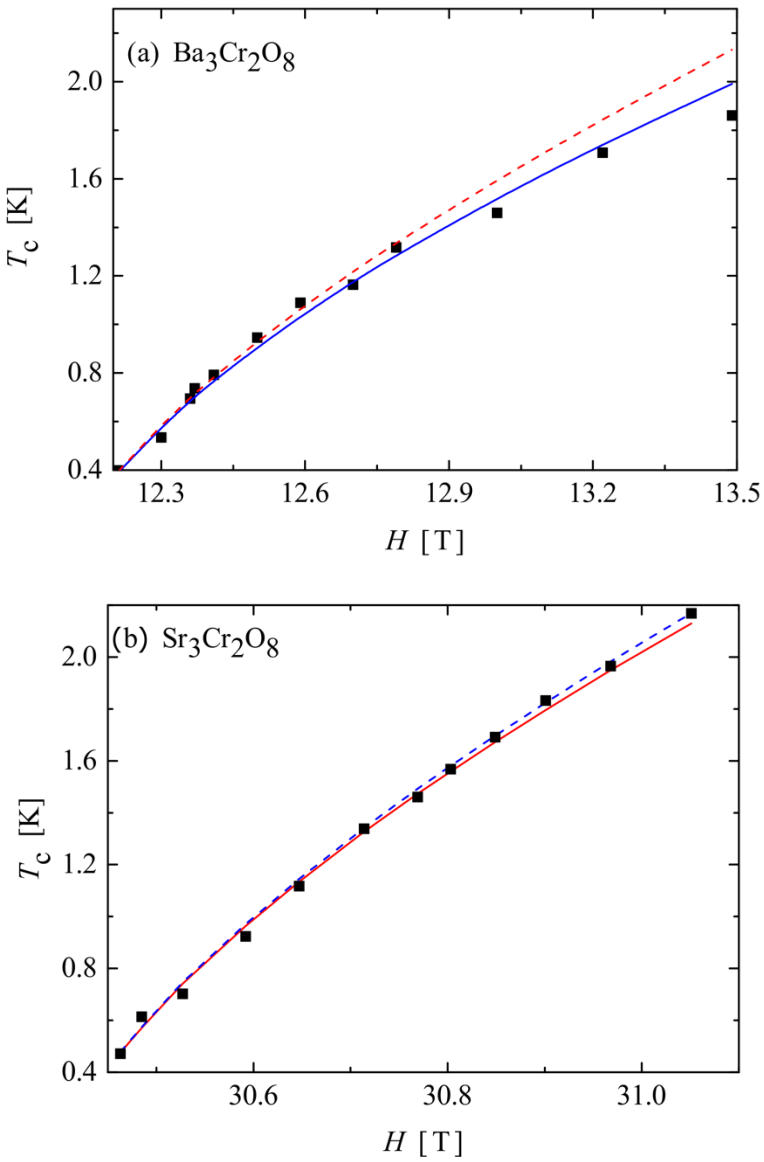
§ 2.7. Численные расчеты

В предыдущем разделе мы получили общие выражения для Γ_H, S, C_H, M и $M_\perp^2$, а также разработали предельные случаи $T \to 0$ и $T \to T_c$. Полученные результаты будем использовать для численной оценки данных величин во всем диапазоне температур. Ограничимся только Γ_H и S. Для этого нужно уточнить набор параметров g_L, H_c, g и J_0, которые получены из экспериментальных работ для материалов $Ba_3Cr_2O_8$, $Sr_3Cr_2O_8$ и $TlCuCl_3$ [50; p. 58-68, 55; p. 3429-3434, 70; p. 4, 72; p.34, 73; p. 1352-1354] (см. Таблицу 2.1). Из входных параметров g_L, H_c и g получаем J_0 путем подгонки экспериментальной фазовой границы $T_c(H)$ к уравнению (2.27). Δ_{st} соответствует шкале энергии H_c в Кельвинах, а G_r и a_s взяты из формул (2.52) и (2.53)

Таблица 2.1

Параметры материала, используемые для численных расчетов

	g_L	$\boldsymbol{H_c}$ [T]	$\boldsymbol{J_0}$ [K]	$\boldsymbol{g}$ [K]	$\boldsymbol{\Delta_{st}}$ [K]	$\boldsymbol{G_r}$	$\boldsymbol{a_s}$
$Ba_3Cr_2O_8$	1.95	12.10	5.045	20	15.85	0.84	0.315
$Sr_3Cr_2O_8$	1.95	30.40	15.86	51.2	39.8	0.9	0.257
$TlCuCl_3$	2.06	5.10	50.0	315	7.1	0.72	0.5



Сплошные линии из уравнения (2.27); пунктирные линии соответствуют степени $\phi = \frac{2}{3}$ из уравнения (2.28); экспериментальные данные получены из работ [71; p.11] (a) и [70; p.4, 72; p.34] (b)

Рис. 2.1. Зависимость T_c от внешнего магнитного поля H для $Ba_3Cr_2O_8$ (a) и $Sr_3Cr_2O_8$ (b)

На Рис.2.1 показана фазовая диаграмма $T_c(H)$ для $Ba_3Cr_2O_8$, $Sr_3Cr_2O_8$ полученная из (2.30), а также экспериментальные данные из [70; p.4, 71; p.11, 72; p.34]. Отклонение экспериментальных точек от зависимости $\phi = 2/3$ на Рис. 2.1(a) объясняется непараболической начальной энергией при малых J_0.

Для наших расчетов зафиксировав параметры g_L, H_c, и g мы получили значение для J_0 с помощью уравнения (2.27).

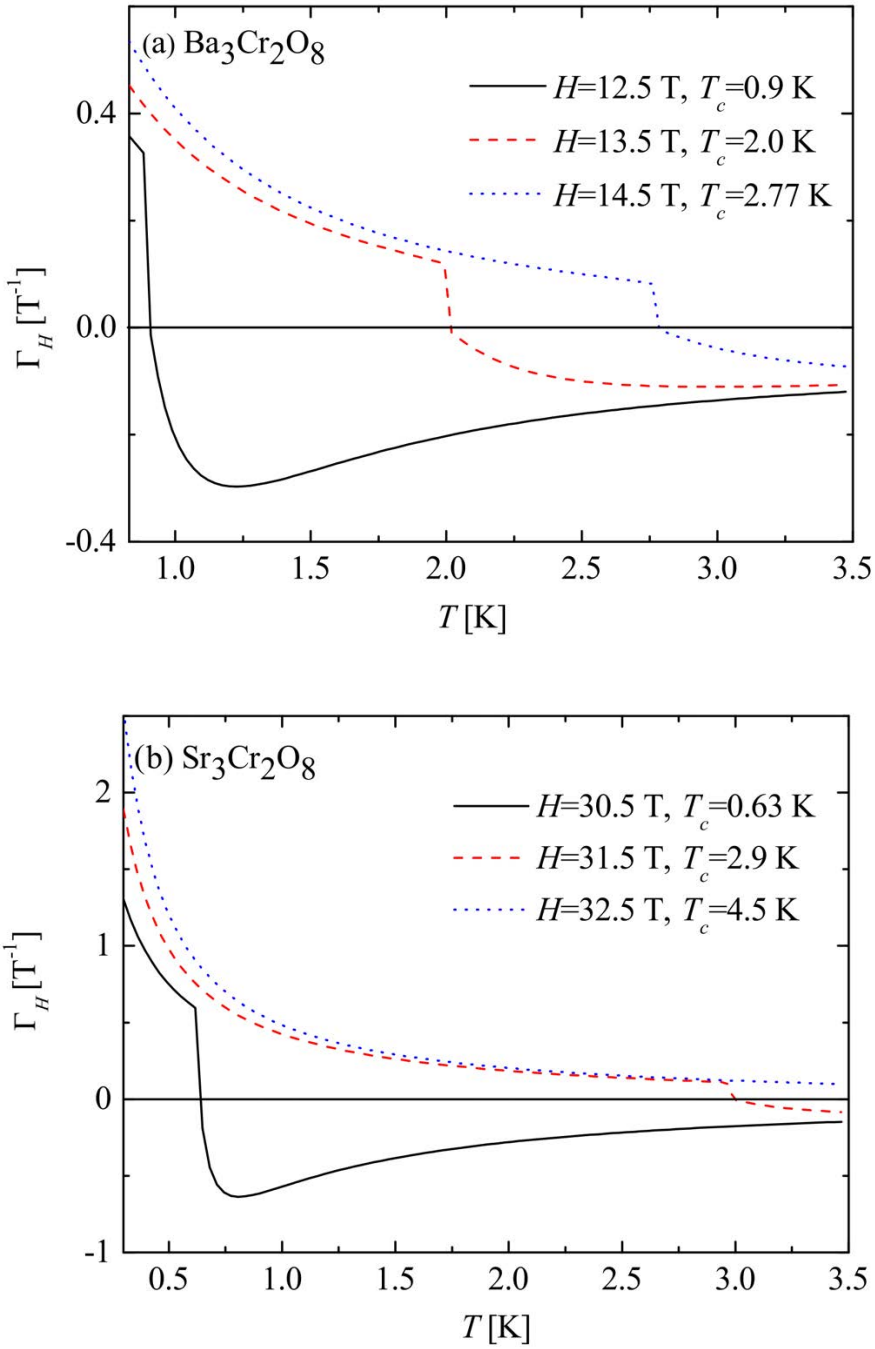
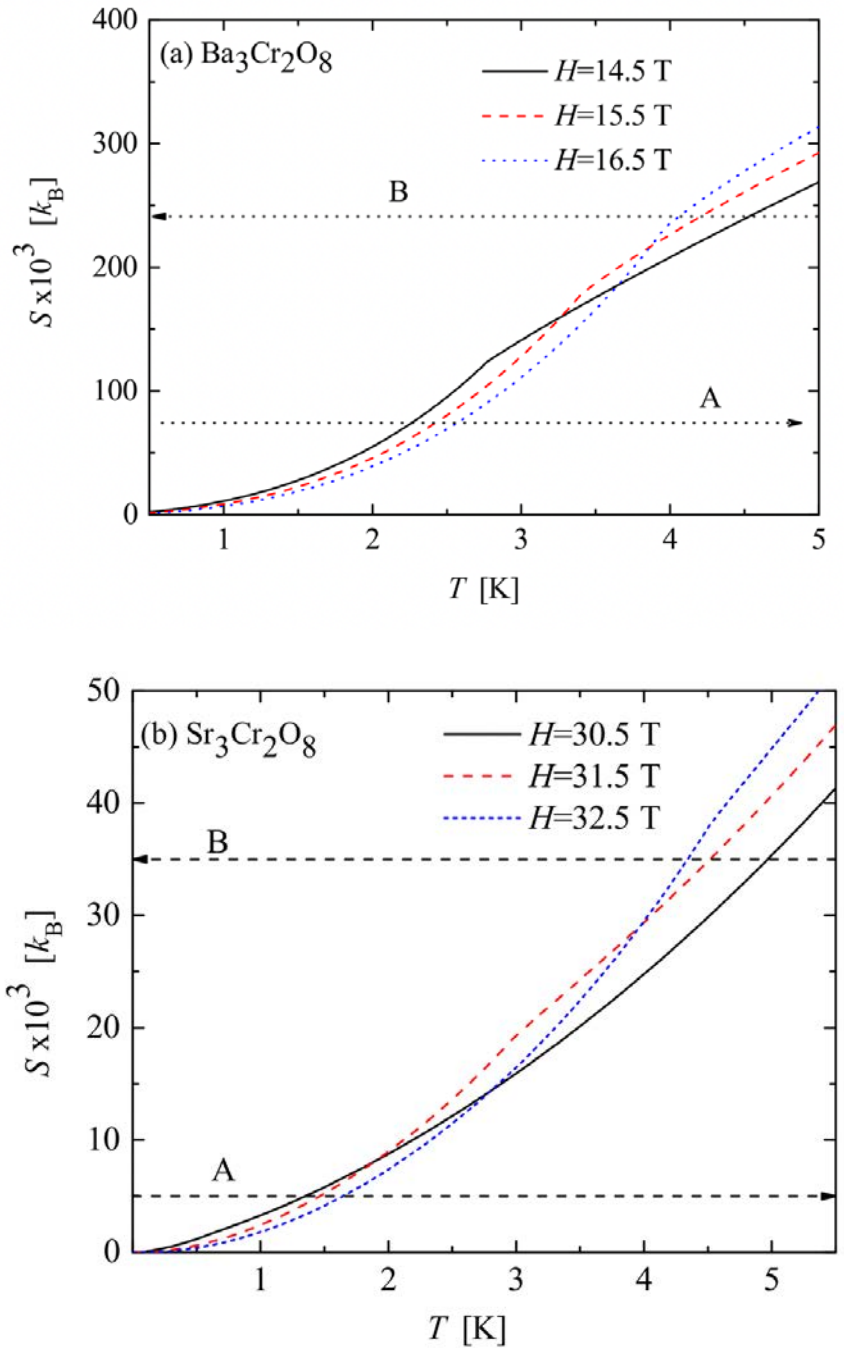


Рис. 2.2. Зависимость параметра Грюнайзена от температуры для $Ba_3Cr_2O_8$ (a) и $Sr_3Cr_2O_8$ (b) при различных магнитных полях. При соответствующих T_c, $\Gamma_H(T)$ демонстрирует разрыв и меняет знак

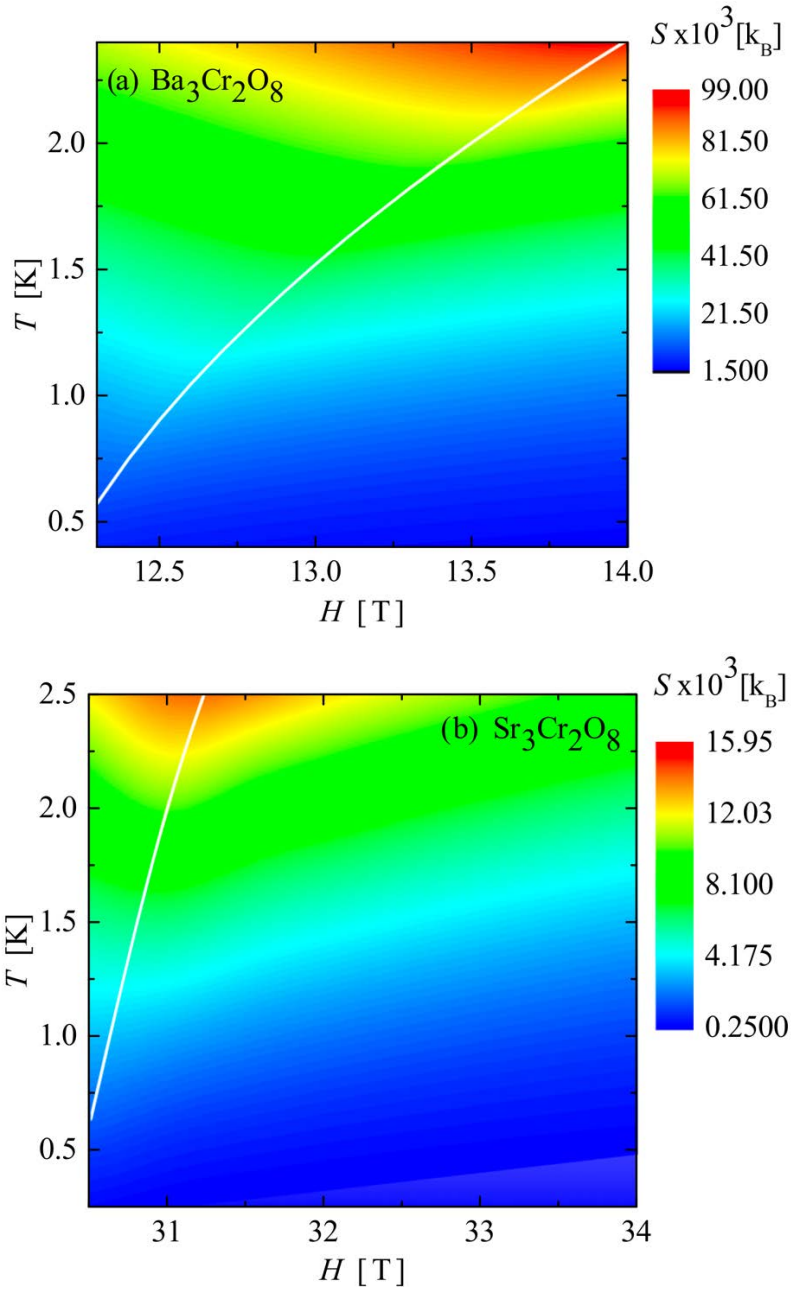


Линия, отмеченная буквой A, показывает путь, вдоль которого адиабатическое увеличение магнитного поля вызывает повышение температуры. Линия, отмеченная буквой B, показывает путь, по которому та же процедура приводит к снижению температуры

Рис. 2.3. Зависимость энтропии S от температуры T для $Ba_3Cr_2O_8$ и $Sr_3Cr_2O_8$ для различных значений магнитного поля H; как и ожидалось, $S(T)$ меняет свой наклон при T_c

Соответствующие вычисления для $\Gamma_H(T)$ с использованием формул (2.25) и (2.39) показаны на рис.2.2 и для $S(T)$ на рис.2.3. На рис.2.4 показана серия изоэнтропических линий с $S(T)$ для $Ba_3Cr_2O_8$ и $Sr_3Cr_2O_8$.

