1.11. Статистика Бозе. Градиентно-инвариантная фаза

Градиентно-инвариантная фаза.

Токовые состояния.

Редуцированная модель Бозе – Хаббарда

Градиентно-инвариантная фаза

- Многочастичная задача Шредингера с учетом векторного потенци

$$\frac{1}{2m}\sum_j\left[\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_j - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}_j)\right)^2 + V(\vec{r}_j)\right]\Psi + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} U(\vec{r}_i,\vec{r}_j)\Psi = E\Psi$$

- Векторный потенциал можно представить как градиент скалярной величины – фазы и связать его с магнитным потоком, пронизываю

$$\vec{A} = \frac{\hbar c}{e}\nabla\chi;\quad \oint \vec{A}\,d\vec{l} = \iint \vec{B}\,d\vec{S} = \frac{\hbar c}{e}\Delta\chi = \Phi$$

- Для ввода в систему поля и тока достаточно на границе системы ввести фазовый

$$e^{i\Delta\chi} = e^{i\frac{\hbar c}{e}\Phi} = e^{\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0}};\quad \Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e}$$

- Плотность тока для системы, описываемой единой волновой функци

$$\vec{j} = \frac{e}{2m}(\Psi^* \mathrm{P}\Psi + h.c.) = \frac{e\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{e^2}{mc}|\Psi|^2\vec{A}$$

Градиентно-инвариантная фаза

- Модель Бозе – Хаббарда во внешнем магнитном поле:

$$t_{ij}(A) = \int \Psi_i^* \frac{\left(p - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} \Psi_j d^3r \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \int (\Psi_i')^* \frac{p^2}{2m} \Psi_j' d^3r = \int \Psi_i^* \frac{p^2}{2m} \Psi_j e^{-i\chi(r_i)+i\chi(r_j)} = t_{ij} e^{i(\chi_j - \chi_i)}$$

- Градиентная перенормировка волновой функции:

$$a_i^+ a_j \Rightarrow a_i^+ a_j \exp\left(\frac{2\pi i}{\Phi_0} \int_i^j \vec{A}\, d\vec{l}\right)$$

- В случае кубическои симметрии или тороидальной геометрии:

$$H = -t \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} + a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}}\right) - t \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_y} + a_{i+\vec{e}_y}^+ a_i\right) -$$

$$-t \sum_i (a_i^+ a_{i+\vec{e}_z} + a_{i+\vec{e}_z}^+ a_i) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j$$

Градиентно-инвариантная фаза

- Оператор тока в узельном представлении:

$$j_x = -\frac{\partial H}{\partial A_x} = \frac{ite}{\hbar c}\sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} \right)$$

$$j_{x|\Phi\to 0} = \frac{ite}{\hbar c}\left(\sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i\right) + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} + a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i\right) \right)$$

- В отсутствие фазы ток равен нулю, а при наличии магнитного поля напрямую зависит от введенного магнитного потока
- Рассмотрим зависимость энергии системы свободных частиц на решетке от введенного магнитного потока. Применим к гамильтониану с равномерно распределенным векторным потенциалом фурье-преобразование:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sum_{k_x k_y k_z} a_k e^{i(k_x x_j + k_y y_j + k_z z_j)}$$

Градиентно-инвариантная фаза

$$H = -t\frac{1}{L_xL_yL_z}\sum_{\substack{k_x\,k_y\,k_z\\ k'_x\,k'_y\,k'_z\\ x_i\,y_i\,z_i}} a^+_{k'}a_k\left(T_x^+ + T_x^- + T_y^+ + T_y^- + T_z^+ + T_z^-\right);$$

$$T_x^+ = e^{i(k_x(x_i+e_x)-k'_xx_i+(k_y-k'_y)\,y_i+(k_z-k'_z)\,z_i)+\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0L_x}};$$

$$T_x^- = e^{i(k_xx_i-k'_x(x_i+e_x)+(k_y-k'_y)\,y_i+(k_z-k'_z)\,z_i)-\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0L_x}};$$

