

11,12

Особенности фазовой диаграммы полужестких бозонов на квадратной решетке

© В.В. Конев, Ю.Д. Панов

Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия

E-mail: vitaliy.konev@urfu.ru

Поступила в Редакцию 9 апреля 2021 г.

В окончательной редакции 9 апреля 2021 г.

Принята к публикации 19 апреля 2021 г.

Исследовались фазовые диаграммы системы заряженных „полужестких“ (semi-hard-core) бозонов в приближении среднего поля. Показано, что увеличение параметра локальных корреляций приводит к трансформации фазовой диаграммы системы от вида, характерного для „жестких“ (hard-core) бозонов, к предельному виду с параболической зависимостью критической температуры зарядового упорядочения от концентрации бозонов. Эволюция между этими предельными случаями зависит от соотношения между параметрами модели и сопровождается разнообразными эффектами, такими как смена типа фазового перехода, появление новых переходов типа порядок–порядок, появление новых критических точек.

Ключевые слова: среднее поле, полужесткие бозоны, критическая точка, фазовая диаграмма.

DOI: 10.21883/FTT.2021.09.51266.27H

1. Введение

Интерес к моделям „жестких“ (hard-core) или „полужестких“ (semi-hard-core) бозонов [1] в последние годы возрос благодаря экспериментальному обнаружению конкуренции зарядового упорядочения и сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках [2] и реализации холодных атомов на оптической решетке [3]. В работе [4] смогли наблюдать относительно долгоживущее связанное состояние двух бозонов на оптической решетке. Это делает актуальным рассмотрение моделей с парным переносом бозонов, так как он перестал быть объектом чисто теоретических построений. В литературе можно найти различные варианты [5–7] этих моделей. В работе [7], в частности, получена фазовая диаграмма модели „полужестких“ бозонов с учетом двухбозонного переноса и локальных корреляций. Однако крайне мало уделено внимания модели без однобозонного переноса [8].

В настоящей работе рассмотрена система заряженных бозонов с возможным заполнением на узле $n = 0, 1, 2$ на плоской квадратной решетке. В рамках псевдоспинового формализма [9] гамильтониан системы может быть записан с использованием оператора псевдоспина $S = 1$ в следующем виде [10,11]:

$$H = \Delta \sum_i S_{iz}^2 + V \sum_{(i,j)} S_{iz} S_{jz} - \frac{t_b}{2} \sum_{(i,j)} (B_{ix} B_{jx} + B_{iy} B_{jy}) - \mu \sum_i S_{iz}. \quad (1)$$

Поскольку z -компонента оператора псевдоспина связана с оператором числа бозонов на узле, $n_i = S_{iz} + 1$, то пер-

вое слагаемое описывает эффекты локальных зарядовых корреляций на узлах, а второе слагаемое — межузельные заряд-зарядовые корреляции. В третьем слагаемом операторы $B_{ix} = S_{i-}^2 + S_{i+}^2$ и $B_{iy} = i(S_{i-}^2 - S_{i+}^2)$ выражаются через операторы рождения (уничтожения) пары бозонов на узле, $S_{i\pm}^2 (S_{i\pm}^2)$, где $S_{i\pm} = S_{ix} \pm iS_{iy}$. С учетом тождества $B_{ix} B_{jx} + B_{iy} B_{jy} = 2(S_{i+}^2 S_{j-}^2 + S_{i-}^2 S_{j+}^2)$, третье слагаемое отвечает за переносы пар бозонов между соседними узлами. Суммирование во втором и третьем слагаемом проводится по ближайшим соседям плоской квадратной решетки. Последнее слагаемое, пропорциональное химическому потенциалу μ , позволяет учесть условие постоянства концентрации числа бозонов n . Далее вместо n мы используем $x = n - 1$ — отклонение концентрации от половинного заполнения.