Фазовый переход хорошо виден на всех этих рисунках. Параметр Грюнайзена $\Gamma_H(T)$ имеет разрыв в соответствии с формулой (2.70) и меняет свой знак при $T_c(H)$, в то время как зависимость энтропии от температуры $S(T)$ демонстрирует изменение наклона, тем самым отражая разрыв теплоемкости C_H согласно уравнению (2.49), а также приводит к тому, что с адиабатическим увеличением магнитного поля выше критической температуры фазового перехода температура образца повышается, а ниже критической температуры та же процедура приводит к снижению температуры.



Каждый цвет соответствует постоянному значению энтропии. Белыми линиями показаны фазовые границы, отделяющие конденсированную (правая сторона) от неконденсированной фаз (левая сторона) соответственно

Рис. 2.4. Изоэнтропные линии магнитных систем $Ba_3Cr_2O_8$ (а) и $Sr_3Cr_2O_8$ (б) в плоскости (H, T)

Изоэнтропические линии, показанные на рис.2.4, имеют минимум при $H_c(T)$, что легко понять, если вспомнить, что $\Gamma_H = T^{-1}(\partial T/\partial H)_S$ обращается в нуль при фазовом переходе. В идеально адиабатическом эксперименте

температура идеально следовала бы этим линиям при изменении внешнего магнитного поля, достигая своей самой низкой температуры при H_c . Диаграмма, показанная на рис.2.4 для $Sr_3Cr_2O_8$, выгодно отличается от диаграммы, измеренной Акзел и др. [70; p.4]. Отметим, что в большинстве обычных магнитокалорических экспериментов образец подвергается контролируемой тепловой обработке, так что соответствующие кривые $T(H)$ становятся зависимыми от времени [47; p. 563-616, 70; p.4, 74; p.7] и меняют свою форму по сравнению с отображаемыми на рис.2.4.

§ 2.8. Размерность

Разрывы в C_H и Γ_H и изменение знака в Γ_H при T_c , могут быть непосредственно измерены экспериментально. Что касается изучения температурной зависимости этих величин в низкотемпературном пределе, тут возникает проблема, заключающаяся в измерении C_H магнитной подсистемы. Экспериментально измеряемая теплоемкость включает в себя вклады кристаллической решетки и магнитную C_H , и оба имеют одинаковую температурную зависимость $C_H \sim T^3$. Тогда магнитный вклад должен быть извлечен из общего сигнала. Данную процедуру можно осуществить, например, путем серий измерений при различных магнитных полях (включая и при $H = 0$ для C_H) при условии, что теплоемкость решетки C_{lat} не полностью доминирует над C_H. Для N_{at} атомов в кристаллической решетке в низкотемпературном пределе имеем результат Дебая

$$C_{lat} \approx N_{\mathrm{at}} \frac{12\pi^4 T^3}{5\Theta_D^3}, \tag{2.54}$$

с температурой Дебая для решетки Θ_D. Поскольку теплоемкость магнитной подсистемы пропорциональна числу спин-димеров $N_{\mathrm{dim}} < N_{\mathrm{at}}$, отношение двух вкладов равно

$$\frac{C_H}{C_{lat}} = \frac{1}{18\pi^2} \frac{N_{\mathrm{dim}}}{N_{\mathrm{at}}} \frac{\Theta_D^3}{c^3}, \tag{2.55}$$

где c – скорость звука из уравнения (2.30) измеряется в Кельвинах. Из-за очень малого множителя $11/8\pi^2$ это отношение кажется пренебрежимо малым. Однако, проводя эксперимент достаточно близко к переходу, можно заставить $c \ll T_D$, и два вклада могут стать разделимыми. Соотношение (2.55) не влияет на качественную зависимость от поля $\Gamma_H \sim (H - H_c)^{-1}$ из (2.35) и намагниченность (2.43) и (2.46), но для измерения значения Γ_H нужно делать поправку с учетом C_{lat} в уравнении (2.3). Для оценки данной поправки приведем пример для материала $Sr_3Cr_2O_8$ J_0 = 15 K и $g_L \approx 2$, приблизительно $c \approx 4.5$ K для $H - H_c = 1$ T, и $\frac{N_{\mathrm{dim}}}{N_{\mathrm{at}}} = \frac{1}{13}$, $\Theta_D \approx 120$ K [75; p.8], в итоге получим $\frac{C_H}{C_{\mathrm{lat}}} \approx 8$.

Выводы по второй главе

Применено вариационное пертурбативное приближение для димеризованных квантовых магнитов со спиновой щелью, которые переходят в БЭК состояние магнитных квазичастиц (триплонов).

Вычислены свободная энергию Ω и связанные с ней энтропия S, теплоемкость C_H, намагниченность M, а также магнитный параметр Грюнайзена Γ_H и получены явные выражения для этих величин в пределах $T \to T_c$ и $T \to 0$ соответственно. Показано, что вблизи критической температуры и теплоемкость, и параметр Грюнайзена имеют разрыв, а Γ_H меняет знак. Такое поведение ожидается для систем с квантовой критической точкой, управляемой магнитным полем [43; p.10].

Найдена в пределах низких температур вблизи ККТ зависимость $C_H \sim T^3$, что является универсальным для взаимодействующих Бозе-конденсированных систем. В этой точке параметр Грюнайзена как функция температуры расходится по закону $\Gamma_H \sim T^{-2}$. Вблизи критического магнитного поля $H \to H_c$ найдена зависимость $\Gamma_H \sim G_r (H - H_c)^{-1}$, что является общим для множества магнитных систем [45; p. 3415-3427]. Параметр G_r достигает своего

универсального значения $G_r \to 0.5$ в пределе унитарности, при условии, что длина s-волнового рассеяния намного превышает среднюю постоянную решетки $a_s \gg \bar{a}$.

ГЛАВА III. КРИТЕРИЙ УСТОЙЧИВОСТИ ОДНОРОДНОЙ БИНАРНОЙ БОЗЕ-СМЕСИ С СИЛЬНЫМ ОТТАЛКИВАЮЩИМ МЕЖКОМПОНЕНТНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Интерес к исследованию смеси двухкомпонентных Бозе-газов возник с момента ее экспериментальной реализации почти 25 лет назад в JILA [76; p. 586-589, 77; p.1539-1544]. Экспериментально можно настраивать длину межкомпонентного рассеяния (a_{ab}) с помощью Фешбах резонанса, это даёт возможность демонстрировать богатую физику двухкомпонентных квантовых жидкостей, что невозможно осуществить в однокомпонентной жидкости. Теоретические [78; p.11, 79; p. 5718-5734] и экспериментальные исследования [80; p.4, 81; p.5, 82; p.16, 83; p.301-304, 84; p.13] показали, что характер этих свойств сильно зависит от знака межкомпонентной константы связи s-волнового контактного взаимодействия g_{ab}: при $g_{ab} < 0$ ($g_{aa} > 0$, $g_{bb} > 0$) могут возникать капли (droplet) квантовой жидкости [78; p.11, 83; p.301-304], а при $g_{ab} > 0$ может происходить фазовый переход между смешиваемыми и несмешиваемыми состояниями. В некотором смысле ситуация аналогична физике двух тел: когда межчастичное взаимодействие отрицательно, в основном, интересуются свойствами связанных состояний, в противном случае изучаются углы рассеяния и сечения.

В данной диссертационной работе мы сосредоточимся только на случае отталкивающих взаимодействий ($g_{aa} > 0$, $g_{bb} > 0$, $g_{ab} > 0$) и изучим свойства двухкомпонентной однородной Бозе-системы, такие как устойчивость, смешиваемость и возможный фазовый переход при конечной температуре в равновесном состоянии.

Хотя недавние эксперименты [82; p.16] четко не выявляют явных признаков смешивающегося-несмешивающегося перехода, существование перехода с пространственным разделением, в том числе с нулевой температурой, было теоретически доказано [85; p.6, 86; p. 3806-3811, 87; p.14, 88; p.5]. В частности, Тиммерман [79; p. 5718-5734] предложил различать два

типа пространственного разделения: (1) потенциальное разделение, вызываемое внешними потенциалами ловушки так же, как гравитация может разделять жидкости разного удельного веса; 2) фазовое расслоение, сохраняющееся в отсутствие внешних потенциалов и аналогичное разделению несмешивающихся жидкостей, таких как нефть и вода.

В настоящей работе мы обсуждаем систему без ловушки и изучаем только фазовое расслоение, которое происходит после пересечения границы неустойчивости. Показано, что возникновение неустойчивости в системе снижает ее свободную энергию за счет сегрегации компонентов в фазово-разделенное состояние.

Причина этой неустойчивости заключается в следующем. В отличие от однокомпонентной Бозе-системы, бинарная смесь бозонов с БЭК имеет две ветви коллективных возбуждений, ω_d и ω_s , соответствующие модам плотности c_d и псевдоспинового звука c_s , соответственно. Первая описывает колебания обоих компонентов в фазе, а вторая отвечает за противофазные колебания компонентов относительно друг друга. При некоторых значениях физических параметров (g_{ab}, T) для одной из мод $c_s^2 < 0$, так что эта мода первоначально растет со скоростью $|\omega_s|$, что является показателем неустойчивости [79; p. 5718-5734]. В частности, при нулевой температуре это может произойти, когда константа межкомпонентного взаимодействия g_{ab} превышает критическое значение $g_c = \sqrt{g_{aa}g_{bb}}$ т.е. $g_{ab} > g_c$. В настоящее время этот критерий настолько широко распространен, что некоторые авторы даже рассматривают его как определение смешиваемого ($g_{ab} < \sqrt{g_{aa}g_{bb}}$) или несмешиваемого ($g_{ab} > \sqrt{g_{aa}g_{bb}}$) состояний [89; p. 7], несмотря на то, что он получен в довольно грубом приближении Боголюбова, справедливом только для сильно разреженных газов, с газовым параметром $\gamma = \rho a^3 \sim 10^{-5}$ [33; p. 599-639].

Что касается работ, где рассматривались некоторые поправки к боголюбовским или квазиклассическим приближениям [86; p.3806-3811, 87;

p.14, 88; p.5, 89; p.7], то они имеют в основном два недостатка: не выполняется ТГП [61; p.489-506, 90; p.5] для многокомпонентных БЭК; и (или) пренебрегают аномальными плотностями, особенно аномальной плотностью межкомпонентных пар. В результате большинство теоретических приближений не являются самосогласованными и справедливы только для $\gamma \ll 1$. Принципиальная необходимость учета аномальных плотностей для Бозе-конденсированной фазы подчеркивалась также в работах [58; p.9, 91; p. p. 461-499, 92; p.12, 93; p.23, 94; p.23].

Взаимодействия атомов в газах моделируются контактными потенциалами, выраженными через эффективные длины рассеяния, которые можно увеличивать с помощью техники резонанса Фешбаха, так что параметр газа может стать достаточно большим [80; p.4, 95; p.16, 96; p.4]. Целью настоящей работы является разработка приближения на основе среднего поля, без каких-либо ограничений на значение $\gamma > 0$, с учетом ТГП, полученной для многокомпонентных БЭК в работах [90; p.5, 97; p.1070-1080], а также аномальных плотностей σ_a, σ_b, и σ_{ab}.

С этой целью мы исходим из стандартного гамильтониана бинарной Бозе-смеси с контактными взаимодействиями. Воспользуемся вариационным методом, аналогичным использованному в работах [93; p.23, 98; p.7, 99; p.2916-2937, 100; p.1589-1607], что является вариантом общего подхода, называемого оптимизированной теорией возмущений [101; p.141-209, 102; p.829-878]. В данном случае этот подход эквивалентен приближению Хартри-Фока-Боголюбова (ХФБ) [103; p.460-513].

Известно, что использование приближения ХФБ имеет одну проблему, которая называется в литературе дилеммой Хоэнберга-Мартина [104; p.291-359]. Ее можно кратко изложить следующим образом: в теории, основанной на стандартном большом каноническом ансамбле со спонтанным нарушением симметрии, в зависимости от способа расчета, получается либо щель в спектре коллективных возбуждений, либо локальные законы сохранения вместе с общими термодинамическими соотношениями становятся неуместными.

Напомним, что спектр возбуждения, согласно ТГП, должен быть бесщелевым. Самосогласованный способ решения этой дилеммы был предложен в работе [91; p.461-499] путем введения дополнительных множителей Лагранжа для каждой компоненты, а именно μ_{0a}, μ_{1a}, μ_{0b} и μ_{1b}. Этот выбор напрямую связан с учетом аномальной плотности. Так, при пренебрежении аномальной плотностью μ_0 равен μ_1, а при учете аномальной плотности μ_0 и μ_1 можно зафиксировать из условий минимизации термодинамического потенциала по конденсированным фракциям и из условия обобщенной ТГП [103; p.460-513].

Поскольку в данном подходе нет ограничений на величину газового параметра, наш критерий устойчивости бинарной Бозе-системы будет более общим, чем простое неравенство $g_{ab} \leq \sqrt{g_{aa} g_{bb}}$. В частности, для симметричной системы с равными массами ($m_a = m_b$) и константами связи ($g_{aa} = g_{bb} = g$, $g_{ab} = \overline{g}_{ab} g$) при нулевой температуре нами получена фазовая диаграмма на плоскости ($\overline{g}_{ab}$, γ), которая показывает, что при умеренных значениях γ, ($\gamma \approx 0.001$) система может оставаться стабильной даже при $\overline{g}_{ab} = 1.1$, в отличие от предсказаний предыдущих исследований. Очевидно, что при конечных температурах этот критерий приводит к уравнению с тремя параметрами ($\overline{g}_{ab}$, γ, T), что дает возможность получить трехмерную фазовую диаграмму Бозе-конденсированной двухкомпонентной однородной смеси.

§ 3.1. Термодинамический потенциал и основные уравнения

Лагранжиан для двухкомпонентных комплексных скалярных полей ψ и ϕ с контактными константами взаимодействия g_a и g_b и межкомпонентным взаимодействием g_{ab} задается в виде

$$L = \psi^\dagger (i\,\partial_t + \frac{\vec{\nabla}^2}{2m_a} + \mu_a)\psi - \frac{g_a}{2}(\psi^\dagger \psi)^2 + \phi^\dagger (i\,\partial_t + \frac{\vec{\nabla}^2}{2m_b} + \mu_b)\phi - \frac{g_b}{2}(\phi^\dagger \phi)^2 - g_{ab}(\psi^\dagger \psi)(\phi^\dagger \phi) \tag{3.1}$$

где соответствующие химические потенциалы представлены $\mu_{a,b}$, а массы - $m_{a,b}$. В терминах соответствующих длин рассеяния s-волн a_s константы взаимодействия могут быть записаны как $g_{a,b} = 4\pi a_{a,b}/m_{a,b}$, а межкомпонентное взаимодействие $g_{ab} = 2\pi a_{ab}/m_{ab}$, где $m_{ab} = m_a m_b/(m_a + m_b)$ – приведенная масса. Здесь и далее примем $\hbar = 1$, $k_B = 1$.