$$T_y^+ = e^{i\left((k_x-k'_x)x_i+k_y(y_i+e_y)-k'_yy_i+(k_z-k'_z)\,z_i\right)};$$

$$T_y^- = e^{i\left((k_x-k'_x)x_i+k_yy_i-k'_y(y_i+e_y)+(k_z-k'_z)\,z_i\right)};$$

$$T_z^+ = e^{i\left((k_x-k'_x)x_i+(k_y-k'_y)\,y_i+k_z(z_i+e_z)-k'_zz_i\right)};$$

$$T_z^- = e^{i\left((k_x-k'_x)x_i+(k_y-k'_y)\,y_i+k_zz_i-k'_z(z_i+e_z)\right)}$$

- Окончательно:

$$H = -t\sum_{k_x\,k_y\,k_z} a^+_{k_x\,k_y\,k_z}a_{k_x\,k_y\,k_z}\left(e^{i\left(k_xe_x+\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0L_x}\right)} + e^{-i\left(k_xe_x+\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0L_x}\right)}\right) -$$

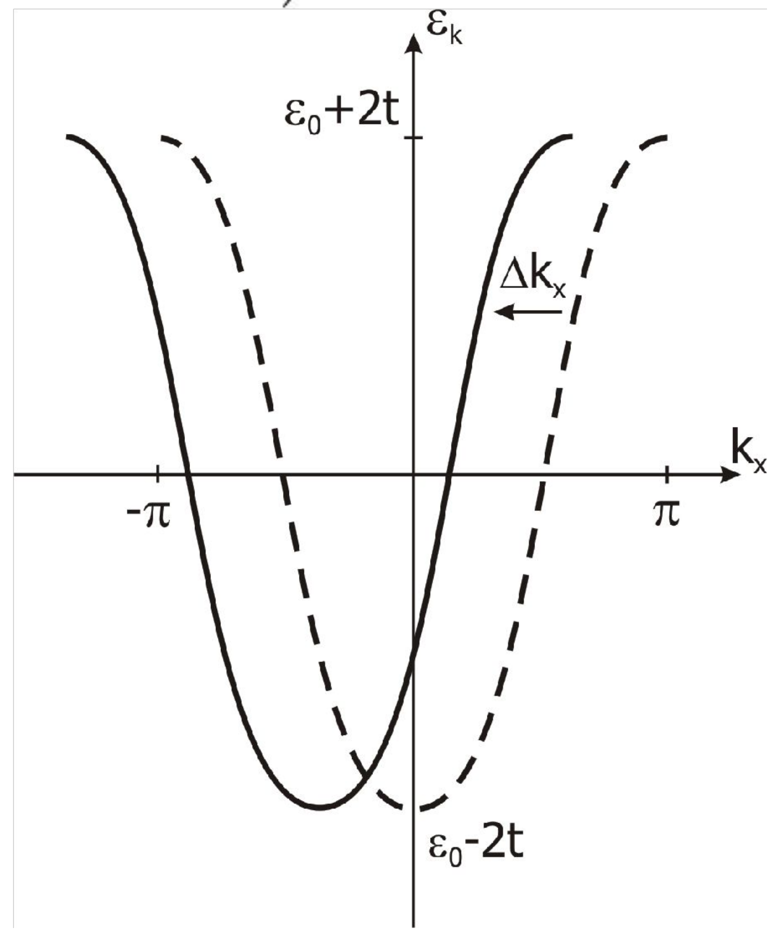
$$t\sum_{k_x\,k_y\,k_z} a^+_{k_x\,k_y\,k_z}a_{k_x\,k_y\,k_z}\left(e^{ik_ye_y} + e^{-ik_ye_y}\right) - t\sum_{k_x\,k_y\,k_z} a^+_{k_x\,k_y\,k_z}a_{k_x\,k_y\,k_z}\left(e^{ik_ze_z} + e^{-ik_ze_z}\right)$$