Диаграммы основного состояния модели (1) в приближении среднего поля для различных значений параметра локальных корреляций Δ и параметров заряд-зарядового взаимодействия V и парного переноса t_b построены в работе [8]. Было показано, что при $\Delta \leq 0$ диаграмма основного состояния модели (1) аналогична случаю „жестких“ бозонов: на плоскости $(V/t_b, x)$ левее гейзенберговской точки, которая для модели (1) определяется соотношением $2V/t_b = 1$, реализуется только сверхтекучая жидкость (SF), а правее, при $x^2 < (2V/t_b - 1)/(2V/t_b + 1)$, реализуется также фаза сверхтекучего твердого тела (supersolid, SS), которая при половинном заполнении, $x = 0$, переходит в фазу зарядового упорядочения (CO2). С ростом Δ области SF- и SS-фаз уменьшаются и увеличиваются области CO-фаз, и при $\Delta/t_b \geq 2$ в основном состоянии реализуются только три зарядово-упорядоченные фазы: CO1, CO2 и CO3. В работе [11] в приближении среднего поля были исследованы кон-

центрационные зависимости критических температур переходов 2 рода для SF- и CO-фаз. Однако при определенных условиях в модели (1) реализуются также переходы 1 рода. Кроме того, хорошо известная фазовая диаграмма „жестких“ бозонов [12] позволяет предположить наличие на фазовой диаграмме „полужестких“ бозонов различных нетривиальных ситуаций, таких как смена типа упорядочения с понижением температуры, фазовое расслоение (phase separation, PS), существование трикритических точек, разнообразие метастабильных состояний.

В настоящей работе в приближении среднего поля исследована эволюция фазовых диаграмм модели (1) в зависимости от параметра локальных корреляций Δ/t_b для наиболее характерных соотношений V/t_b . Статья организована следующим образом. В разделе 2 кратко описывается используемый метод расчета фазовых диаграмм. Раздел 3 посвящен анализу влияния локальных корреляций на фазовые состояния „полужестких“ бозонов при различных значениях параметра заряд-зарядовых корреляций. В последнем разделе приведены краткие выводы.

2. Приближение среднего поля

Запишем основные соотношения приближения среднего поля, полученные в работе [11], которые необходимы для построения фазовой диаграммы модели (1). Мы используем неравенство Боголюбова для оценки большого потенциала системы: $\Omega(H) \leq \Omega = \Omega(H_0) + \langle H - H_0 \rangle$, где H_0 — гамильтониан идеальной системы. Введем подрешетки A и B , образующие шахматный порядок на квадратной решетке, и запишем H_0 в следующем виде:

$$H_0 = \sum_{c=1}^{N/2} H_c, \quad H_c = H_A + H_B,$$

$$H_\alpha = \Delta S_{\alpha z}^2 - (h_z + (-1)^\alpha h_z^a) S_{\alpha z} - (\mathbf{h}_2 + (-1)^\alpha \mathbf{h}_2^a) \mathbf{B}_\alpha. \quad (2)$$

Здесь $\alpha = A, B$ — индекс подрешетки, $(-1)^A = 1$, $(-1)^B = -1$, $h_z, h_z^a, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_2^a$ — молекулярные поля, являющиеся вариационными параметрами (вектора $\mathbf{h}_2, \mathbf{h}_2^a$ имеют x - и y -компоненты). Статистическая сумма идеальной системы имеет вид $Z_0 = Z_c^{N/2}$, $Z_c = Z_A Z_B$, где

$$Z_\alpha = 2(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_\alpha)),$$

$$h_\alpha = \sqrt{(h_z + (-1)^\alpha h_z^a)^2 + |\mathbf{h}_2 + (-1)^\alpha \mathbf{h}_2^a|^2}. \quad (3)$$

Здесь $\beta = 1/k_B T$, где k_B — постоянная Больцмана (и далее мы полагаем $k_B = 1$), T — температура. Это позволяет записать выражения для x и соответствующих параметров порядка через молекулярные поля

$$x = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial h_z} = \frac{e^{-\beta \Delta}}{2} \times \left(\frac{(h_z + h_z^a) \text{sh}(\beta h_A)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_A)) h_A} + \frac{(h_z - h_z^a) \text{sh}(\beta h_B)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_B)) h_B} \right), \quad (4)$$

$$a = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial h_z^a} = \frac{e^{-\beta \Delta}}{2} \times \left(\frac{(h_z + h_z^a) \text{sh}(\beta h_A)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_A)) h_A} + \frac{(h_z - h_z^a) \text{sh}(\beta h_B)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_B)) h_B} \right), \quad (5)$$