Отметим, что в данной работе будут рассматриваться только отталкивающие взаимодействия, $g_{a,b} > 0$, $g_{ab} > 0$. Как и в предыдущих главах найдем большой канонический термодинамический потенциал Ω с пространственно-временным действием с конечной температурой

$$\begin{aligned} S = \quad & \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} \Big\{ \psi^\dagger \hat{K}_a \psi + \phi^\dagger \hat{K}_b \phi + \frac{g_a}{2} (\psi^\dagger \psi)^2 \\ & + \frac{g_b}{2} (\phi^\dagger \phi)^2 + g_{ab} (\psi^\dagger \psi)(\phi^\dagger \phi) \Big\}, \\ \hat{K}_{a,b} \quad & = \frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{O}_{a,b}; \qquad \hat{O}_{a,b} = \frac{\vec{\nabla}^2}{2m_{a,b}} + \mu_{a,b} \ . \end{aligned} \tag{3.1}$$

В уравнении (3.1) поля $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ и $\phi(\mathbf{r}, \tau)$ периодичны по τ с периодом $\beta = 1/T$. Используем ВПТ [19; p.11, 31; p. 1742-5468, 98; p.7, 105; p. 389-1395], который является частным случаем оптимизированной теории возмущений [101; p. 141-209, 102; p. 829-878]. Для двухкомпонентной системы этот метод включает следующие этапы:

(1) сдвиг Боголюбова для полей $\tilde{\psi}$ и $\tilde{\phi}$:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, \tau) &= \sqrt{\rho_{0a}} + \tilde{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \ , \\ \phi(\vec{r}, \tau) &= \sqrt{\rho_{0b}} + \tilde{\phi}(\mathbf{r}, \tau) \ , \end{aligned} \tag{3.5}$$

где параметры порядка ρ_{0a} и ρ_{0b} соответсвуют конденсированным частям компонент a и b, соответсвенно. Отметим, что сдвиг Боголюбова является точным каноническим преобразованием [106; p.41], а не приближением, как иногда утверждается. Для однородной системы, находящейся в равновесии, ρ_{0a} и ρ_{0b} — действительные вариационные константы. Для числа неконденсированных частиц справедливо нормировочное условие $N = N_a + N_b$, $N_a = V\rho_a = V(\rho_{0a} + \rho_{1a})$, $N_b = V\rho_b = V(\rho_{0b} + \rho_{1b})$, где $N_{a(b)}$ – число

частиц в компоненте a, (b); N – полное число частиц двухкомпонентной системы и V – общий объем системы. Поскольку мы рассматриваем однородную систему, плотности ρ_a и ρ_b однородны;

(2) делается следующая замена в действии: $g_a \to \tilde{\delta} g_a$, $g_b \to \tilde{\delta} g_b$, $g_{ab} \to \tilde{\delta} g_{ab}$;

(3) добавляется к действию член с вариационными параметрами;

(4) переходится в декартовое представление и действие переписывается с учетом вариационных параметров $X_1 \ldots X_6$.

Вместо единственного химического потенциала μ вводятся два вида химических потенциалов μ_0 и μ_1, таким образом, что $\mu_{0a} N_{0a} + \mu_{1a} N_{1a} = \mu_a N_a$. Причина тут заключается в следующем: на самом деле теории БЭК, основанные на среднем поле, имеют давнюю проблему, называемую дилеммой Хохэнберга-Мартина [104; p. 291-359], которая довольно просто объясняется для однокомпонентной системы. Химический потенциал должен удовлетворять теорему Голдстоуна и соответствовать минимуму термодинамического потенциала. Показано, что при точном учете аномальной плотности $\sigma \sim < \tilde{\psi}\tilde{\psi} >$ [2] эти два условия не могут выполняться одновременно. Решение этой проблемы было предложено в работе [91; p. 461-499]. Показано, что в системе со спонтанным нарушением калибровочной симметрии введение двух химических потенциалов делает теорию самосогласованной. Естественно, в нормальной фазе, при $\rho_0 = 0$, $\sigma = 0$ оба химических потенциала совпадают: $\mu = \mu_0 = \mu_1$. Введенные вариационные параметры $X_1 \ldots X_6$ следует зафиксировать путем минимизации Ω, e.g. $\partial\Omega/(\partial X_i) = 0$, $(i = 1 \div 6)$;

(5) далее перейдем в импульсное пространство;

(6) теорию возмущения можно представить как разложение по степеням δ. Параметр разложения $\tilde{\delta}$ к концу вычислений приравнивается единице $\tilde{\delta} = 1$;

[2] см. Ур. (46)

(7) детальное вычисление производящего функционала и, следовательно, Ω в первом порядке по $\tilde{\delta}$ может быть выполнено аналогично тому, как это было сделано в [93; p.23] для однокомпонентной модели.

Для термодинамического потенциала получим (детали вычислений подробно приведены в нашей работе [107; p. 15]):

$$\begin{aligned}
\Omega = \quad & \Omega_0 + \Omega_{ln} + \Omega_2 + \Omega_4 \\
\Omega_0 \quad & = V\left\{-\mu_{0a}\rho_{0a} - \mu_{0b}\rho_{0b} + \frac{g_a\rho_{0a}^2}{2} + \frac{g_b\rho_{0b}^2}{2} + g_{ab}\rho_{0a}\rho_{0b}\right\} \\
\Omega_{ln} \quad & = \frac{T}{2}\sum_{k,\omega_n} \ln[(\omega_n^2+\omega_1^2)(\omega_n^2+\omega_2^2)] = \frac{1}{2}\sum_k (\omega_1(k)+\omega_2(k)) + \\
& +T\sum_k \ln(1-e^{-\beta\omega_1(k)}) + T\sum_k \ln(1-e^{-\beta\omega_2(k)}), \\
\Omega_2 \quad & = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{6} A_i\Lambda_i, \\
\Omega_4 \quad & = \frac{1}{8V}\{g_a[3A_1^2+3A_2^2+2A_1A_2] + g_b[3A_3^2+3A_4^2+2A_3A_4] \\
& +2g_{ab}\left[(A_1+A_2)(A_3+A_4) + \frac{A_5^2+A_6^2}{2}\right]\}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

где $A_i = VG_{ii}(x,x)$ $(i = 1 \div 4)$, $A_5 = 2VG_{13}(x,x)$, $A_6 = 2VG_{24}(x,x)$, Λ_i даны и $G_{ij}(x,x)$ представлены в приложении. Диаграммы Фейнмана, вносящие вклад в Ω в настоящей оптимизированной теории возмущений, проиллюстрированы в работах [33; p. 599-639, 108; p.2710-2725].

Вариационные параметры определяются минимизацией термодинамического потенциала $\Omega(X_1 \ldots X_6)$ как $\partial\Omega(X_1 \ldots X_6)/\,\partial X_i = 0$ $(i = 1 \div 6)$. Эти уравнения можно написать в следующем компактном виде:

$$\begin{aligned}
X_1 &= g_a[3\rho_{0a} + 2\rho_{1a} + \sigma_a] + g_{ab}\rho_b - \mu_{1a} \\
X_2 &= g_a[\rho_{0a} + 2\rho_{1a} - \sigma_a] + g_{ab}\rho_b - \mu_{1a} \\
X_3 &= g_b[3\rho_{0b} + 2\rho_{1b} + \sigma_b] + g_{ab}\rho_a - \mu_{1b} \\
X_4 &= g_b[\rho_{0b} + 2\rho_{1b} - \sigma_b] + g_{ab}\rho_a - \mu_{1b} \\
X_5 &= 2g_{ab}\sqrt{\rho_{0a}\rho_{0b}} + g_{ab}\frac{\rho_{ab}+\sigma_{ab}}{2} \\
X_6 &= \frac{g_{ab}}{2}(\rho_{ab} - \sigma_{ab}) \ ,
\end{aligned} \tag{3.5}$$

где плотности ρ_1 и σ приведены в следующем разделе. Отметим, что при выводе уравнений (3.5) использовано соотношение $\partial\Omega_{ln}/\,\partial X_i = A_i/2$, $i = 1 \div 6$, которое можно проверить с помощью програмных обеспечений Mathematica или Maple. В общем, система уравнений (3.5) при заданном наборе входных параметров, таких как параметры связи, общая плотность атомов представляет

собой систему нелинейных алгебраических уравнений относительно неизвестных вариационных параметров $(X_1 \ldots X_6)$.

§ 3.1.1. Нормальная и аномальная плотности

Флуктуационные поля $\tilde{\psi}(r)$ и $\tilde{\phi}(r)$ определяют плотность несконденсированных частиц. Если функции Грина известны, эти плотности могут быть рассчитаны как

$$\begin{aligned} \rho_{1a} = & \frac{1}{V}\int d\mathbf{r}\langle\tilde{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\psi}(\mathbf{r})\rangle = \frac{1}{2V}\int d\vec{r}[G_{11}(\mathbf{r},\mathbf{r}) \\ & +G_{22}(\mathbf{r},\mathbf{r})] = \frac{1}{2V}(A_1 + A_2), \\ \rho_{1b} = & \frac{1}{V}\int d\vec{r}\langle\tilde{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\phi}(\mathbf{r})\rangle = \frac{1}{2V}\int d\mathbf{r}[G_{33}(\mathbf{r},\mathbf{r}) \\ & +G_{44}(\mathbf{r},\mathbf{r})] = \frac{1}{2V}(A_3 + A_4). \end{aligned} \tag{3.6}$$

В общем случае можно ввести аномальные

$$\begin{aligned} \sigma_a & = \frac{1}{2V}\int d\mathbf{r}[\langle\tilde{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\rangle + \langle\tilde{\psi}(\mathbf{r})\tilde{\psi}(\mathbf{r})\rangle] \\ & = \frac{1}{2V}(A_1 - A_2), \\ \sigma_b & = \frac{1}{2V}\int d\mathbf{r}[\langle\tilde{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})\rangle + \langle\tilde{\phi}(\mathbf{r})\tilde{\phi}(\mathbf{r})\rangle] \\ & = \frac{1}{2V}(A_3 - A_4) \end{aligned} \tag{3.7}$$

и «смешанные» плотности:

$$\begin{aligned} \rho_{ab} & = \frac{1}{V}\int d\mathbf{r}[\langle\tilde{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\phi}(\mathbf{r})\rangle + \langle\tilde{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\psi}(\mathbf{r})\rangle] \\ & = \frac{1}{V}\int d\mathbf{r}[G_{13}(\mathbf{r},\mathbf{r}) + G_{24}(\mathbf{r},\mathbf{r})] = \frac{1}{2V}(A_5 + A_6), \\ \sigma_{ab} & = \frac{1}{V}\int d\mathbf{r}[\langle\tilde{\psi}(\mathbf{r})\tilde{\phi}(\mathbf{r})\rangle + \langle\tilde{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})\tilde{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\rangle] \\ & = \frac{1}{2V}(A_5 - A_6). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Ясно, что эти плотности, не зависят от координатных переменных, т. е. являются постоянными для однородной системы. Физически плотности пар ρ_{ab} и σ_{ab} описывают процессы, в которых, благодаря наличию резервуара, происходит обмен частицами или возникают парные корреляции между двумя компонентами.

Из их определения видно, что смешанные плотности характеризуют соотношения между компонентами двухкомпонентной системы. Для количественной оценки этих корреляций можно ввести параметр перекрытия η,

$$\eta = \frac{1}{2\sqrt{N_a N_b}} \int d\mathbf{r}\{\langle \psi^\dagger(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})\rangle + \langle \phi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\rangle\} \tag{3.9}$$

где $\psi(\mathbf{r})$ и $\phi(\mathbf{r})$ — полевые операторы компонент a и b соответственно.

η можно предсавить в следующим виде:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{N_a N_b}} \int d\mathbf{r}\sqrt{\rho_{0a}\rho_{0b}} + \frac{1}{2\sqrt{N_a N_b}} \int d\mathbf{r}\{\langle \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\tilde{\phi}(\mathbf{r})\rangle$$

$$+\langle \tilde{\phi}^\dagger(\mathbf{r})\tilde{\psi}(\mathbf{r})\rangle\} = \sqrt{n_{0a}n_{0b}} + \frac{\rho_{ab}}{2\sqrt{\rho_a\rho_b}} = \frac{X_5+X_6}{2g_{ab}\sqrt{\rho_a\rho_b}}\ , \tag{3.10}$$

где n_{0a} and n_{0b} — нормированные конденсированные части, $n_{0a} = \rho_{0a}/\rho_a$, $n_{0b} = \rho_{0b}/\rho_b$. Заметим, что при пренебрежении флуктуациями, т. е. $\tilde{\psi} = \tilde{\phi} = 0$, η в (3.49) совпадает с параметром смешиваемости из [109; p.8, 110; p.19], введенным для неоднородных связанных систем. В частности, если хотя бы одна из компонент находится в нормальной фазе, параметр η полностью определяется плотностью нормальных пар, $\eta(T > T_c) = \rho_{ab}/2\sqrt{\rho_a\rho_b} = X_5/g_{ab}\sqrt{\rho_a\rho_b}$.

§ 3.1.2. Частные случаи ХФБ-аппроксимации

Представленная теория типа ХФБ является весьма общей, так что некоторые известные приближения могут быть легко получены как частные случаи ХФБ.

i) Некоторые авторы используют метод [111; p.553–5], в котором пренебрегаются аномальные плотности, что соответствует случаю, когда в уравнениях (3.4) - (3.5) σ_a,σ_b , σ_{ab} опущены. При этом $\mu_{0a,b} = \mu_{1a,b} = \mu_{a,b}$. Однако, как показано в ряде публикаций [58; p.9, 91; p. 461-499, 92; p.12, 93; p.23, 94; p.23], этот приводит к несамосогласованному подходу.

ii) Боголюбовская и квадратичная аппроксимации соответствуют случаю, когда после сдвига (3.3) в действии (3.2) сохраняются только квадратичные члены флуктуирующих полей: $S \approx S_0 + S_{free} + S_{int}^{(2)}$, при $\tilde{\delta} = 1$. Формальное отличие при этом состоит в том, что в квадратичном приближении имеем

$$\Omega^{Bil} = \Omega_0 + \Omega_{ln} \tag{3.11}$$

где Ω_0 и Ω_{ln} имеют те же выражения, что и в (43), с собственными энергиями, определяемыми как

$$\begin{aligned}
X_1 &\approx X_1^{Bil} = 3g_a\rho_{0a} + g_{ab}\rho_{0b} - \mu_a \\
X_2 &\approx X_2^{Bil} = g_a\rho_{0a} + g_{ab}\rho_{0b} - \mu_a \\
X_3 &\approx X_3^{Bil} = 3g_b\rho_{0b} + g_{ab}\rho_{0a} - \mu_b \\
X_4 &\approx X_4^{Bil} = g_b\rho_{0b} + g_{ab}\rho_{0a} - \mu_b \\
X_5 &\approx X_5^{Bil} = 2g_{ab}\sqrt{\rho_{0a}\rho_{0b}} \\
X_6 &\approx X_6^{Bil} = 0.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

В приближение Боголюбова термодинамический потенциал формально дается выражением (3.11), а собственные энергии - выражением (3.12), где $\rho_{0a,b} \approx \rho_{a,b}$, т.е. $X_i^{Bog} = X_i^{Bil}(\rho_{0a} = \rho_a, \rho_{0b} = \rho_b)$. В этом случае уравнения будут несвязанными, а решения простыми. Фактически оба эти варианты имеют почти одинаковую точность и справедливы только для малых параметров газа $\gamma \leq 10^{-5}$.

Теперь мы можем подвести итоги настоящего раздела. В практических расчётах в рамках нашей самосогласованной теории необходимо решить систему, вообще говоря, из шести нелинейных алгебраических уравнений (3.5) относительно вариационных параметров $[X_1 \ldots X_6]$, а затем оценить все термодинамические равновесные характеристики однородной двухкомпонентной Бозе-системы из $\Omega(X_1 \ldots X_6)$, приведённые в (3.4). Свойства устойчивости и смешиваемости можно изучить, анализируя спектр коллективных возбуждений. На первый взгляд эта процедура, особенно решение системы шести нелинейных алгебраических уравнений, кажется

довольно громоздкой. Однако в действительности количество неизвестных вариационных параметров $[X_1 \dots X_6]$ может быть уменьшено в зависимости от рассматриваемого состояния (БЭК или нормальной фазы) и существующих симметрий в системе. В следующих разделах мы подробно обсудим эти частные случаи.