Градиентно-инвариантная фаза

- Спектр системы:

$$\varepsilon(k,\Phi) = -2t\left(\cos\left(k_x e_x + \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}\right) + \cos(k_y e_y) + \cos(k_z e_z)\right)$$

- Фактически все импульсы частиц системы получают фазовый сдвиг в направлении приложенной фазы или внешнего тока
- Полная энергия периодична по фазе: $E_0(\Phi+\Phi_0) = E_0(\Phi)$
- Все полученные фазовые зависимости спектра рассмотренные выше, *справедливы и для ферми-систем*

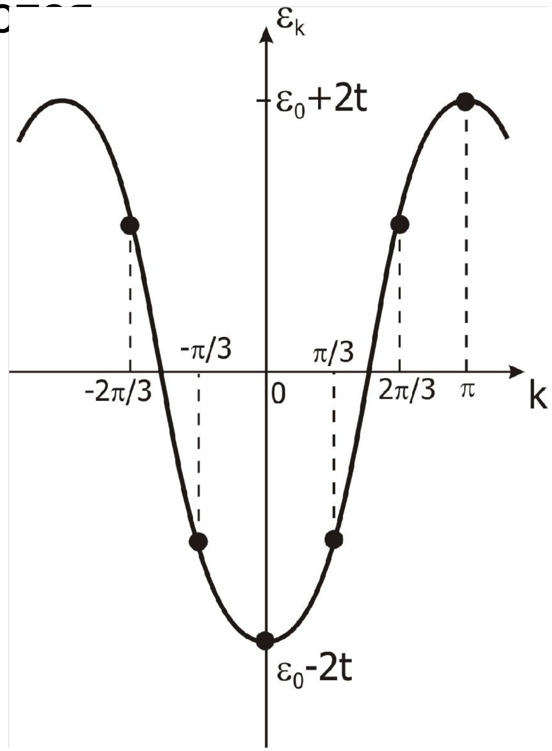


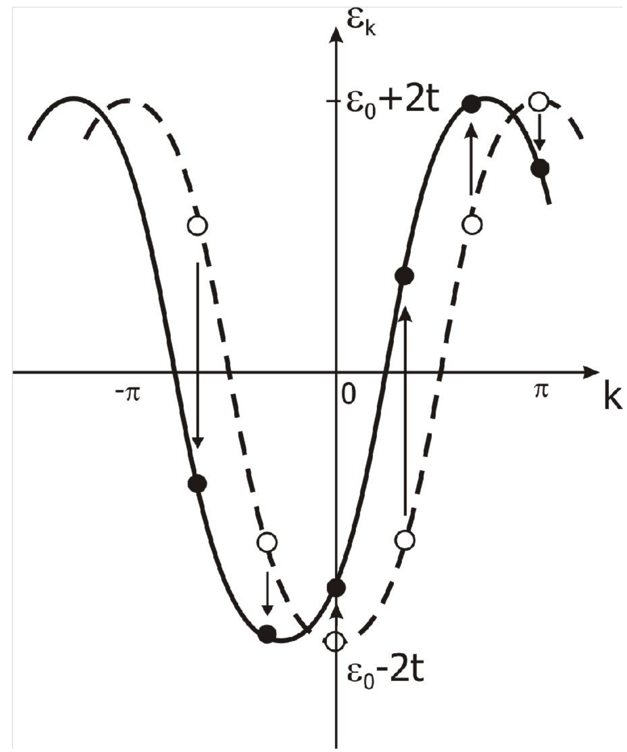
Пример. Одномерная система из 6 узлов и 3 частиц

- Разрешенные импульсы в отсутствие фазы:

$$k_0 = 0; \quad k_{\pm 1} = \pm \frac{\pi}{3}; \quad k_{\pm 2} = \pm \frac{2\pi}{3}; \quad k_3 = \pi$$