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial \mathbf{h}_2} = \frac{e^{-\beta \Delta}}{2} \times \left(\frac{(\mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_2^a) \text{sh}(\beta h_A)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_A)) h_A} + \frac{(\mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_2^a) \text{sh}(\beta h_B)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_B)) h_B} \right), \quad (6)$$

$$\mathbf{b}_\alpha = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial \mathbf{h}_2^a} = \frac{e^{-\beta \Delta}}{2} \times \left(\frac{(\mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_2^a) \text{sh}(\beta h_A)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_A)) h_A} - \frac{(\mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_2^a) \text{sh}(\beta h_B)}{(1 + e^{-\beta \Delta} \text{ch}(\beta h_B)) h_B} \right), \quad (7)$$

и выражение для оценки свободной энергии в расчете на один узел, $f = \Omega/N + \mu x$:

$$f = -\frac{1}{2\beta} \ln Z_c + 2V(x^2 - a^2) - t_b(\mathbf{b}^2 - \mathbf{b}_a^2) + h_z x + h_z^a a + \mathbf{h}_2 \mathbf{b} + \mathbf{h}_2^a \mathbf{b}_a. \quad (8)$$

Минимизируя свободную энергию, получим уравнения для параметров порядка

$$4Va = h_z^a, \quad 2t_b \mathbf{b} = \mathbf{h}_2, \quad -2t_b \mathbf{b}_a = \mathbf{h}_2^a. \quad (9)$$

Эти уравнения необходимо решать численно с учетом выражений (4–7) при заданных значениях T и x . Полученные значения параметров порядка и молекулярных полей позволяют рассчитать свободную энергию по формуле (8). Сравнение свободной энергии для разных решений позволяет построить фазовую диаграмму.

Области фазовой диаграммы, соответствующие фазовому расслоению, были найдены при помощи построения Максвелла [13]: при заданной температуре T граничные точки x_1 и x_2 области PS являются решениями системы уравнений $\mu_1(x_1, T) = \mu_2(x_2, T)$, $\omega_1(x_1, T) = \omega_2(x_2, T)$, где μ_i — химический потенциал, а ω_i — удельный большой потенциал i -й фазы.

3. Особенности фазовых диаграмм

Для данной системы характерна симметрия фазовых диаграмм относительно $x = 0$, поэтому достаточно построить фазовые диаграммы для $0 \leq x \leq 1$. Далее при обосновании фазовых диаграмм параметры Δ, V и T указаны в единицах t_b .

В зависимости от T, x и соотношения между параметрами гамильтониана возможны следующие типы решений системы уравнений (9): высокотемпературная неупорядоченная фаза (NO), в которой равны 0 все параметры порядка; сверхтекучая (SF) фаза с ненулевыми средними $\langle S_{A+}^2 \rangle = \langle S_{B+}^2 \rangle$ и параметром порядка $b \neq 0$; фаза зарядового упорядочения (CO), соответствующая