§ 3.2. Конденсированная и нормальная фазы

§ 3.2.1. Конденсированная фазы

В этой фазе количество вариационных параметров сокращается благодаря теореме Гугенгольца-Пайнса [61; p. 489-506], которая была развита для многокомпонентного конденсата Бозе-Эйнштейна в работах [90; p.5, 97; p. 1070-1080]. Для двухкомпонентной Бозе-системы в наших обозначениях это выглядит таким образом

$$\begin{aligned} &\Sigma_n^{(a)} - \Sigma_{an}^{(a)} = \mu_{1a}, \qquad \Sigma_n^{(b)} - \Sigma_{an}^{(b)} = \mu_{1b}, \\ &\Sigma_n^{(ab)} = \Sigma_{an}^{(ab)}, \end{aligned} \tag{3.13}$$

и следовательно

$$X_2 = 0, \qquad X_4 = 0, \quad X_6 = 0, \quad \sigma_{ab} = \rho_{ab} \ . \tag{3.14}$$

Поэтому в фазе БЭК вместо шести уравнений остается система из трех уравнений. Для Бозе-систем с фиксированными химическими потенциалами [92; p.12] эти уравнения можно записать в виде

$$\begin{cases} \Delta_a = \mu_{1a} + 2g_a(\sigma_a - \rho_{1a}) - g_{ab}\rho_b \\ \Delta_b = \mu_{1b} + 2g_b(\sigma_b - \rho_{1b}) - g_{ab}\rho_a \\ \Delta_{ab} = g_{ab}(\sqrt{\rho_{0a}\rho_{0b}} + \rho_{ab}/2) \ . \end{cases} \tag{3.15}$$

С другой стороны, если плотности фиксированы, как в атомных газах, можно определить химические потенциалы из уравнений (3.5) и (3.13) как

$$\begin{aligned} \mu_{1a} &= g_a[\rho_a + \rho_{1a} - \sigma_a] + g_{ab}\rho_b \\ \mu_{1b} &= g_b[\rho_b + \rho_{1b} - \sigma_b] + g_{ab}\rho_a. \end{aligned} \tag{3.16}$$

Полные химические потенциалы, определяемые как $\mu_a = (\partial F/\,\partial N_a)$ и $\mu_b = (\partial F/\,\partial N_b)$ (где F — полная свободная энергия системы), можно рассчитать в виде

$$\mu_a\rho_a = \mu_{1a}\rho_{1a} + \mu_{0a}\rho_{0a}, \mu_b\rho_b = \mu_{1b}\rho_{1b} + \mu_{0b}\rho_{0b}, \tag{3.17}$$

здесь

$$\begin{aligned} \mu_{0a} &= g_a[\rho_a + \rho_{1a} + \sigma_a] + g_{ab}\left[\rho_b + \frac{\rho_{0b}\sigma_{ab}}{\sqrt{\rho_{0a}\rho_{0b}}}\right], \\ \mu_{0b} &= g_b[\rho_b + \rho_{1b} + \sigma_b] + g_{ab}\left[\rho_a + \frac{\rho_{0a}\sigma_{ab}}{\sqrt{\rho_{0a}\rho_{0b}}}\right] \ . \end{aligned} \tag{3.18}$$

Последние два уравнения выводятся из $\partial\Omega/\,\partial\rho_{0a} = 0$ и $\partial\Omega/\,\partial\rho_{0b} = 0$, где Ω задается уравнением (3.4). Как и ожидалось, если пренебречь аномальными плотностями, полагая $\sigma_a = \sigma_b = \sigma_{ab} = 0$, то получаем $\mu_{0a} = \mu_{1a} = \mu_a$, $\mu_{0b} = \mu_{1b} = \mu_b$.

С учетом (3.14) для дисперсий $\omega_{1,2}$ получим следующие врыжения:

$$\begin{aligned} &\omega_{1,2} = \sqrt{\frac{\varepsilon(k)^2}{2}(\nu_1^2 + \nu_2^2) + 2\varepsilon(k)\Lambda_{1,2}}, \\ &\Lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(\Delta_a\nu_1 + \Delta_b\nu_2) \pm \frac{\sqrt{D_s}}{4}, \\ &D_s = 16\nu_1\nu_2\Delta_{ab}^2 + (\nu_1^2\varepsilon(k) - \nu_2^2\varepsilon(k) + 2\Delta_a\nu_1 - 2\Delta_b\nu_2)^2 \\ &\omega_1^2 - \omega_2^2 = \varepsilon(k)\sqrt{D_s}\ , \end{aligned} \tag{3.19}$$

здесь вводится приведенная масса $m_R = m_{ab} = m_a m_b/(m_a + m_b)$, и $\nu_1 = m_b/(m_a + m_b)$, $\nu_2 = m_a/(m_a + m_b)$, $\varepsilon(k) = \mathbf{k}^2/2m_R$. Разложение ω_i по степеням импульса дает скорости звука

$$\omega_1 = c_1|\mathbf{k}| + O(k^3), \quad \omega_2 = c_2|\mathbf{k}| + O(k^3), \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned} c_1^2 &= \frac{\Delta_a m_b + \Delta_b m_a + \sqrt{4m_a m_b\Delta_{ab}^2 + (\Delta_b m_a - \Delta_a m_b)^2}}{2m_a m_b}\ , \\ c_2^2 &= \frac{\Delta_a m_b + \Delta_b m_a - \sqrt{4m_a m_b\Delta_{ab}^2 + (\Delta_b m_a - \Delta_a m_b)^2}}{2m_a m_b}\ . \end{aligned} \tag{3.21}$$

Скорости c_1 (c_2) в литературе называются плотностными (псевдоспиновыми) скоростями звука. В бинарной сверхтекучей жидкости звук плотности

соответствует колебанию двух сверхтекучих компонент в фазе, а псевдоспиновый звук соответствует колебаниям в противофазе [81; p.5].

Из последнего уравнения видно, что при $\Delta_a\Delta_b < \Delta_{ab}^2$, c_2^2 становится отрицательным, что говорит о нестабильности системы. В частности, применяя приближение Боголюбова, т.е. полагая $\rho_{0a} \approx \rho_a$, $\rho_{0b} \approx \rho_b$, $\sigma_a = \sigma_b = \rho_{ab} \approx 0$, получим

$$\Delta_a \approx g_a\rho_a \ , \quad \Delta_b \approx g_b\rho_b \ , \quad \Delta_{ab} \approx g_{ab}\sqrt{\rho_a\rho_b} \ , \tag{3.22}$$

тем самым приходим к известному условию устойчивости $g_a g_b / g_{ab}^2 \leq 1$.

Явные выражения для плотностей можно получить из уравнений (3.6-3.8), установив $X_2 = X_4 = X_6 = 0$. Как и ожидалось, когда константа g_{ab} стремится к нулю, приходим к известным формулам однокомпонентного случая:

$$\begin{aligned}
&\rho_{1a}(g_{ab} \to 0) = \frac{1}{V}\sum_k \left[\frac{\Delta_a + \varepsilon_a(k)}{\omega_a(k)} W_1(k) - \frac{1}{2}\right] \ , \\
&\rho_{1b}(g_{ab} \to 0) = \frac{1}{V}\sum_k \left[\frac{\Delta_b + \varepsilon_b(\vec{k})}{\omega_b(k)} W_2(k) - \frac{1}{2}\right] \ , \\
&\sigma_a(g_{ab} \to 0) = -\frac{\Delta_a}{V}\sum_k \frac{W_1(k)}{\omega_a(k)} \ , \\
&\sigma_b(g_{ab} \to 0) = -\frac{\Delta_b}{V}\sum_k \frac{W_2(k)}{\omega_b(k)} \ , \\
&\rho_{ab}(g_{ab} \to 0) = \sigma_{ab}(g_{ab} \to 0) = 0 \ , \\
&c_1^2 = \Delta_b / m_b \ , \qquad c_2^2 = \Delta_a / m_a \ ,
\end{aligned} \tag{3.23}$$

здесь $W_{a,b}(k) = 1/2 + 1/(e^{\omega_{a,b}(k)\beta} - 1)$, $\omega_{a,b} = \sqrt{\varepsilon_{a,b}(k)(\varepsilon_{a,b}(k) + 2\Delta_{a,b})}$.

В приведенном выше обсуждении предполагается, что оба компонента находятся в состоянии БЭК. В следующем разделе рассмотрим случай, когда вся система находится в нормальной фазе, где теорему ХП можно не рассматривать.

§ 3.2.2. Нормальная фаза

Общий критерий смешиваемости или несмешиваемости задается поведением спектра коллективных возбуждений. Чтобы быть смешиваемой, бинарная Бозе-смесь должна обладать положительными (неотрицательными)

действительными ветвями коллективного спектра. В случае Бозе-конденсированной системы нарушается глобальная калибровочная симметрия и спектры одночастичных и коллективных возбуждений совпадают [112; p. 349-399]. Однако для нормальной (неконденсированной) системы эти спектры иные. Положительность одночастичного спектра, определяемого полюсами одночастичной функции Грина, говорит нам о том, что на уровне одночастичных свойств система устойчива, но ничего не утверждает о том, смешанная она или разделённая. Спектр коллективных возбуждений нормальной системы определяется полюсами функции Грина второго порядка или полюсами динамической восприимчивости (функция отклика). Смесь разделяется, когда нижняя ветвь коллективного спектра пересекает ноль.

Во-первых, докажем, что бинарная нормальная Бозе-смесь при $T > T_c$ обладает устойчивым одночастичным спектром, положительным при любой температуре и значениях параметров локального взаимодействия, независимо от того, является ли система смешанной или разделенной.

По определению в нормальной фазе $\rho_{0a} = \rho_{0b} = \sigma_a = \sigma_b = \sigma_{ab} = 0$, и отсюда, $\rho_{1a} = \rho_a$, $\rho_{1b} = \rho_b$, $\mu_{0a} = \mu_{1a} = \mu_a$, $\mu_{0b} = \mu_{1b} = \mu_b$, $X_6 = X_5$, $X_2 = X_1$, $X_4 = X_3$. Таким образом, основные уравнения (3.5) упрощаются в виде

$$\begin{aligned} X_1 &= 2\rho_a g_a + \rho_b g_{ab} - \mu_a \equiv -\mu_{\mathrm{eff}}^{(a)} \ , \\ X_3 &= 2\rho_b g_b + \rho_a g_{ab} - \mu_b \equiv -\mu_{\mathrm{eff}}^{(b)} \ , \\ X_5 &= \tfrac{1}{2}\rho_{ab} g_{ab} \ , \end{aligned} \tag{3.24}$$

где плотности задаются уравнениями

$$
\begin{aligned}
\rho_{1a} &= \rho_a = \frac{1}{V}\sum_k \left\{\frac{(X_5^2 E_b + E_a\omega_1^2 - E_a E_b^2) f(\omega_1)}{\sqrt{D}\omega_1}\right. \\
&\left. + \frac{(X_5^2 E_b + E_a\omega_2^2 - E_a E_b^2) f(\omega_2)}{\sqrt{D}\omega_2}\right\} , \\
\rho_{1b} &= \rho_b = \frac{1}{V}\sum_k \left\{\frac{(X_5^2 E_a + E_b\omega_1^2 - E_a^2 E_b) f(\omega_1)}{\sqrt{D}\omega_1}\right. \\
&\left. + \frac{(X_5^2 E_a + E_b\omega_2^2 - E_a^2 E_b) f(\omega_2)}{\sqrt{D}\omega_2}\right\} , \\
\rho_{ab} &= \frac{2X_5}{V}\sum_k \left\{\frac{(-X_5^2 + E_a E_b + \omega_1^2) f(\omega_1)}{\sqrt{D}\omega_1}\right. \\
&\left. - \frac{(-X_5^2 + E_a E_b + \omega_2^2) f(\omega_2)}{\sqrt{D}\omega_2}\right\} , \\
\eta &= \frac{\rho_{ab}}{2\sqrt{\rho_a\rho_b}}, \qquad f(x) = 1/(e^{\beta x} - 1) .
\end{aligned}
\tag{3.25}
$$

Тогда дисперсионные соотношения сводятся к виду

$$
\begin{aligned}
&\omega_{1,2} = \sqrt{\frac{E_a^2 + E_b^2}{2} + X_5^2 \pm \frac{\sqrt{D}}{2}} , \\
&D = (E_a + E_b)^2 [4X_5^2 + (E_a - E_b)^2] ,
\end{aligned}
\tag{3.26}
$$

здесь

$$
E_a = \varepsilon_a(k) - \mu_{\mathrm{eff}}^{(a)}, \qquad E_a = \varepsilon_b(k) - \mu_{\mathrm{eff}}^{(b)} . \tag{3.27}
$$

Этот спектр действителен и положителен в том случае, если выражение под квадратным корнем не становится отрицательным. Удобно проверить положительность выражения $\omega_1^2 \cdot \omega_2^2$. Тогда из (3.26) легко получается условие

$$
\omega_1^2 \cdot \omega_2^2 = (E_a E_b - X_5^2)^2 \geq 0 . \tag{3.28}
$$

Поскольку ω_1 положительна, то и ω_1^2 и ω_2^2 положительны одновременно для любых g_{ab} и температуры $T \geq T_c$, следовательно, спектры вещественны и положительны.

Отметим, что при $g_{ab} = 0$ уравнения (3.25) превращаются в известные выражения

$$
\begin{aligned}
&\rho_{1a} = \rho_a = \frac{1}{V}\sum_k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_a(k) - \mu_{\mathrm{eff}}^{(a)})} - 1} , \\
&\rho_{1b} = \rho_b = \frac{1}{V}\sum_k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_b(k) - \mu_{\mathrm{eff}}^{(b)})} - 1} ,
\end{aligned}
\tag{3.29}
$$

где $\mu_{\mathrm{eff}}^{(a)} = \mu_a - 2\rho_a g_a$.

Спектр коллективных возбуждений бинарной смеси нормальных компонент изучался в приближении случайных фаз (random-phase approximation) в работе [113; p. 295-314]. В этом приближении для случая контактных взаимодействий динамическое условие устойчивости смеси оказывается совпадающим с неравенством $g_{ab}^2 < g_a g_b$, практически не зависящим от температуры.

Критическая температура. В данном приближении, как и во многих вариантах приближений среднего поля [33; p. 599-639], отсутствует сдвиг критической температуры из-за межкомпонентной константы связи g_{ab}, т.е. $T_c(g_{ab}) = T_c(g_{ab} = 0)$.

Для полноты в конце этого раздела мы приводим явные выражения для свободной энергии $F = \Omega + \mu N = \Omega + \mu_a N_a + \mu_b N_b$, которые имеют вид

$$\begin{aligned}
F(T &< T_c) = F_0 + F_{ZM} + F_T \\
F_0 = &\ \frac{V\rho_a^2 g_a}{2}(1 + n_{1a}^2 - \widetilde{m}_a^2 - 2n_{1a}\widetilde{m}_a) + \frac{V\rho_b^2 g_b}{2}(1 \\
&+ n_{1b}^2 - \widetilde{m}_b^2 - 2n_{1b}\widetilde{m}_b) + \frac{V}{2}\rho_a\rho_b(2 - \widetilde{m}_{ab}^2), \\
F_{ZM} &= \frac{1}{2}\sum_k \{\omega_1 + \omega_2 - \varepsilon_k - \Delta_a - \Delta_b \\
&+ \frac{\nu_2^2\Delta_a^2 + \nu_1^2\Delta_b^2 + 4\Delta_{ab}^2\nu_1\nu_2}{2\nu_1\nu_2\varepsilon(k)}\}, \\
F_T = &\ T\sum_k \left[\ln(1 - e^{-\omega_1\beta}) + \ln(1 - e^{-\omega_2\beta})\right], \\
F(T &> T_c) = Vg_a\rho_a^2 + Vg_b\rho_b^2 + g_{ab}V\rho_a\rho_b + F_T
\end{aligned} \tag{3.30}$$

где $n_{1a} = \rho_{1a}/\rho_a$, $\widetilde{m}_a = \sigma_a/\rho_a$, $\widetilde{m}_{ab} = \sigma_{ab}/\rho_a$, и дисперсии ω_1 и ω_2 для БЭК и нормальной фаз даны в уравнениях (3.19) и (3.26), соответственно. Явные выражения для F_{ZM}, называемой в литературе энергией нулевой моды, можно найти, например, в работах [78; p.11, 114; p. 295-314]. Отметим, что данный подход включает в себя не только член Ли-Хуанг-Янга (LHY) [115; p.1135-1145], но и поправки к нему за счет учета аномальных плотностей. В частности, член LHY может быть получен путем разложения F_{ZM} по степеням параметров связи.

В заключение настоящего раздела резюмируем условия устойчивости двухкомпонентной однородной Бозе-системы:

(i) При температурах ниже критической, когда система находится в конденсированной фазе, смесь устойчива при соблюдении общего условия

$$\frac{\Delta_a(\gamma,T)\Delta_b(\gamma,T)}{\Delta_{ab}^2(\gamma,T)} \geq 1 \tag{3.31}$$

Здесь собственные энергии $\Delta_a(\gamma,T)$, $\Delta_b(\gamma,T)$ и $\Delta_{ab}(\gamma,T)$ являются решениями уравнений (3.15).

(ii) Неравенство (3.31) можно заменить на

$$\frac{g_a g_b}{g_{ab}^2} \geq 1 \tag{3.32}$$

для сильно разреженных газов, где справедливо приближение Боголюбова.

В следующем разделе будет показано, что для уравновешенной симметричной Бозе-смеси неравенство (3.31) можно представить в виде разложения по степеням γ.