- При градиентном преобразовании энергетические уровни сдвигаю





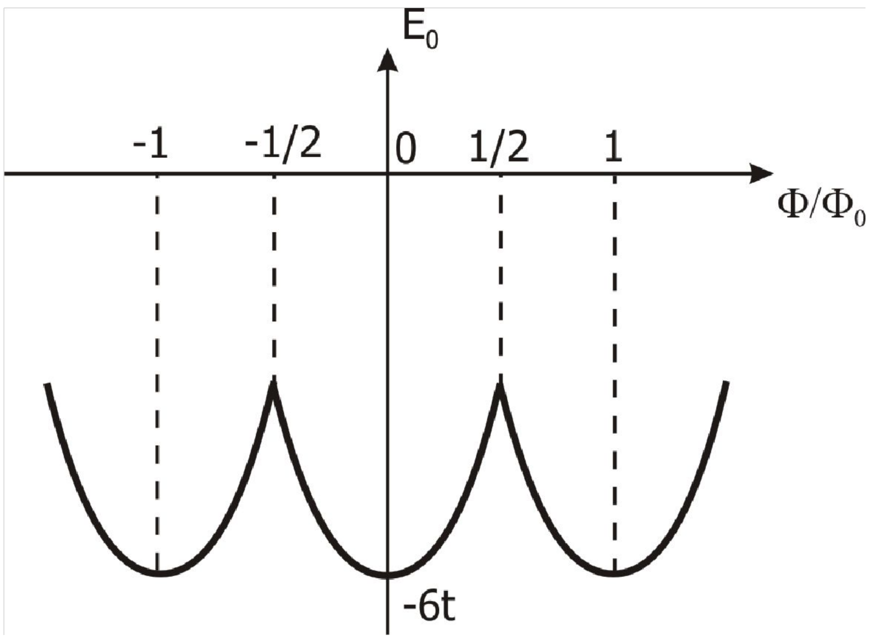
Пример. Одномерная система из 6 узлов и 3 частиц

- Зависимости тока и энергии будут периодичны:

$$J = -\frac{\partial E}{\partial \Phi} = \begin{cases} -\frac{2\pi t}{\Phi_0}\sin\left(\frac{\pi\Phi}{3\Phi_0}\right), & 0 \le \Phi \le \frac{\Phi_0}{2}; \\ \frac{2\pi t}{\Phi_0}\sin\left(\frac{\pi}{3}\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - 1\right)\right), & \frac{\Phi_0}{2} \le \Phi \le \Phi_0 \end{cases}$$

$$E_0 = -6t\cos\left(\frac{\pi}{3}\frac{\Phi}{\Phi_0}\right); \quad 0 \le \frac{\Phi}{\Phi_0} \le \frac{1}{2}$$

$$E_0 = -6t\cos\left(\frac{\pi}{3}\left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right); \quad \frac{1}{2} \le \frac{\Phi}{\Phi_0} \le 1$$



Градиентно-инвариантная фаза

- В термодинамическом пределе для невзаимодействующего бозе-газа:

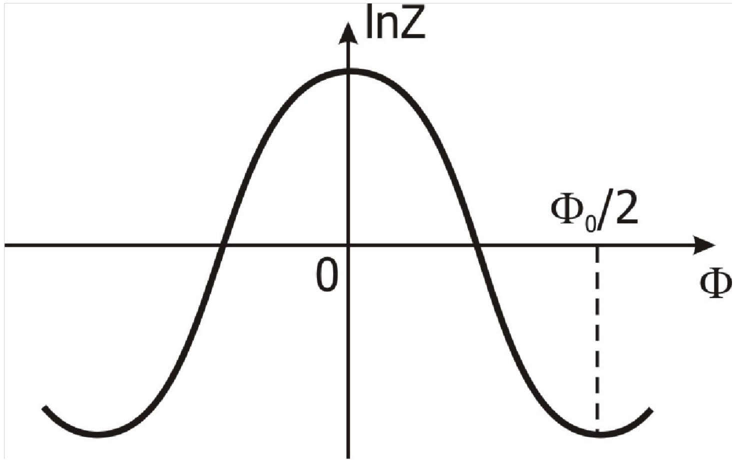
$$E_0(\Phi) = \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle_{|k=k_0} = -2tN\cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}\right)_{|L_x\to\infty} =$$