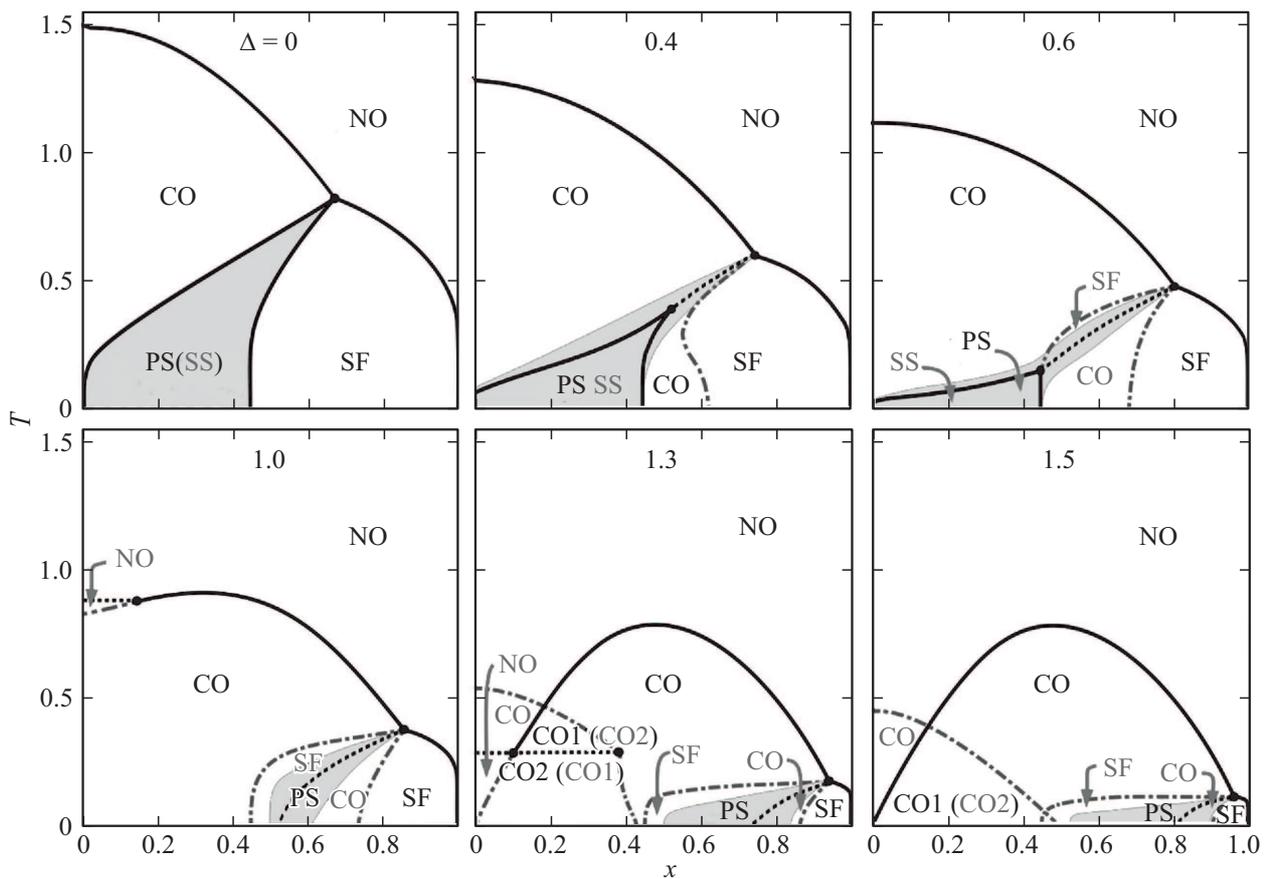


Рис. 1. Набор фазовых диаграмм в приближении среднего поля в переменных $x - T$ для серии значений Δ и $V = 0.75$. Черной сплошной (пунктирной) линией обозначены фазовые переходы 2 (1) рода, серым цветом показана область фазового расслоения, серой штрих-пунктирной линией определены границы стабильности фаз.

антиферромагнитному псевдоспиновому упорядочению вдоль оси z , с параметром порядка $a \neq 0$; фаза сверхтекучего твердого тела (SS), в которой есть все параметры порядка: $a \neq 0$, $b \neq 0$, $b_a \neq 0$; фазовое расслоение (PS) — состояние, в котором система разбивается на макроскопические домены SF- и CO-фаз. Отметим также, что в основном состоянии и при достаточно низких температурах можно выделить три типа зарядово-упорядоченных состояний [8]: CO1 и CO2, существующие при $|x| < 1/2$ и различающихся характером заполнения подрешеток, и CO3 для $1/2 < |x| \leq 1$. Обозначим $p_\alpha(n)$ долю узлов в подрешетке α с числом бозонов n , и рассмотрим наборы $\mathbf{p}_\alpha = \{p_\alpha(0), p_\alpha(1), p_\alpha(2)\}$. Тогда, при $0 \leq x \leq 1/2$, в фазе CO1 $\mathbf{p}_A = \{0, 1, 0\}$ и $\mathbf{p}_B = \{0, 1 - 2x, 2x\}$, а в фазе CO2 $\mathbf{p}_A = \{1 - 2x, 2x, 0\}$ и $\mathbf{p}_B = \{0, 0, 1\}$. При $x = 1/2$ фазы CO1 и CO2 переходят в фазу CO3, для которой $\mathbf{p}_A = \{0, 2 - 2x, 2x - 1\}$ и $\mathbf{p}_B = \{0, 0, 1\}$.