§ 3.3. Сбалансированные симметричные Бозе-смеси

Случай бинарного сверхтекучего газа с двумя симметричными компонентами, состоящими из ^{23}Na в равной смеси двух сверхтонких основных состояний, недавно был экспериментально реализован в работе Ким и др. [81; p.16]. В соответствии с этим, мы предполагаем, что $g_a = g_b = g$, $g_{ab} = \overline{g}_{ab} g_a$, $m_a = m_b = m$, $\varepsilon_a(k) = \varepsilon_b(k) = \varepsilon(k) = k^2/2m$, $\rho_a = \rho_b = \rho/2$, где $N = \rho V$— общее число атомов в смеси. Отметим, что при рассмотрении аномальных средних мы прибегаем к стандартному способу регуляризации, используя метод контрчленов, эквивалентный размерной регуляризации [33; 599-639, 103; p. 460-513].

§ 3.3.1. Нулевая температура

При нулевой температуре выражения для плотностей упрощаются

$$
\begin{aligned}
n_{1a} &= \frac{\rho_{1a}(T=0)}{\rho_a} = \frac{\rho_{1b}(T=0)}{\rho_a} = \frac{1}{2V\rho_a}\sum_k \left\{\frac{\Delta_a+\varepsilon(k)+\Delta_{ab}}{2\omega_1} + \frac{\Delta_a+\varepsilon(k)-\Delta_{ab}}{2\omega_2} - 1\right\} \\
&= \frac{m^3(c_1^3+c_2^3)}{6\pi^2\rho_a} = n_{1b} \ , \\
\widetilde{m}_a &= \frac{\sigma_a(T=0)}{\rho_a} = \frac{\sigma_b(T=0)}{\rho_b} = -\frac{1}{2V\rho_a}\sum_k \left\{\frac{\Delta_a+\Delta_{ab}}{2\omega_1} + \frac{\Delta_a-\Delta_{ab}}{2\omega_2} - \frac{\Delta_a}{\varepsilon(k)}\right\} \\
&= 3n_{1a}(T=0) \ , \\
n_{ab} &= \frac{\rho_{ab}(T=0)}{\sqrt{\rho_a\rho_b}} = \frac{1}{2V\rho_a}\sum_k \left\{\frac{\varepsilon(k)+\Delta_a+\Delta_{ab}}{\omega_1} - \frac{\varepsilon(k)+\Delta_a-\Delta_{ab}}{\omega_2}\right\} = \frac{m^3(c_1^3-c_2^3)}{3\pi^2\rho_a} \ , \\
\widetilde{m}_{ab} &= \frac{\sigma_{ab}(T=0)}{\sqrt{\rho_a\rho_b}} = n_{ab} \ ,
\end{aligned}
\tag{3.34}
$$

где введены скорости звука

$$
c_{1,2}^2 = (\Delta_a \pm \Delta_{ab})/m \ , \tag{3.35}
$$

которые удовлетворяют следующим уравнениям, полученным из (3.15) и (3.21):

$$
\begin{aligned}
c_1^3 - c_2^3(\overline{g}_{ab} - 1) - \frac{3\pi^2 c_1^2}{gm^2} + \frac{3\pi^2\rho_a(\overline{g}_{ab}+1)}{m^3} = 0 \ , \\
c_1^3 + c_2^3(\overline{g}_{ab} + 1) - \frac{3\pi^2 c_2^2}{gm^2} - \frac{3\pi^2\rho_a(\overline{g}_{ab}-1)}{m^3} = 0 \ .
\end{aligned}
\tag{3.36}
$$

Эти уравнения можно переписать в безразмерном виде

$$
\begin{aligned}
s_1^3 + (1 - \overline{g}_{ab})s_2^3 - \frac{3\pi s_1^2}{4} + \frac{3\pi^2\gamma(\overline{g}_{ab}+1)}{2} = 0 \ , \\
s_1^3 + (1 + \overline{g}_{ab})s_2^3 - \frac{3\pi s_2^2}{4} - \frac{3\pi^2\gamma(\overline{g}_{ab}-1)}{2} = 0 \ ,
\end{aligned}
\tag{3.37}
$$

где $\gamma = \rho a_s^3$, $\rho = 2\rho_a$ — полная плотность всей двойной системы, $a_s = mg/4\pi$, $s_{1,2} = c_{1,2} \cdot ma_s$. Из приближения Боголюбова известно, что система становится неустойчивой при $\overline{g}_{ab} > 1$. Здесь рассмотрим вопрос о возможных поправках к этому критерию за счет квантовых флуктуаций.

$$
\begin{aligned}
(s_1^*)^3 - \frac{3\pi}{8}(s_1^*)^2 + \frac{3\pi^2\gamma^*}{2} = 0 \ , \\
\overline{g}_{ab}^* = \frac{(s_1^*)^2}{4\pi\gamma^*} \ .
\end{aligned}
\tag{3.39}
$$

где "звездочкой" отмечены пороговые значения параметров, соответствующие границе устойчивости симметричной бинарной смеси. На Рис. 3.1а представлена фазовая диаграмма на плоскости $(\overline{g}_{ab}, \gamma)$ (сплошная линия). Видно, что наличие квантовых флуктуациий приводит к тому, что система при

$T = 0$ остается стабильной даже, например, при $\overline{g}^*_{ab}(\gamma \approx 0.013) \approx 1.9$. Это один из основных результатов настоящей работы.

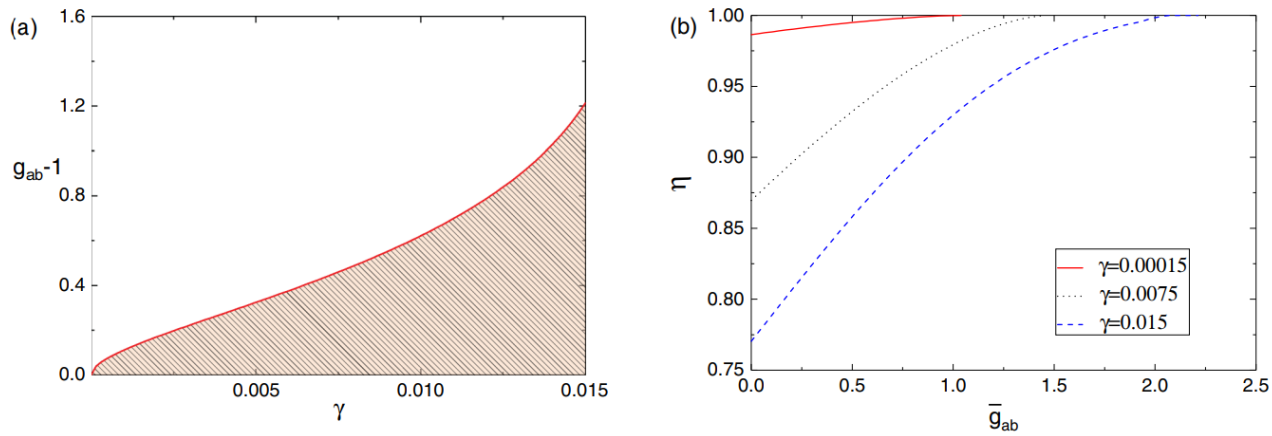


Рис. 3.1. (a): Фазовая диаграмма симметричной бинарной Бозе-системы с отталкивающими взаимодействиями при нулевой температуре. Заштрихованная область соответствует стабильной смешивающейся фазе; (b): Параметр перекрытия η в зависимости от $\overline{g}_{ab} = g_{ab}/g$ для трех различных значений газового параметра: $\gamma = 0.15 \cdot 10^{-3}$ (сплошная линия), $\gamma = 0.75 \cdot 10^{-2}$ (пунктирная линия) линия) и $\gamma = 0.15 \cdot 10^{-1}$ (штриховая линия)

Для малых γ разложив $\overline{g}^*_{ab}$ получим условие устойчивости в виде

$$g_{ab} \leq g_a \left[1 + \frac{16\sqrt{\gamma}}{3\sqrt{\pi}} + O(\gamma)\right] , \qquad (3.40)$$

что действительно для $\gamma \leq 0.005$.

Параметр перекрытия для симметричного случая при $T = 0$ имеет вид:

$$\eta = n_{0a} + \frac{n_{ab}}{2} = 1 - n_{1a} + \frac{n_{ab}}{2} = 1 - \frac{2s_2^3}{3\pi^2\gamma} . \qquad (3.41)$$

На границе устойчивости $s_2 = s_2^* = 0$, а η достигает своего максимального значения: $\eta = 1$ (см. рис. 3.1б).

Вблизи точки фазового перехода конденсированную фракцию можно представить в виде

$$n_0^*(T = 0) = 1 - \frac{\rho_{1a}}{\rho_a}\bigg|_{\overline{g}_{ab} \to \overline{g}^*_{ab}} = 1 - \frac{8\sqrt{\gamma}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{64\gamma}{3\pi} + O(\gamma^{3/2}) . \qquad (3.42)$$

Она представлена на рис. 2а в зависимости от $\overline{g}_{ab}$. Видно, что межкомпонентное отталкивание g_{ab} стремится разрушать БЭК, выталкивая конденсированные частицы.

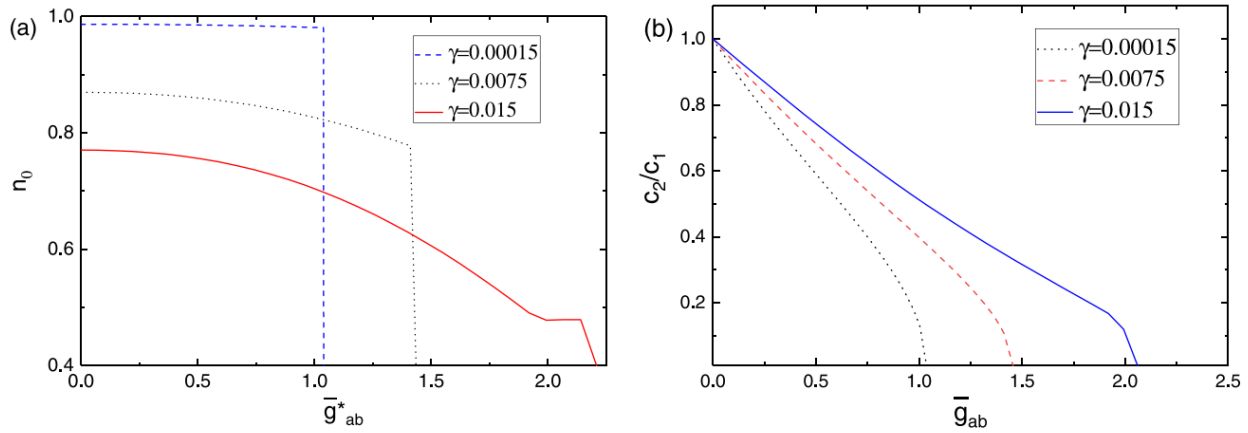


Рис. 3.2. а): Конденсированная доля ($n_0 = \rho_0/(\rho/2)$) при нулевой температуре в зависимости от $\overline{g}_{ab} = g_{ab}/g$ в интервале $0 < \overline{g}_{ab} < \overline{g}^*_{ab}(\gamma)$ для различных значений γ; (b): Относительная скорость звука c_2/c_1 в зависимости от $\overline{g}_{ab}$ для различных значений γ при $T = 0$

Настоящая работа была бы неполной без сравнения с экспериментом, проведенным Kim et al. [81; p.5]. Авторы исследовали смесь атомов с двумя сверхтонкими основными состояниями ^{23}Na и измерили скорости звука $c_1 = 3.23\ mm/s$ и $c_2 = 0.70\ mm/s$, зафиксировав относительную константу связи $\overline{g}_{ab} = 0.93$ и газовый параметр $\gamma \approx 1.4 \cdot 10^{-6}$. Для этого набора параметров из уравнений (3.77) мы получим следующие значения скоростей звука: $c_1 = 3.91\ mm/s$, $c_2 = 0.75\ mm/s$, которые достаточно близки к экспериментальным данным. Чтобы сделать дальнейший прогноз, мы рассчитали относительную скорость звука c_2/c_1 в зависимости от $\overline{g}_{ab}$ для трех различных значений γ. Результаты представлены на рис. 3.2б. Видно, что c_2/c_1 уменьшается с увеличением $\overline{g}_{ab}$ и обращается в нуль при $\overline{g}_{ab} = \overline{g}^*_{ab}$, где происходит расслоение фаз.

§ 3.3.2. БЭК с конечной температурой в сбалансированной симметричной бинарной смеси

Подставляя $m_a = m_b = m$, $\rho_a = \rho_b = \rho/2$, $g_a = g_b = g$, и $g_{ab} = \overline{g}_{ab} g$ можно получить следующие выражения для плотностей при конечных температурах:

$$n_{1a} = \frac{\rho_{1a}}{\rho_a} = \frac{m^3(c_1^3+c_2^3)}{6\pi^2\rho_a} + \frac{1}{2V\rho_a}\sum_k \left[\frac{mc_1^2+\varepsilon(k)}{\omega_1} f(\omega_1) + \frac{mc_2^2+\varepsilon(k)}{\omega_2} f(\omega_2)\right] ,$$

$$\widetilde{m}_a = \frac{\sigma_a}{\rho_a} = \frac{m^3(c_1^3+c_2^3)}{2\pi^2\rho_a} - \frac{m}{2V\rho_a}\sum_k \left[c_1^2 f(\omega_1) + c_2^2 f(\omega_2)\right] ,$$

$$n_{ab} = \frac{\rho_{ab}}{\rho_a} = \frac{m^3(c_1^3-c_2^3)}{3\pi^2\rho_a} + \frac{1}{V\rho_a}\sum_k \left[\frac{c_1^2 m+\varepsilon(k)}{\omega_1} f(\omega_1) + \frac{c_2^2 m+\varepsilon(k)}{\omega_2} f(\omega_2)\right] , \quad (3.43)$$

а также для параметра перекрытия η:

$$\eta = 1 - \frac{m^3 c_2^3}{3\pi^2\rho_a} - \frac{1}{V\rho_a}\sum_k \frac{mc_2^2+\varepsilon(k)}{\omega_2} f(\omega_2) , \quad (3.44)$$

где дисперсии, выраженные через скорости звука, равны

$$\omega_{1,2} = \sqrt{\varepsilon(k)(\varepsilon(k) + 2mc_{1,2}^2)} . \quad (3.45)$$

Отметим, что вблизи критической температуры, где $c_2 = 0$ и $\omega_2 = \varepsilon(k)$, параметр перекрытия η стремится к нулю:

$$\eta(T \to T_c) = 1 - \frac{1}{\rho_a V}\sum_k \frac{1}{e^{\varepsilon(k)/T_c - 1}} = 1 - 1 = 0, \quad (3.46)$$

как показано выше для общего случая.

В предыдущем разделе была обсуждена граница устойчивости (рис.3.1а) при нулевой температуре. Ясно, что при конечной температуре может нарушаться также и условие $\Delta_a(\overline{g}_{ab}, \gamma, T) \leq \Delta_{ab}(\overline{g}_{ab}, \gamma, T)$. На рис. 3.3 представлена фазовая диаграмма симметричного двухкомпонентного БЭК на плоскости $(\overline{g}_{ab}, t)$ для четырех значений γ. Видно, что нестабильность может

возникнуть при любой температуре ниже критической в зависимости от $g_{ab} = \overline{g}_{ab} g$. Например, при $t = 0.5$ система остается в смешиваемой стабильной фазе до того, как $\overline{g}_{ab}$ достигнет значения $\overline{g}^*_{ab} = 1.625$ для $\gamma = 0.01$. Дальнейшее увеличение $\overline{g}_{ab}$ при этой температуре приводит к фазовому переходу в несмешиваемую, но стабильную фазу с меньшей энергией. Из рис. 3.3а видно, что при малых γ пороговое значение $\overline{g}_{ab}$ близко к единице в соответствии с предсказанием Боголюбова и увеличивается с ростом γ за счет квантовых поправок. Ниже $\overline{g}_{ab} < \overline{g}^*_{ab}$система смешиваема и устойчива.