$$= -2tN\left(1 - 2\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}\right)^2\right) = E_0(0) + 4t\pi^2 N\frac{(\Phi/\Phi_0)^2}{L_x^2}; \quad 0 \le \Phi/\Phi_0 \le 1/2$$

$$E_0(\Phi) = \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle_{|k=k_{-1}} = -2tN\cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x} - \frac{2\pi}{L_x}\right)_{|L_x\to\infty} =$$

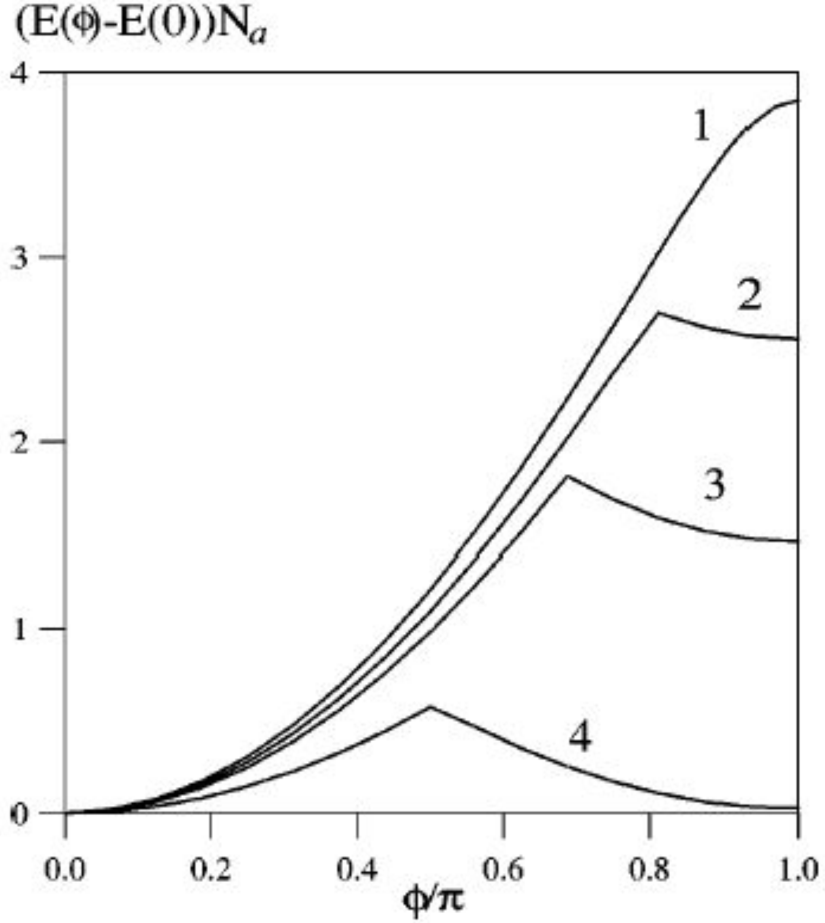
$$= -2tN\left(1 - 2\frac{\pi}{L_x}\left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2\right) = E_0(0) + 4t\pi^2 N\frac{(1-\Phi/\Phi_0)^2}{L_x^2}; \quad 1/2 \le \Phi/\Phi_0 \le 1$$

- Периодичность энергии и любых других характеристик системы *существует даже при наличии взаимодействия между частицами*



Пример. Редуцированная модель Бозе – Хаббарда

- Зависимость энергии основного состояния как функции фазы при различных значениях параметра взаимодействия (точная диагонализация)



- Переход системы в состояни
со спаренными частицами
- **1** – $U/t = -5.5$
- **2** – $U/t = -6.0$
- **3** – $U/t = -6.5$
- **4** – $U/t = -10.0$