На рис. 1 показан набор фазовых диаграмм в переменных $x - T$ для серии значений Δ и $V = 0.75$. Черной сплошной и черной пунктирной линиями обозначены фазовые переходы 2 и 1 рода, соответственно, серая штрих-пунктирная линия показывает границы стабильности соответствующих фаз, серым цветом показана об-

ласть фазового расслоения. Можно выделить две области значений Δ , для которых фазовые диаграммы имеют качественные различия: $0 < \Delta < 0.75$ и $0.75 < \Delta < 1.5$. При $\Delta = 0$ фазовая диаграмма модели (1) полностью аналогична случаю „жестких“ бозонов [12], и в первом диапазоне значений параметра локальных корреляций наблюдаются в основном лишь количественные изменения: с ростом Δ максимум температуры перехода в CO-фазу, $T_{CO}(x)$, находится в точке $x = 0$ и уменьшается, а максимум $T_{SF}(x)$ соответствует трикритической точке (CO–NO–SF) и также уменьшается. Область устойчивости для SF-фазы сокращается, поскольку положительные значения Δ делают невыгодными состояния с $S_z = \pm 1$, обмен между которыми порождает двухбозонный перенос. Расположение области PS относительно CO- и SF-фаз качественно не изменяется, но область устойчивости решений SS-типа уже не совпадает с областью PS, как в случае „жестких“ бозонов: появляется вторая трикритическая точка (CO–SS–SF), имеющая меньшие значения T и x . Важно отметить, что, как и в случае „жестких“ бозонов, свободная энергия PS-состояния всегда ниже, чем свободная энергия SS-фазы. Во втором диапазоне значений, $0.75 < \Delta < 1.5$, наблюдаются уже качественные отличия вида фазовых