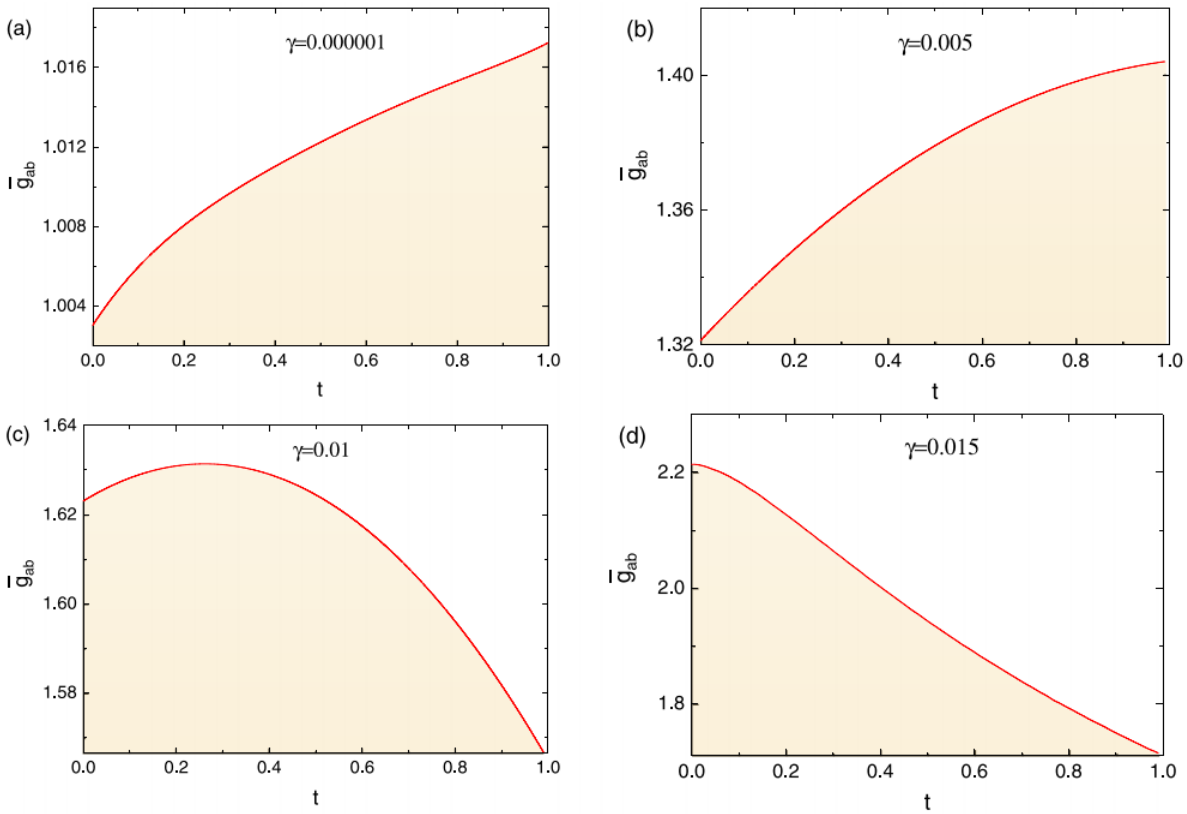


Рис. 3.3. Фазовая диаграмма сбалансированной симметричной двухкомпонентной Бозе-смеси на плоскости ($\overline{g}_{ab} = g_{ab}/g, t = T/T_c$) для различных газовых параметров (a: $\gamma = 0.000001$, b: $\gamma = 0.005$, c: $\gamma = 0.01$, d: $\gamma = 0.015$). Заштрихованная область соответствует стабильному смешиваемому состоянию

На рис. 3.4 изображен параметр перекрытия $\eta(t)$ для различных значений $\overline{g}_{ab}$ и γ. Из графика видно, η близка к единице вблизи нуля

температуры и быстро уменьшается с ростом температуры, обращаясь в нуль при $T = T_c$.

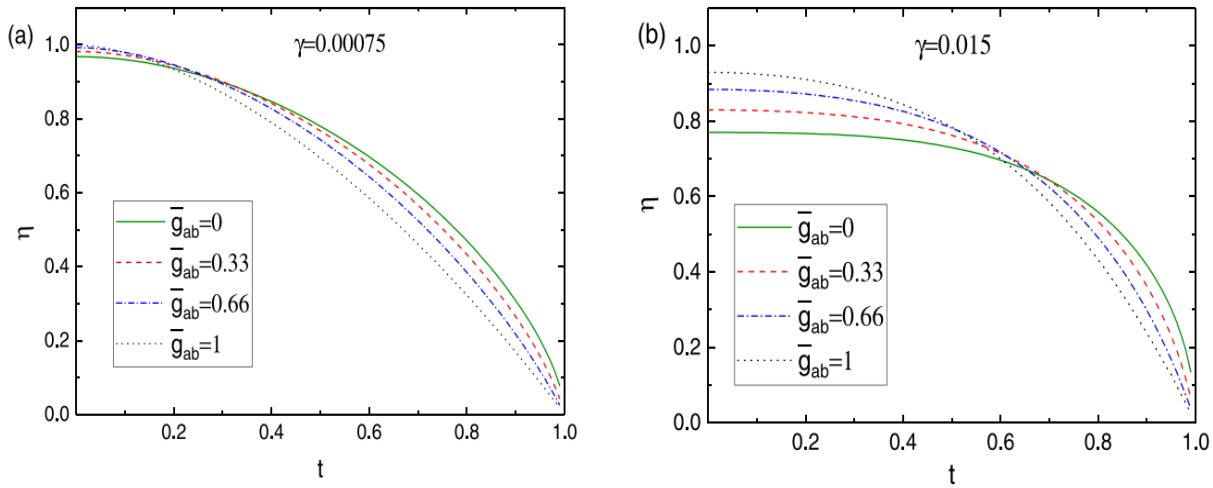


Рис. 3.4. Параметр перекрытия в зависимости от температуры для $\gamma = 7.5 \cdot 10^{-3}$ (a) и (b) $\gamma = 0.015$

На рис. 3.5 представлен химический потенциал в большом диапазоне температур $(t = T/T_c)$ для различных значений $\overline{g}_{ab}$. Видно, что изменение μ за счет $\overline{g}_{ab}$ достаточно велико как в Бозе-конденсированной $(T < T_c)$, так и в нормальной $(T > T_c)$ фазах.

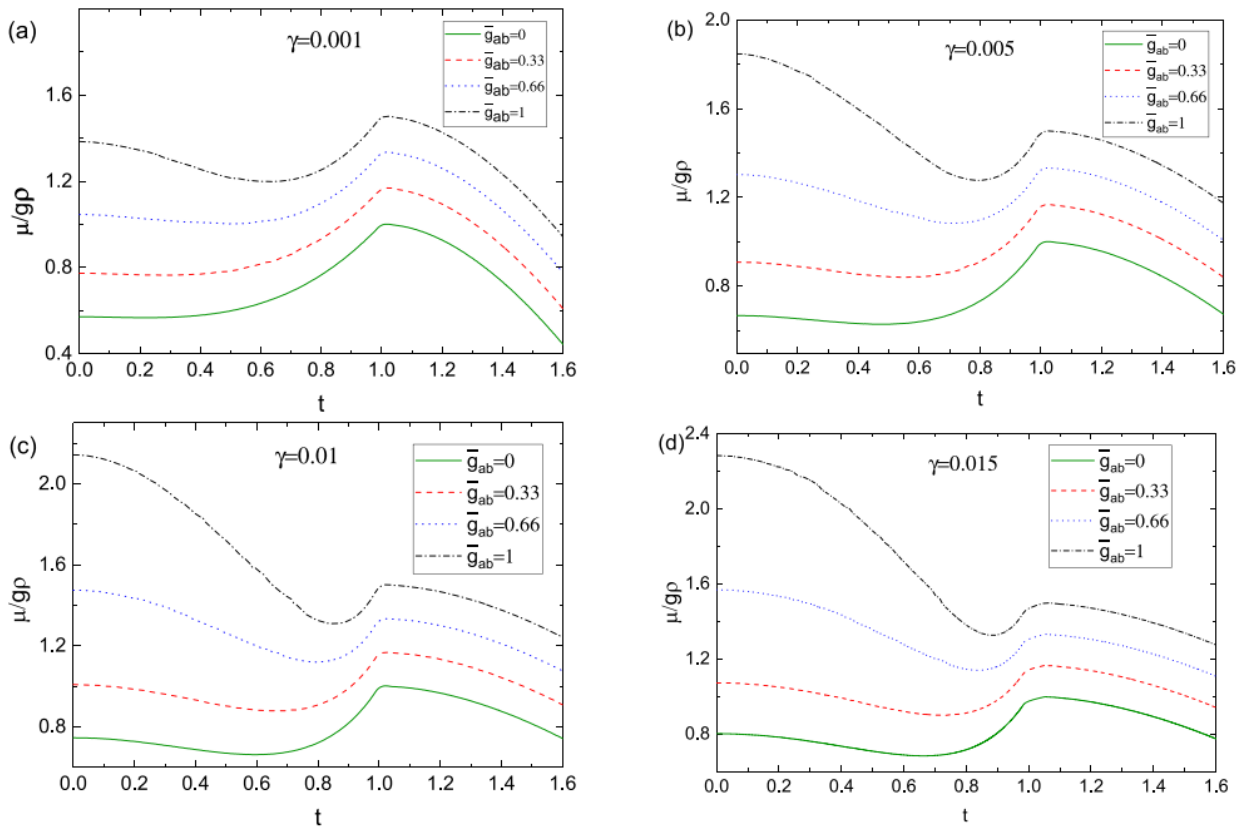


Рис. 3.5. Приведенный химический потенциал $\mu/g\rho$ во зависимости от $t = T/T_c$ для различных значений $\bar{g}_{ab}$ и γ

Выводы по третьей главе

Разработана самосогласованная теория среднего поля для бинарной однородной смеси двухкомпонентных Бозе-систем. Эта теория, будучи консервативной и бесщелевой, не накладывает ограничений на газовый параметр γ и, следовательно, справедлива для любых сильных взаимодействий. Теория удовлетворяет обобщенной теореме ГП и учитывает аномальные плотности σ_a , σ_b и σ_{ab} . Представленный подход является разновидностью самосогласованного приближения Хартри-Фока-Боголюбова и, следовательно, является наиболее общим приближением среднего поля. Поэтому в качестве частных случаев он включает в себя другие известные приближения среднего поля, такие как модель Шоно, квадратичное приближение и приближение Боголюбова. Для численного анализа рассмотрена сбалансированная симметричная конфигурация

двухкомпонентной смеси Бозе-газов. Получена фазовая диаграмма этой системы как при нулевой, так и при конечных температурах для произвольных газовых параметров. Фазовая диаграмма при нулевой температуре на плоскости (g_{ab}, γ) показывает, что система может оставаться стабильной и смешиваемой даже при $g_{ab}/g_{aa} > 1$ при правильном учете аномальных плотностей. Сравнивая эту фазовую диаграмму с диаграммой при конечной температуре (g_{ab} , γ , T), показано, что конечная температура может переводить двухкомпонентные БЭК в смешивающееся состояние. Этот вывод хорошо согласуется с работами Roy и др. [87; p.14], Ота и др. [88; p.7], Ши и др. [85; p.6]. Численные результаты также хорошо согласуются с экспериментальными работами [81; p.5, 82; p.16], хотя требуются новые экспериментальные данные для больших значений межкомпонентного взаимодействия и γ.

Увеличение области смешиваемости из-за правильного учета аномальных плотностей и температуры можно понять, если вспомнить, что эти характеристики учитывают существование квантовых и температурных флуктуаций. В рассматриваемой системе существуют различные конкурирующие факторы. С одной стороны, отталкивающие межкомпонентного взаимодействия пытаются разделить смесь. С другой стороны, сильные взаимодействия вызывают большие аномальные средние значения и большее количество несконденсированных частиц, что характеризует возрастание квантовых флуктуаций. Для смешивания благоприятны как квантовые, так и тепловые флуктуации, т.е. флуктуации облегчают процесс перемешивания. Поэтому система может быть несмешиваемой, когда флуктуации отсутствуют, но становится смешиваемой при наличии флуктуаций. В качестве примера влияния тепловых флуктуаций можно рассмотреть роль температуры в условиях термодинамической смешиваемости при слабых взаимодействиях, когда сравниваются свободные энергии смешанных и разделенных состояний. Учитывая, что разница в

энтропии между смешанным и разделенным состояниями обусловлена энтропией, получаем [106; p.41] условие смешиваемости как

$$g_{ab} - \sqrt{g_{aa}\ g_{bb}} < -\frac{2T}{\rho} \sum_i n_i \ln n_i \qquad \left(n_i \equiv \frac{N_i}{N}\right),$$

где ρ — средняя плотность смешанной системы.

Как видно, конечные температуры действительно облегчают смешивание, так что при нулевой температуре система может быть несмешиваемой, а при конечной температуре она может стать смешиваемой.

Определение дисперсии энергии, а также выделение точек неустойчивости, требует некоторого уточнения. Фактически для этой цели была использована функция Грина первого порядка. Однако, строго говоря, эти параметры должны быть связаны с полюсами полной взаимодействующей функции Грина, задаваемой уравнением Дайсона $\hat{G}^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}$, где $\hat{G}_0$ - "невзаимодействующая" функция Грина, а $\hat{\Sigma}$ - оператор собственной энергии [8; p.485]. В данном подходе $\hat{G}_0$ не совпадает с подходом идеального газа, но эффективно учитывает взаимодействие двух тел через вариационные параметры $[X_1 \ldots X_6]$..

В будущих исследованиях будет весьма интересно изучить несбалансированную двухкомпонентную Бозе-смесь, в которой также могут иметь место квазимагнитные переходы [88; p.5]. Более того, как недавно утверждали Найдон и Петров [116; p.21], при неравном межкомпонентном взаимодействии или неравных массах, смешанная фаза может образовывать пузыри с управляемым числом частиц. Это будет следующей задачей для применения нашей теории. При этом необходимо учесть, что в случае реальных систем в ловушке фазовое расслоение может быть подавлено в неоднородной системе за счет эффектов квантового давления [117; p.7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе результатов исследования, проведенного по теме диссертации на соискание ученой степени доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам «Критические свойства трехмерных оптических решеток и квантовых магнетиков при сверхнизких температурах», сделаны следующие выводы:

1. Разработаны приближение коллективной квантовой теории поля и приближение, основанное на теории вариационного возмущения для 3D оптических решеток при сверхнизких температурах. Показано, что основные уравнения этих двух приближений формально совпадают. Получена аналитическая оценка сдвига критической температуры фазового перехода в конденсированное состояние, обусловленная контактным взаимодействием, как в режиме слабого, так и сильного взаимодействий. Показано, что общее поведение фазовой диаграммы качественно хорошо согласуется с существующими экспериментальными и неэмпирическими квантовыми результатами Монте-Карло.

2. Разработанное приближение, основанное на вариационной пертурбативной теории применено для димеризованных квантовых магнитов со спиновой щелью, которые переходят в БЭК состояние магнитных квазичастиц (триплонов). Вычислены свободная энергию Ω и связанные с ней энтропия S, теплоемкость C_H, намагниченность M, а также магнитный параметр Грюнайзена Γ_H и получены явные выражения для этих величин в пределах $T \to T_c$ и $T \to 0$ соответственно. Показано, что вблизи критической температуры и теплоемкость, и параметр Грюнайзена имеют разрыв.

3. Показано, что для димеризованных квантовых магнитов со спиновой щелью с увеличением внешнего магнитного поля выше критической температуры фазового перехода в БЭК температура понижается, а ниже критической температуры повышается, что соответствует смене знака

магнитного параметра Грюнайзена Γ_H. Такое поведение ожидается для систем с квантовой критической точкой, управляемой магнитным полем.

4. Разработанный подход расширяется для однородной смеси двухкомпонентных Бозе-систем. Получен критерий смешиваемости, справедливый для произвольного газового параметра. Показано, что система может оставаться стабильной и смешиваемой даже при больших значениях константы межкомпонентного взаимодействия при правильном учете аномальных плотностей Получена фазовая диаграмма, сбалансированная симметричной конфигурацией двухкомпонентной смеси Бозе-газов как при нулевой, так и при конечных температурах для произвольных газовых параметров. Показано, что конечная температура может переводить двухкомпонентные БЭК в смешивающееся состояние.

5. Полученные результаты применены к смеси атомов с двумя сверхтонкими основными состояниями ^{23}Na для сравнения скоростей звука с экспериментом. Показано, что результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. Сделаны дальнейшие прогнозы по относительной скорости звука c_2/c_1 в зависимости от константы межкомпонентного взаимодействия для трех различных значений газового параметра.