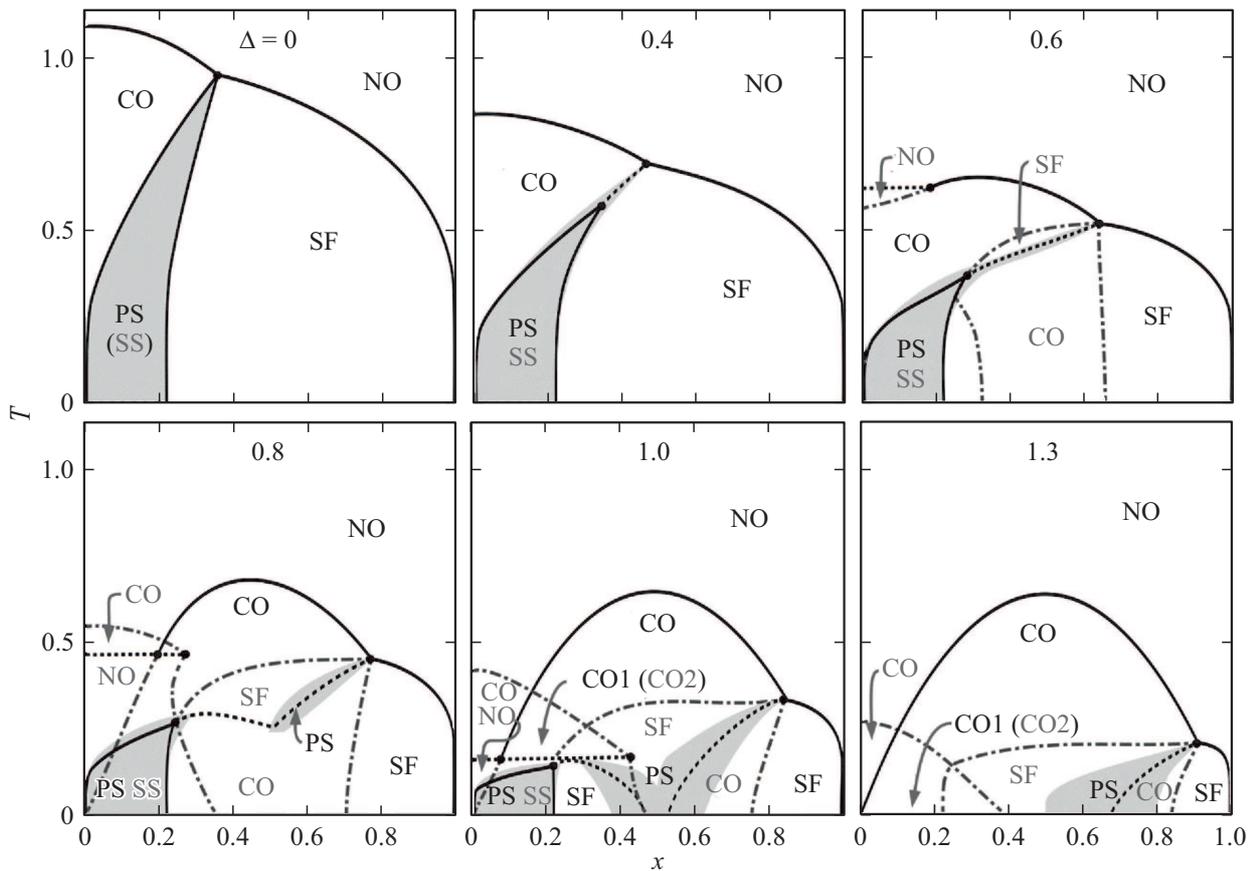


Рис. 2. Набор фазовых диаграмм в приближении среднего поля в переменных $x - T$ для серии значений Δ и $V = 0.55$. Используются те же обозначения, что и на рис. 1.

диаграмм от случая „жестких“ бозонов. Зависимость $T_{CO}(x)$ становится немонотонной, и максимум начинает смещаться к $x = 0.5$. Область существования SF- и PS-фаз ограничена значениями $0.5 < x < 1$ и быстро сокращается. При этом вблизи $x = 0$ происходит смена типа NO–CO-перехода со 2 на 1 род, а продолжение линии переходов 2 рода $T_{CO}(x)$ до значения при $x = 0$ определяет границу устойчивости метастабильной NO-фазы. Характерной чертой фазового NO–CO-перехода 1 рода вблизи $x = 0$ является относительно широкая область устойчивости этих фаз.

Согласно результатам работы [8], для модели (1) при заданном отношении V/t_b существует критическое значение Δ , начиная с которого в основном состоянии фаза CO2 замещается фазой CO1. Сопутствующая этому перестройка фазовой диаграммы происходит нетривиальным образом. С приближением к $\Delta = 1.3$ появляется переход типа порядок–порядок из фазы CO1 в фазу CO2 при температуре, равной температуре NO–CO-перехода 1 рода. Тип CO1–CO2-перехода также соответствует 1 роду, что подтверждается наличием конечного скачка зарядового параметра. Линия CO1–CO2-перехода заканчивается в критической точке при $x_c < 0.5$. Температура этого перехода с ростом Δ уменьшается и достигает нуля при $\Delta = 1.5$.

На рис. 2 и 3 показана эволюция фазовых диаграмм с ростом Δ при значениях V вблизи гейзенберговской точки $V = 0.5$. Случай $V = 0.55$, показанный на рис. 2, на качественном уровне повторяет основные особенности фазовых диаграмм при $V = 0.75$, но SF-фаза становится более устойчивой, особенно при $\Delta < 1$. Наблюдается интересная особенность, связанная с фазовым расщеплением: единая при $\Delta = 0.6$ область PS-фазы распадается при $\Delta = 0.8$ на две несвязанные области. Область PS-фазы с $x > 0.5$ существует только при $T > 0$, однако дальнейший рост Δ стабилизирует этот тип PS-фазы и при низких температурах.

На рис. 3 представлен набор фазовых диаграмм для $V = 0.45$. При $\Delta = 0$ есть только две фазы (NO и SF), но рост параметра локальных корреляций Δ приводит к подавлению SF-фазы и появлению на фазовой диаграмме CO-фазы. CO-фаза сначала возникает вблизи $x = 0.5$ и с понижением температуры уступает место SF-фазе. Тип фазового CO–SF-перехода соответствует 1 роду. С ростом Δ область CO-фазы все больше разрастается и вытесняет SF-фазу, и начиная с некоторого значения Δ вдоль линии фазового равновесия CO- и SF-фаз появляется область фазового расщепления.

Из рис. 1–3 видно, что при достаточно высоких значениях Δ фазовые диаграммы модели (1) для всех

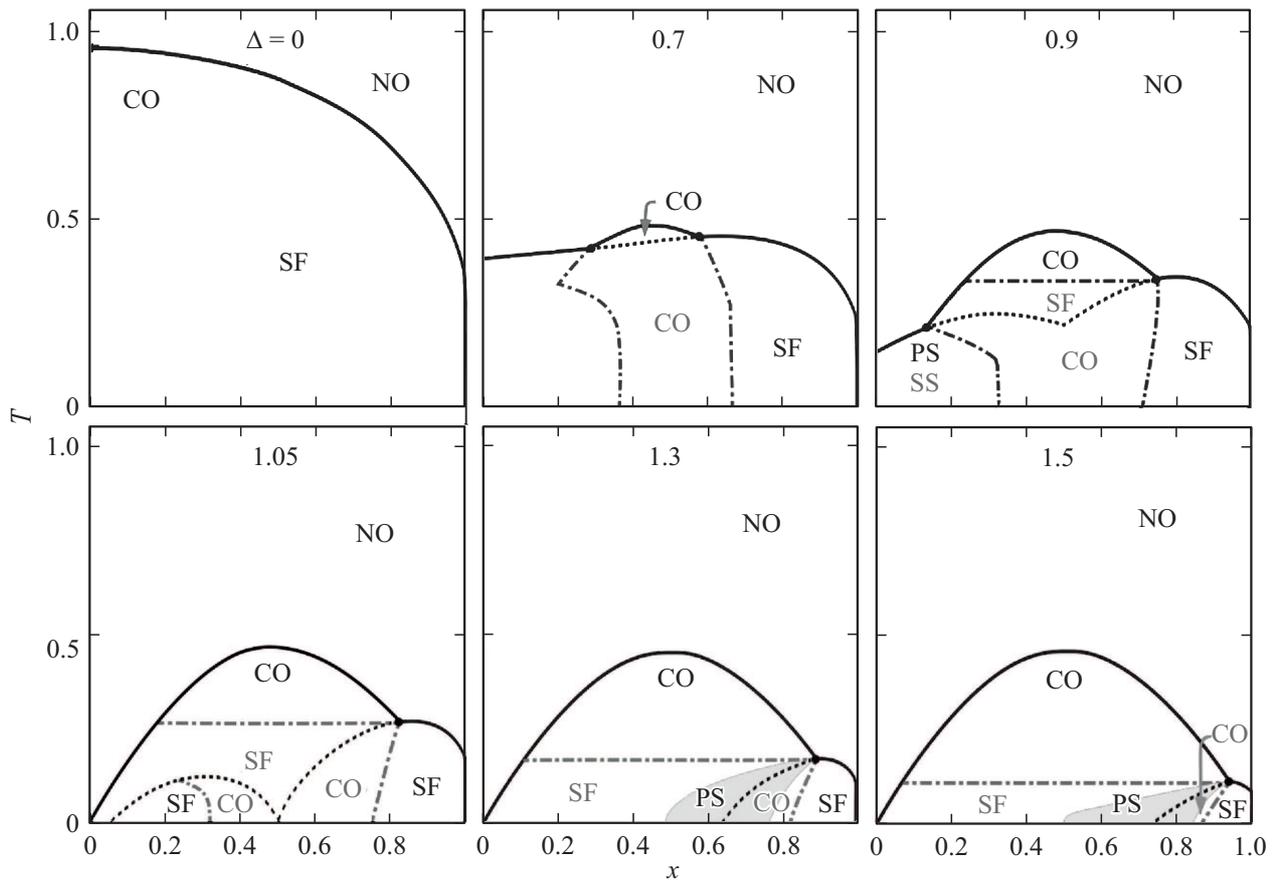


Рис. 3. Набор фазовых диаграмм в приближении среднего поля в переменных $x - T$ для серии значений Δ и $V = 0.45$. Используются те же обозначения, что и на рис. 1.