Посвящается памяти **д.ф.-м.н. Канокова Зокира**, который оказал неоценимую поддержку на ранних этапах исследования. Его имя всегда буду вспоминать с глубокой благодарностью и восхищением. Я также хотел бы выразить сердечную признательность моему научному руководителю д.ф.-**м.н. А.М. Рахимову**, чье руководство и наставничество сыграли важную роль в формировании моего академического и личного развития. Наконец, я хотел бы поблагодарить **своих родителей** за их **любовь** и **поддержку** на протяжении всего моего академического пути. Эта диссертация является данью уважения их коллективному вкладу, и я всегда благодарен за их влияние на мою жизнь.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bloch I., Zoller P. Ultracold Bosonic and Fermionic Gases. Contemporary Concepts of Condensed Matter Science / edited by K. Levin, A. L. Fetter, and D. M. Stamper-Kurn. – Elsevier (UK), 2012. –Vol. 5. – pp. 121–156.
2. Guidoni L., Verkerk P. Optical lattices: cold atoms ordered by light // J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. – IOP Publishing Ltd (UK), 1999. – Vol. 1. – id R23. – pp. 1464-4266.
3. Schaus P. Crystallization in Ising quantum magnets // Science – AAAS (US), 2015. – Vol. 347. – id.6229. – pp. 1455-1458.
4. Morsch O., Oberthaler M. Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices // Rev. Mod. Phys. – American Physical Society (USA), 2006. – Vol. 78. – id. 179. – pp. 428-434.
5. Raussendorf R., Browne D.E., Briegel H.J. Measurement-based quantum computation on cluster states // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2003. – Vol. 68. – id.022312. – pp. 32.
6. Capogrosso-Sansone B., Prokofev N.V., Svistunov B.V. Phase diagram and thermodynamics of the three-dimensional Bose-Hubbard model // Phys. Rev. B. – American Physical Society (USA), 2007. – Vol. 75. – id. 134302. – pp. 11.
7. Trotzky S., Pollet L., Gerbier F., Schnorrberger U., Bloch I., Prokofev N.V., Svistunov B., Troyer M. Suppression of the critical temperature for superfluidity near the Mott transition // Nature Phys. – Nature Portfolio (UK), 2010. – Vol. 6. – pp. 998–1004.
8. Stoof H.T.C., Gubbels K. B., Dickerscheid D.B.M. Ultracold Quantum Fields // Theoretical and Mathematical Physics. – Springer Nature (Switzerland), 2009. – pp.485
9. Lewenstein M., Sanpera A., Ahufinger V. Ultracold atoms in optical lattices: Simulating quantum many-body systems. – Oxford University Press (UK), 2012. – 496 pp.

10. Ueda M. Fundamentals and new frontiers of Bose- Einstein condensation. – World Scientific (Singapore), 2010. – 368 p.
11. Freericks J.K., Krishnamurthy H.R., Yasuyuki Kato, Naoki Kawashima, Nandini Trivedi. Strong-coupling expansion for the momentum distribution of the Bose-Hubbard model with benchmarking against exact numerical results // Phys. Rev. A. - American Physical Society (USA), 2009. – Vol. 79. – id. 053631. – pp.1-22.
12. Dos Santos F.E.A., Pelster A. Quantum phase diagram of bosons in optical lattices // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2009. – Vol. 79. – id. 013614. – p. 12.
13. Dutta A., Trefzger C., Sengupta K. Projection operator approach to the Bose-Hubbard model // Phys. Rev. B. – American Physical Society (USA), 2012. – Vol. 86. – id. 085140. – p.8.
14. Buonsante P., Vezzani A. Phase diagram for ultracold bosons in optical lattices and superlattices // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2004. – Vol. **70**. – id. 033608. – p. 8.
15. Byczuk K., Vollhardt D. Correlated bosons on a lattice: Dynamical mean-field theory for Bose-Einstein condensed and normal phases// Phys. Rev. B. – American Physical Society (USA), 2008. – Vol. 77. – id. 235106-17.
16. Anders P., et al. Dynamical mean-field theory for bosons // New J. Phys. - IOP Publishing (UK), 2011. – Vol.13. – id.075013. – pp. 1367-2630.
17. Rancon A., Dupuis N. Thermodynamics of a Bose gas near the superfluid–Mott-insulator transition // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2012. – Vol. 86. – id. 043624-6.
18. D. van Oosten, P. van der Straten, Stoof H.T.C. Quantum phases in an optical lattice // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2001. – Vol.63. – id. 053601-11.
19. Kleinert H., Narzikulov Z., Rakhimov A. Quantum phase transitions in optical lattices beyond the Bogoliubov approximation // Physical Review A. – American Physical Society (USA), 2012. – Vol. 85. – id. 063602. – 11 p.

20. Cooper F., Mihaila B., Dawson J. F., Chien C.-C., Timmermans E. Auxiliary-field approach to dilute Bose gases with tunable interactions // Physical Review A. – American Physical Society (USA), 2011. – Vol. 83. – pp. 96-110.
21. Mihaila B., Cooper F., Dawson J.F., Chien C.C., and Timmermans E. Analytical limits for cold-atom Bose gases with tunable interactions // Physical Review A. – American Physical Society (USA), 2011. – Vol. 84. – id. 023603-21.
22. Baym G., Blaizot J.-P., Holzmann M., Laloe F., Vautherin D. The Transition Temperature of the Dilute Interacting Bose Gas //Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 1999. – Vol.83. – id. 1703-6.
23. Kleinert H. Five-Loop Critical Temperature Shift in Weakly Interacting Homogeneous Bose–Einstein Condensate // Mod. Phys. Lett. B. – World Scientific (Singapore), 2003. – Vol. 17. – pp. 1011–1020.
24. Dawson J.F., Cooper F., Chien C.-C., Mihaila B. Leading-order auxiliary-field theory of the Bose-Hubbard model // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2013. – Vol. 88. – id.023607. – p. 10.
25. Kleinert H. Collective Classical and Quantum Fields. – World Scientific (Singapore), 2013. – 487 p.
26. Kleinert H. Higher Effective Action for Bose Systems//Fortschr. Phys. – 1982. – Vol.30. – pp. 187-232.
27. Feynman R.P., Kleinert H. Effective classical partition functions //Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 1986. – Vol.34. – pp. 5080-5084.
28. Kleinert H., Schulte-Frohlinde V. Critical Properties of ϕ^4-Theories. – World Scientific (Singapore), 2001. – 489 p.
29. Yukalov V.I., Yukalova E.P., Bagnato V.S. Bose systems in spatially random or time-varying potentials // Laser Physics. – IOP Publishing (UK), 2009. – Vol.19. – No.1. – pp. 686–699.
30. Danshita I., Naidon P. Bose-Hubbard ground state: Extended Bogoliubov and variational methods compared with time-evolving block decimation // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2009. – Vol.79. – id.043601-7.

31. Kleinert H., Narzikulov Z., Rakhimov A. Phase transitions in three-dimensional bosonic systems in optical lattices // J. Stat. Mech. – IOP Publishing (UK), 2014. – P01003 – pp. 1742-5468.
32. Dickhoff W.H., Van Neck D. Many-Body Theory Exposed. – World Scientific (Singapore), 2005. – 521 p.
33. Andersen J. Theory of the weakly interacting Bose gas // Reviews of Modern Physics. – American Physical Society (USA), 2004. – Vol. 76. – pp. 599-639.
34. Kleinert H. Hubbard-Stratonovich Transformation: Successes, Failure, and Cure// EJTP. – Aracne Editrice (Italy), 2011. – Vol. 8. – No. 2557. – pp. 57–64.
35. Yukalov V.I., Kleinert H. Gapless Hartree-Fock-Bogoliubov approximation for Bose gases // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2006. – Vol. 73. – id.063612. – p.9.
36. Yukalov V.I. Self-consistent approach for Bose-condensed atoms in optical lattices // Condensed Matter Physics. – MDPI (Switzerland), 2013. – Vol. 16. – No. 2. – id.23002. – pp. 1-16.
37. Pilati S., Giorgini S., Prokof'ev N. Critical Temperature of Interacting Bose Gases in Two and Three Dimensions // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2008. – Vol. 100. – id. 140405-11.
38. Shi H., Griffin A. Finite-temperature excitations in a dilute Bose-condensed gas // Physics Reports. – Elsevier (Netherlands), 1998. – Vol. 304. – pp.1-87.
39. Debye P. Einige Bemerkungen zur Magnetisierung bei tiefer Temperatur // Ann. Phys. – Elsevier (Netherland), 1926. – Vol.386. – p. 1154-1160.
40. Giauque W.F. A thermodynamic treatment of certain magnetic effects. a proposed method of producing temperatures considerably below 1° absolute // J. Am. Chem. Soc. – ACS (USA), 1927. – Vol.49. – No.8. – pp.1864–1870.
41. Wolf B., Honecker A., Hofstetter W., Tutsch U., Lang M. Cooling through quantum criticality and many-body effects in condensed matter and cold gases // Int. J. Mod. Phys. B. – World Scientific (UK), 2014. – Vol.28. – id. 1430017. – p. 35.

42. Zhu L., Garst M., Rosch A., Si Q. Universally Diverging Grüneisen Parameter and the Magnetocaloric Effect Close to Quantum Critical Points // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2003. – Vol. 91. – id. 066404 -4.
43. Garst M., Rosch A. Sign change of the Grüneisen parameter and magnetocaloric effect near quantum critical points // Phys. Rev. B. – American Physical Society (USA), 2005. – Vol.72. – id.205129-10.
44. Tokiwa Y., Gegenwart P. High-resolution alternating-field technique to determine the magnetocaloric effect of metals down to very low temperatures // Rev. Sci. Instrum. – AIP (USA), 2011. – Vol.82. – id.013905-4.
45. Gegenwart P. Classification of materials with divergent magnetic Grüneisen parameter // Philos. Mag. – Taylor & Francis Group (UK), 2017. – Vol. 97. – id.3415. – pp. 3415-3427.
46. Gegenwart P. Grüneisen parameter studies on heavy fermion quantum criticality // Rep. Prog. Phys. – IOP Publishing Ltd. (UK), 2016. – Vol. 79. – id.114502. – p. 11.
47. Zapf V., Jaime M., Batista C.D. Bose-Einstein condensation in quantum magnets // Reviews of Modern Physics. – American Physical Society (USA), 2014. – Vol. 86. – pp. 563-616.
48. Giamarchi T., Rüegg Ch., Tchernyshyov O. Bose-Einstein Condensation in Magnetic Insulators // Nature Physics. – Springer Nature (Switzerland), 2008. – Vol. 4. – pp. 198-204.
49. Weickert F., Küchler R., Steppke A., Pedrero L., Nicklas M., Brando M., Steglich F., Jaime M., Zapf V.S., Paduan-Filho A., Al-Hassanieh K.A., Batista C.D., Sengupta P. Low-temperature thermodynamic properties near the field-induced quantum critical point in NiCl2-4SC(NH2)2 // Phys. Rev. B. – American Physical Society (USA), 2012. – Vol.85. – id.184408. – p. 27.
50. Nikuni T., Oshikawa M., Oosawa A., Tanaka H. Bose-Einstein Condensation of Dilute Magnons in $TlCuCl_3$ // Physical Review Letters. – American Physical Society (USA), 2000. – Vol. 84. – pp. 58-68.
51. Rakhimov A., Sherman E.Ya., Kim C.K. High-field instability of a field-

induced triplon Bose-Einstein condensate // Physical Review B. – American Physical Society (USA), 2010. – Vol. 81. – id. 020407. – 4 p.

52. Rakhimov A., Mardonov Sh., Sherman E. Ya., Schilling A. The effects of disorder in dimerized quantum magnets in mean field approximations // New Journal of Physics. – IOP Publishing (United Kingdom), 2012. – Vol. 14. – id. 113010. – 16 p.
53. Khudoyberdiev A., Rakhimov A., Schilling A. Bose-Einstein condensation of triplons with a weakly broken U(1) symmetry // New Journal of Physics. – IOP Publishing (United Kingdom), 2017. – Vol. 19. – id. 113002. – 18 p.
54. Matsumoto M., Normand B., Rice T. M., Sigrist M. Field- and pressure-induced magnetic quantum phase transitions in $TlCuCl_3$ // Physical Review B. – American Physical Society (USA), 2004. – Vol. 69. – id.054423. – 20 p.
55. Misguich G., Oshikawa M. Bose-Einstein Condensation of Magnons in $TlCuCl_3$: Phase Diagram and Specific Heat from a Self-consistent Hartree-Fock Calculation with a Realistic Dispersion Relation // Journal of the Physical Society of Japan. – The Physical Society of Japan (JPS) (Japan), 2004. – Vol. 73. – pp. 3429-3434.
56. Sherman E.Ya., Lemmens P., Busse B., Oosawa A., Tanaka H. Sound Attenuation Study on the Bose-Einstein Condensation of Magnons in $TlCuCl_3$ // Physical Review Letters. – American Physical Society (USA), 2003. – Vol. 91. – id. 057201. – 4 p.
57. Yamamoto D., Marmorini G., Danshita I. Quantum Phase Diagram of the Triangular-Lattice XXZ Model in a Magnetic Field // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2014. – Vol.112. – id.127203. – p.12.
58. Rakhimov A., Kim C.K., Kim S.-H., Yee J. H. Stability of the homogeneous Bose-Einstein condensate at large gas parameter // Physical Review A. – American Physical Society (USA), 2008. – Vol. 77. – id. 033626. – 9 p.
59. Rakhimov A., Gazizulina A., Narzikulov Z., Schilling A., Sherman E. Ya. Magnetocaloric effect and Grüneisen parameter of quantum magnets with a spin gap // Physical Review B. – American Physical Society (USA), 2018. –

Vol. 98. – id. 144416. – 12 p.

60. Yamada F., Ono T., Tanaka H., Misguich G., Oshikawa M., Sakakibara T. Magnetic-Field induced Bose-Einstein condensation of magnons and critical Behavior in interacting spin dimer system $TlCuCl_3$ // Journal of Physical Society of Japan. – The Physical Society of Japan (JPS) (Japan), 2008. – Vol. 77. – id.13701 – 4 p.
61. Hugenholtz N. M., Pines D. Ground-state energy and excitation spectrum of a System of interacting Bosons // Physical Review. – American Physical Society (USA), 1959. – Vol. 116. – pp. 489-506.
62. Haugset T., Haugerud H., Ravndal F. Thermodynamics of a weakly interacting Bose-Einstein gas // Annals of Physics. – Elsevier (Netherland), 1998. – Vol. 266. – pp. 27-62.
63. Dell'Amore R., Schilling A., Krämer K. U(1) symmetry breaking and violated axial symmetry in $TlCuCl_3$ and other insulating spin systems // Physical Review B. – American Physical Society (USA), 2009. – Vol. 79. – id. 014438. – p. 6.
64. Robinson J.E. Note on the Bose-Einstein Integral Functions // Phys. Rev. – American Physical Society (USA), 1951. – Vol.ol. 83. – pp.678 -694.
65. Pitaevskii L., Stringari S. Bose-Einstein Condensation and Superfluidity. – Oxford University Press (UK), 2016. – 571 p.
66. Fetter A., Walecka J. Quantum Theory of Many Particle System. – Dover Publications, Inc. (Mineola, NY), 2003. – 601 p.
67. Rakhimov A., Askerzade I.N. Thermodynamics of noninteracting bosonic gases in cubic optical lattices versus ideal homogeneous Bose gases //Int. J. Mod. Phys. B. - World Scientific (Singapore), 2015. –Vol. 29. – id.1550123 - pp. 25; Rakhimov A., Askerzade I.N. Critical temperature of noninteracting bosonic gases in cubic optical lattices at arbitrary integer fillings // Phys. Rev. E. – APS (USA), 2014. –Vol. 90. – id. 032124-22.
68. Huang K. Statistical Mechanics. – John Wiley & Sons: Massachusetts Institute of Technology (USA), 1987. – 506 p.

69. Yao Z., K.P.C. da Costa, Kiselev M., Prokof'ev N. Critical Exponents of the Superfluid–Bose-Glass Transition in Three Dimensions // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2014. – Vol. 112. – id. 225301-16.
70. Aczel A.A., Kohama Y., Marcenat C., Weickert F., Jaime M., Ayala-Valenzuela O.E., McDonald R.D., Selesnic S.D., Dabkowska H.A., Luke G.M. Field-Induced Bose-Einstein Condensation of Triplons up to 8 K in Sr3Cr2O8 // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2009. – Vol. 103, 207203-4.
71. Kofu M., Ueda H., Nojiri H., Oshima Y., Zenmoto T., Rule K.C., Gerischer S., Lake B., Batista C.D., Ueda Y., Lee S.-H. Magnetic-Field Induced Phase Transitions in a Weakly Coupled s=1/2 Quantum Spin Dimer System Ba3Cr2O8 // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2009. – Vol. 102. – id. 177204-11.
72. Wang Z., Quintero-Castro D. L., Zherlitsyn S., Yasin S., Skourski Y., Islam A.T.M.N., Lake B., Deisenhofer J., Loidl A. Field-Induced Magnonic Liquid in the 3D Spin-Dimerized Antiferromagnet Sr3Cr2O8 // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2016. – Vol. 116. – 147201-34.
73. Tanaka H., Yamada F., Ono T., Sakakibara T., Uwatoko Y., Oosawa A., Kakurai K., Goto K. Magnetic-field induced quantum phase transition and critical behavior in a gapped spin system TlCuCl3 // J. Magn. Magn. Mater. – Elsevier (Netherland), 2007. – Vol. 310. – id. 1343. – pp. 1352-1354.
74. Schilling A., Reibelt M. Low-temperature differential-thermal analysis to measure variations in entropy // Rev. Sci. Instrum. AIP Publishing (USA), 2007. – Vol. 78. – id. 033904-7.
75. Wang Z. Infrared phonons and specific heat in the gapped quantum magnet Ba3Cr2O8 // Phys. Rev. B. – American Physical Society (USA), 2012. – Vol.85. – id. 224304-8.
76. Myatt C.J., Burt E.A., Ghrist R.W., Cornell E. A., Wieman C.E. roduction of Two Overlapping Bose-Einstein Condensates by Sympathetic Cooling // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 1997. – Vol.78. – pp. 586-589.