значений V/t_b стремятся к единому универсальному виду, когда CO-фаза отделена от NO-фазы линией перехода 2 рода $T_{CO}(x)$, имеющей максимум при $x = 0.5$ и обращаемой в 0 при $x = 0$ и $x = 1$. При $\Delta \rightarrow \infty$ предельная зависимость температуры зарядового упорядочения описывается параболой [11]: $T_{CO}(x)/V = 4x(1-x)$. Тип предельной CO-фазы будет соответствовать CO1 при $|x| < 0.5$ и CO3 при $0.5 < |x| \leq 1$, поскольку в этом случае доля узлов с $S_z^2 = 1$ минимальна.

4. Заключение

С помощью численного решения уравнений среднего поля для системы заряженных „полужестких“ бозонов построены фазовые диаграммы и исследована их эволюция с ростом параметра локальных корреляций Δ . Показано, что при $\Delta \leq 0$ вид фазовых диаграмм модели (1) полностью аналогичен их виду для модели „жестких“ бозонов, а при $\Delta \rightarrow \infty$ фазовая диаграмма заряженных „полужестких“ бозонов содержит единственную упорядоченную фазу, CO, и зависимость температуры зарядового упорядочения от x описывается параболой. Процесс трансформации фазовых диаграмм между этими предельными случаями определяется отношением

параметра межузельных заряд-зарядовых корреляций и интеграла двухбозонного переноса, V/t_b . Ниже гейзеберговской точки, при $V/t_b < 0.5$, рост Δ подавляет SF фазу и делает более выгодной CO-фазу при $x = 0.5$. Выше гейзенберговской точки, при $V/t_b > 0.5$, эволюция фазовых диаграмм более разнообразная: с ростом Δ изменяются области существования всех трех исходных фаз — CO, SF и PS. Это сопровождается различными нетривиальными ситуациями, такими как смена типа фазового перехода, появление новых переходов типа порядок–порядок, появление новых критических точек.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации, соглашение № 02.A03.21.0006, и проекта FEUZ-2020-0054 Министерства образования и науки Российской Федерации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] O. Dutta, M. Gajda, P. Hauke, M. Lewenstein, D.-S. Lühmann, B.A. Malomed, T. Sowiński, J. Zakrzewski. Rep. Prog. Phys. **78**, 066001 (2015).
- [2] E. Demler, W. Hanke, S.-C. Zhang. Rev. Mod. Phys. **76**, 909 (2004).
- [3] R. Islam, R. Ma, P.M. Preiss, M. Eric Tai, A. Lukin, M. Rispoli, M. Greiner. Nature **528**, 77 (2015).
- [4] K. Winkler, G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. Hecker Denschlag, A.J. Daley, A. Kantian, H.P. Büchler, P. Zoller. Nature **441**, 853 (2006).
- [5] A.J.R. Heng, W. Guo, A.W. Sandvik, P. Sengupta. Phys. Rev. B **100**, 104433 (2019).
- [6] T. Sowiński, O. Dutta, P. Hauke, L. Tagliacozzo, M. Lewenstein. Phys. Rev. Lett. **108**, 115301 (2012).
- [7] X.-F. Zhou, Y.-S. Zhang, G.-C. Guo. Phys. Rev. A **80**, 013605 (2009).
- [8] Yu.D. Panov, A.S. Moskvina, E.V. Vasinovich, V.V. Konev. Physica B **536**, 464 (2018).
- [9] C.D. Batista, G. Ortiz. Adv. Phys. **53**, 1 (2004).
- [10] A.S. Moskvina. ЖЭТФ **148**, 3, 549 (2015).
- [11] Yu.D. Panov, Phys. Met. Metallogr. **120**, 1276 (2019).
- [12] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, K.A. Chao. Phys. Rev. B. **23**, 1447 (1981).
- [13] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, R. Micnas, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 215601 (2012).

Редактор Д.В. Жуманов