77. Hall D.S., Matthews M.R., Ensher J.R., Wieman C.E., Cornell E.A. Dynamics of Component Separation in a Binary Mixture of Bose-Einstein Condensates // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 1998. – Vol. 81. – pp. 1539-1544.
78. Petrov D.S. Quantum Mechanical Stabilization of a Collapsing Bose-Bose Mixture // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2015. – Vol. 115. – id. 155302-11.
79. Timmermans E. Phase Separation of Bose-Einstein Condensates // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 1998. – Vol. 81. – pp. 5718-5734.
80. Papp S. B., Pino J.M., Wild R.J., Ronen S., Weiman C.E., Jin D.S., Cornell E.A. Bragg Spectroscopy of a Strongly Interacting 85Rb Bose-Einstein Condensate // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2008. – Vol. 101. – id. 135301-4.
81. Kim J. H., Hong D., Shin Y. Observation of two sound modes in a binary superfluid gas // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2020. – Vol.101. – id. 061601(R)-5.
82. Lee K.L., Jørgensen N.B., Wacker L.J., Skou M.G., Skalmstang K.T., Arlt J. J., Proukakis N.P. Time-of-flight expansion of binary Bose–Einstein condensates at finite temperature // New J. Phys. – IOP Publishing (UK), 2018. – Vol. 20. – id. 053004-16.
83. Cabrera C.R., Tanzi L., Sanz J., Naylor B., Thomas P., Cheiney P., Tarruell L. Quantum liquid droplets in a mixture of Bose-Einstein condensates // Science. – AAAS (US), 2018. – Vol. 359. – pp. 301-304.
84. Fava E., Bienaimé T., Mordini C., Colzi G., Qu C., Stringari S., Lamporesi G., Ferrari G. Observation of Spin Superfluidity in a Bose Gas Mixture // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2018. – Vol. 120. – id. 170401-13.
85. Shi H., Zheng W.M., Chui S.T. Phase separation of Bose gases at finite temperature // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2000. – Vol. 61. – id. 063613-6.

86. Schaeybroeck B.V. Weakly interacting Bose mixtures at finite temperature // Physica A. – Elsevier (Netherland), 2013. – Vol. 392. – pp. 3806-3811.
87. Roy A., Angom D. Thermal suppression of phase separation in condensate mixtures // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2015. – Vol. 92. – id. 011601(R)-14.
88. Ota M., Giorgini S. Thermodynamics of dilute Bose gases: Beyond mean-field theory for binary mixtures of Bose-Einstein condensates // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2020.– Vol. 102. – id. 063303-5.
89. Boudjemâa A. Quantum and thermal fluctuations in two-component Bose gases // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2018. – Vol. 97. – id. 033627-7.
90. Watabe S. Hugenholtz-Pines theorem for multicomponent Bose-Einstein condensates // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2021. – Vol. 103. – id. 053307-5.
91. Yukalov V.I. Representative statistical ensembles for Bose systems with broken gauge symmetry// Ann.Phys. – (N.Y.), 2008. – Vol. 323. – pp. 461-499.
92. Rakhimov A., Abdurakhmonov T., Tanatar B. Critical behavior of Tan's contact for bosonic systems with a fixed chemical potential // J. Phys.: Condens. Matter. – 2021. – Vol. 33. – id. 465401-12.
93. Rakhimov A., Khudoyberdiev A., Rani L., Tanatar B. Spin-gapped magnets with weak anisotropies I: Constraints on the phase of the condensate wave function // Annals of Physics. – Elsevier (Netherland), 2021. – Vol. 424. – id.168361. – 23 p.
94. Rakhimov A., Khudoyberdiev A., Tanatar B. Effects of exchange and weak Dzyaloshinsky-Moriya anisotropies on thermodynamic characteristics of spin-gapped magnets // International Journal of Modern Physics B. – World Scientific (Singapore), 2021. – Vol. 35. – id.2150223. – 23 p.
95. N. Navon, S. Piatecki, G. Gunter, B. Rem. T. Nguyen, Dynamics and Thermodynamics of the Low-Temperature Strongly Interacting Bose Gas // Phys. Rev. Lett. - American Physical Society (USA), 2011. – Vol. 107. – id.

135301-16.
96. Lopes R., Eigen C., Navon N., Clement D., Smith R. P., Hadzibabic Z. Quantum depletion of a Homogeneous Bose-Einstein condensate // Physical Review B. – American Physical Society (USA), 2017. – Vol. 119. – id. 190404-4.
97. Nepomnyashchii Y.A. The microscopic theory of a mixture of superfluid liquids // J. Exp. Theor. Phys. – 1976. –Vol. 43. – No. 559. – pp.1070-1080.
98. Pinto M.B., Ramos R.O., de Souza Cruz F.F. Effective potential and thermodynamics for a coupled two-field Bose-gas model //Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2006. – Vol. 74. – id. 033618-7.
99. Stevenson P.M. Optimized perturbation theory// Phys. Rev. D. – American Physical Society (USA), 1981. – Vol. 23. – pp.2916-2937.
100. Rakhimov A., Yee J.H. Optimized post Gaussian approximation in the background field method // International Journal of Modern Physics A. – World Scientific (Singapore), 2004. – Vol. 19. – pp. 1589-1607.
101. Yukalov V.I. Interplay between Approximation Theory and Renormalization Group // Phys. Part. Nucl. – Springer (USA), 2019. – Vol. 50. – pp.141-209.
102. Yukalov V.I., Yukalova E.P. From Asymptotic Series to Self-Similar Approximants // Physics. – MPDI (Switzerland), 2021. – vol. 3. – pp.829-878.
103. Yukalov V.I. Basics of Bose-Einstein Condensation // Physics of Particles and Nuclei. – Springer Nature (Switzerland), 2011. – Vol. 42. – pp. 460-513.
104. Hohenberg P.C., Martin P.C. Microscopic theory of superfluid helium// Annals of Physics. – Elsevier (Netherland), 1965. – Vol. 34. – pp. 291-359.
105. Stevenson P.M. Gaussian effective potential. II. $\lambda\varphi 4$ field theory // Phys. Rev. D. – American Physical Society (USA), 1985. – Vol. 32. – pp.1389-1395.
106. Yukalov V.I. Theory of cold atoms: basics of quantum statistics // Laser Physics. – Springer Nature (Switzerland), 2013. – Vol. 23. – id.062001-41.
107. Rakhimov A., Abdurakhmonov T., Narzikulov Z., Yukalov V.I. Self-consistent theory of a homogeneous binary Bose mixture with strong repulsive interspecies interaction // Physical Review A. – American Physical Society

(USA), 2022. – Vol. 106. –id. 033301-15.

108. Stancu I., Stevenson P. M. Second-order corrections to the Gaussian effective potential of $\lambda\phi^4$ theory // Physical Review D. – American Physical Society (USA), 1990. – Vol. 42. – pp. 2710-2725.
109. Wen L., Liu W.M., Cai Y.Y., Zhang J.M., Hu J.P. Controlling phase separation of a two-component Bose-Einstein condensate by confinement // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2012. – Vol. 85. – id. 043602-8.
110. Kumar R.K., Muruganandam P., Tomio L., Gammal A, Miscibility in coupled dipolar and non-dipolar Bose–Einstein condensates // J. Phys. Commun. – IOP Science, 2017. – Vol. 1. – id. 035012-19.
111. Shohno N. Low-Temperature Properties of the Interacting Bose System // Prog. Theor. Phys. – 1964. – Vol. 31. – pp.553–574.
112. Gavoret J., Nozi‘eres P. Structure of the perturbation expansion for the bose liquid at zero temperature // Annals of Physics. – Elsevier (Netherland), 1964. – Vol. 28. – pp. 349-399.
113. Yukalov V.I. Stability and stratification of a quantum liquid mixture // Acta Phys. Pol. A. – 1980. – Vol. 57. –pp. 295-314.
114. Larsen D. M. Binary mixtures of dilute bose gases with repulsive interactions at low temperature // Ann. Phys. – Elsevier (Netherland), 1963. – Vol. 24. – pp.89-101.
115. Lee T. D., Huang K., Yang C.N. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Bose System of Hard Spheres and Its Low-Temperature Properties// Phys. Rev. – American Physical Society (USA), 1957. – Vol. 136. – pp.1135-1145.
116. Naidon P., Petrov D. S. Mixed Bubbles in Bose-Bose Mixtures // Phys. Rev. Lett. – American Physical Society (USA), 2021. – Vol. 126. – id.115301-21.
117. Pattinson R.W., Billam T. P., Gardiner S.A., McCarron D.J., Cho H.W., Cornish S.L., Parker N.G., Proukakis N.P. Equilibrium solutions for immiscible two-species Bose-Einstein condensates in perturbed harmonic traps // Phys. Rev. A. – American Physical Society (USA), 2013. – Vol. 87. – id. 013625-7.

ПЕРЕЧЕНЬ ОПРЕДЕЛЕНИЙ, ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ

БЭК - конденсация Бозе-Эйнштейна

LOAF - *Leading-order auxiliary field theory*

КФП - квантовый фазовый переход

MI - Моттовский диэлектрик

SF - Сверхтекучий

КМК - квантовый Монте-Карло

B-DMFT - Бозонная динамическая теория среднего поля

HFP - Хартри-Фок-Попов

HFB - Хартри-Фок-Боголюбов

МКЭ - магнетокалорический эффект

ККТ - квантовая критическая точка

ТГП - Теорема Гугенгольца-Пайнса

Приложение А

Гамильтониан Бозе-Хаббарда в представлении Ванье

Здесь показывается формальная эквивалентность между гамильтонианом Бозе-Хаббарда (1.1) в представлении Ванье и стандартным гамильтонианом для однородных разреженных атомных газов

$$H = \int dr\Psi^{\dagger}(r)\left[-\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} - \mu\right]\Psi(r) + \frac{g}{2}\int dr \qquad (A.1)$$

где g – константа контактного взаимодействия. Используя замены, перечисленные в Таблице **А1.2**, получим для Ω и уравнений экстремальности для разреженных атомных газов в сравнении с оптической решеткой. Разумеется, в разреженных атомных газах подразумевается соответствующая процедура перенормировки.

Таблица А1.2

Формальное подобие между гамильтонианами (1.1) и (А.1)

Величина	Однородный атомный газ	3D модель Бозе-Хаббарда	Комментарий
Объем	V	N_s	N_s – число состояний
Плотность	$\rho = N/V$	$\nu = N/N_s$	ν – фактор заполнения
Начальная дисперсия	$\varepsilon(q) = q^2/2\,m$	$\varepsilon(q) = 2J\sum_{\alpha=1}^{3}(1 - cos\pi q_\alpha)$	Нет дополнительных магнитных ловушек
Химический потенциал	μ	$\mu + Jz_0$	$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_T$
Суммирование по импульсам	$\frac{1}{V}\sum_q f(\varepsilon(q)) = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty q^2 dq f(\varepsilon(q))$	$\frac{1}{N_s}\sum_q f(\varepsilon(q)) = \int_0^1 dq_1 dq_2 dq_3 f(\varepsilon(q))$	$d = 3$
Нормировка плотности	$\rho_0 + \rho_1 = \rho$	$n_0 + n_1 = 1$	Без разупорядочения

Приложение В

Производные от дисперсионного соотношения

Здесь приводится явный вид выражений $E'_{k,T} = \frac{dE_k}{dT}$ и $E'_{k,\mu} = \frac{dE_k}{d\mu}$, которые нужны для вычисления энтропии и теплоемкости в уравнениях (2.20) -(2.22). Далее представляем подробности низкотемпературного расширения, использованного в разд. 2.4. В нормальной фазе, когда $E_k = \omega_k = \varepsilon_k - \mu + 2U\rho$, плотность частиц задается

$$\rho = \sum_k f_B(\omega_k) \tag{B.1}$$

где $f_B(x) = \frac{1}{e^{\beta x}-1}$. Ясно, что

$$\frac{d\omega_k}{dT} = 2U\frac{d\rho}{dT} \tag{B.2}$$

которая не зависит от импульса k. Дифференцируя обе стороны уравнения (B.1) по T и решив относительно $\frac{dp}{dT}$, получим

$$\frac{d\rho}{dT} = \frac{\beta S_1}{2S_2 - 1}, S_1 = -\beta \sum_k \omega_k f_B^2(\omega_k) e^{\omega_k \beta}, S_2 = -U\beta \sum_k f_B^2(\omega_k) e^{\omega_k \beta}. \tag{B.3}$$

Производная по μ, следовательно, получится

$$\frac{d\omega_k}{d\mu} = 2U\frac{d\rho}{d\mu} - 1, \frac{d\rho}{d\mu} = \frac{S_2}{U(2S_2 - 1)}. \tag{B.4}$$

В конденсированной фазе, $T < T_c$, $E_k = E_k = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + 2\Delta)}$, и, таким образом имеем

$$\frac{dE_k}{dT} = \frac{\varepsilon_k}{E_k}\Delta'_T, \quad \frac{dE_k}{d\mu} = \frac{\varepsilon_k}{E_k}\Delta'_\mu, \qquad \frac{d\rho}{dT} = \frac{\Delta'_T}{2U}. \tag{B.5}$$

Чтобы получить, к примеру, Δ'_T нужно продифференцировать обе стороны уравнения (2.31) по T и решить их относительно Δ'_T.

В результате получим

$$\Delta'_T = \frac{d\Delta}{dT} = \frac{US_4}{2T(2S_5 + 1)}, \qquad \Delta'_\mu = \frac{d\Delta}{d\mu} = \frac{1}{2S_5 + 1},$$

$$S_4 = \sum_k W'_k(\varepsilon_k + 2\Delta), \qquad S_5 = U\sum_k \frac{4W_k + E_k W'_k}{4E_k}, \tag{B.6}$$

$$W_k' = \beta(1 - 4W_k^2), W_k = \frac{1}{2} + f_B(E_k)$$

Ниже приведен подробный вывод низкотемпературного разложения. Для этой цели воспользуемся тем же методом что и в главе II и начнем с ρ_1. Уравнение (2.33) можно переписать в виде

$$\rho_1 = \sum_q \frac{\varepsilon_q + \Delta}{E_q(\exp(E_q\beta) - 1)} + \rho_1(0), \tag{B.7}$$

и часть, которая зависит от T будет

$$I_1 = \sum_q \frac{\varepsilon_q + \Delta}{E_q(\exp(E_q\beta) - 1)} = \frac{1}{4mc}\int_0^{Q_0} dq \frac{q(q^2\pi^2 + 2m^2c^2)}{\exp(\pi c q\beta) - 1}. \tag{B.8}$$

Разлагая по малым T получим

$$I_1 = \frac{mT^2}{12c} + \frac{\pi^2 T^4}{60mc^5} + O(z), \tag{B.9}$$

где $z = \exp\left(-\frac{Q_0 c\pi}{T}\right)$. Следовательно,

$$\rho_1(T) = \rho_1(0) + \frac{\tilde{T}^2}{12\gamma} + O(\tilde{T}^4), \tag{B.10}$$

здесь $\gamma = cm$. Аналогичным образом можно оценить низкотемпературное разложение для Δ'_T .Интегрируя выражение $\rho'_T = \frac{\Delta'_T}{2U}$ по T и используя уравнение (2.43) можно найти низкотемпературное разложение для полной плотности триплонов в виде

$$\rho_1(T) = \rho_1(0) - \frac{\alpha_1}{4U\gamma m}\tilde{T}^2 + O(\tilde{T}^4). \tag{B.11}$$

Из предыдущих двух уравнений для плотности конденсированной части находим

$$\rho_0(T) = \rho(T) - \rho_1(T) = \rho_0(0) - \frac{3\alpha_1 + Um}{12Um\gamma}\tilde{T}^2 + O(\tilde{T}^4). \tag{B.12}$$

Наконец, исключая Δ из уравнения (2.38) получим низкотемпературное разложение для аномальной плотности

$$\sigma(T) = \sigma(0) + \frac{Um - 3\alpha_1}{12Um\gamma}\tilde{T}^2 + O(\tilde{T}^4). \tag{B.13}$$