

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/313853366>

The look beyond visible: ultra-cold atoms and model systems as a tool for the simulation of exotic systems in condensed...

Article · January 2016

CITATIONS

0

READS

14

1 author:



[Kartsev Alexey](#)

Atomic Energy and Alternative Energies Commission

11 PUBLICATIONS 18 CITATIONS

SEE PROFILE

Some of the authors of this publication are also working on these related projects:



Ab initio simulation of electronic, structural properties and lattice dynamics of 3d magnetic metal mononitrides. [View project](#)

Взгляд за пределы видимого: ультра-холодные атомы и модельные системы, как инструмент симуляции экзотических объектов физики конденсированных сред.

The look beyond visible: ultra-cold atoms and model systems as a tool for the simulation of exotic systems in condensed matter physics.

Карцев А.И.¹

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет.*

Одной из нетривиальных задач современной науки является описание физических явлений в конденсированном состоянии вещества. В частности, изучение неравновесных процессов сильно коррелированных систем - одно из важнейших направлений в современной физике конденсированного состояния, как с фундаментальной точки зрения, так и с позиции применения этих знаний на практике. Современные теоретические исследования могут дать ответ на многие важнейшие вопросы теории неравновесных и коррелированных систем, и внести огромный вклад в ее развитие. В свою очередь, одной из важнейшей проблематик современной теории конденсированного состояния является физика явлений, в так называемых ультра-холодных атомах. В настоящее время, данное научное направление активно развивается и привлекает все больший интерес физиков.

Большая часть описания процессов в современной физике подразумевает под собой равновесные состояния, где наблюдаемые величины постоянны во времени. Как правило, наибольшая часть процессов в физическом мире - это неравновесные явления, где система эволюционирует во времени достигая нового равновесного состояния отличного от начального. В области физики конденсированного состояния сложность процессов происходящих в реальных материалах не позволяет получить их четкого теоретического описания и полного понимания, т. к. обычно электронные состояния связаны с фононными процессами, с негомогенностями и другими многочастичными эффектами. В свою очередь, идеальные системы, реализуемые с помощью загрузки ультрахолодных атомов в оптическую решетку, обладают рядом преимуществ перед соответствующими реальными объектами изучения физики. Точный контроль параметров данных систем позволяет экспериментально реализовать модельные гамильтонианы, одним из которых является

однозонная модель Хаббарда, где многозонные и фононные эффекты отсутствуют или могут быть введены контролируемым путем. Большинство параметров данных систем можно менять независимо друг от друга в широком спектре значений, что позволяет получить режимы и состояния исследуемых систем, которые обычно недоступны в физике конденсированного состояния. Более того, типичная шкала времен в ультрахолодных атомах гораздо больше, чем в твердых телах, что, к примеру, позволяет наблюдать такое явление, как переключение из баллистического в диффузионный режим расширения облака фермионов в оптической решетке. Благодаря своим уникальным физическим свойствам данные системы позволяют смоделировать и заглянуть за пределы ранее недоступных для физиков систем и режимов, даже таких как процессы, происходящие вблизи горизонта событий черных дыр [1]. Несмотря на то, что физическая картина данных экспериментов намного проще той, что мы наблюдаем в реальных материалах, ее теоретическое объяснение все еще неполно, ввиду отсутствия эффективных инструментов исследования неравновесных процессов в простых фермионных моделях.

Как было сказано выше, достаточно часто в таких системах полная картина взаимодействия большого числа электронов может быть приближённо описана с помощью более простой модели Хаббарда, преимуществом которой является возможность пренебречь несущественными эффектами. В свою очередь, акцент в данной модели делается на описании ключевых физических процессов. Данная модель - одна из широко используемых моделей в современной физике конденсированного состояния, которая применяется для описания так называемых сильно коррелированных систем, где электроны движутся не независимо, а оказывают коллективное влияние друг на друга. Это одна из простейших моделей, рассматривающих взаимодействующие фермионы на дискретной решетке, гамильтониан которой содержит только два параметра: кинетическую энергию t и Кулоновское взаимодействие между электронами на узле U :

$$H = -t \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow}.$$

С помощью данной модели, к примеру, возможно объяснить переход между проводящим и диэлектрическим состоянием в различных физических системах. В нашей работе данная модель была успешно применена для

описания, так называемых ультрахолодных атомов – свободных ферми-частиц подвешенных в вакууме с помощью лазерных ловушек. Лазеры образуют оптическую решетку, в узлах которой и находятся атомы, обладающие полуцелым спином и возможностью перескока на соседний узел; данные системы представляет собой экспериментальный прототип модели Ферми-Хаббарда, которая в свою очередь, как отмечалось выше, применяется для их описания. Параметры системы, такие как Кулоновское взаимодействие на узле решетки U , энергия перескока частицы с узла на узел t и внешний одно-частичный потенциал на узле ε , контролируются статически и динамически подстройкой необходимых параметров лазеров и внешних магнитных полей.

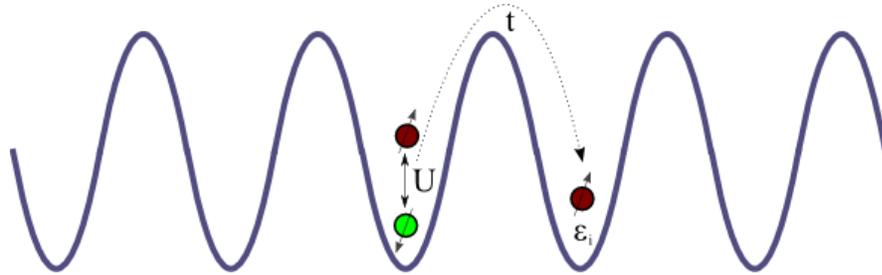


Рис. 1. Схематическое изображение ферми- частиц в оптической решетке, описываемой моделью Хаббарда.

Ввиду сложности и комплексности рассматриваемых систем, аналитический подход обычно ограничен и не позволяет получить их полное теоретическое и предсказательное описание. Традиционно, физики прибегают к численному моделированию данных систем, которое проводится с помощью ресурсозатратных расчетных методов, таких как квантовое Монте-Карло, теория ренорм - групп и метод точной диагонализации. К примеру, метод ренорм - группы матрицы плотности (DMRG) в большинстве случаев ограничен размерностью системы (одномерной) и продолжительностью моделируемого времени, а идеология метода Монте - Карло имеет, так называемую проблему знака и ограничение по размеру исследуемой системы. С другой стороны, большинство уже хорошо разработанных и менее ресурсозатратных теоретических техник теории возмущения подходят для описания только режимов сильной и слабой связи, в то время как компьютерные ресурсозатраты для методов точного решения являются чрезвычайно быстро растущей функцией размера и времени системы. Таким образом, ввиду огромных вычислительных затрат, необходимых для моделирования данных систем и ограниченности методов

их описания, возникает необходимость внедрения новых методик применительно к большим негомогенным системам. До настоящего момента не удавалось смоделировать динамические явления, происходящие в данных системах с участием большого количества ферми-частиц в условиях приближенных к экспериментальным.

В отличие же, от вышеназванных методов моделирования, метод теории функционала плотности, получивший свое широкое распространение в физике твердого тела, имеет неоспоримое преимущество – применимость для огромного числа частиц при использовании относительно небольшого числа вычислительных ресурсов. Недавно разработанная идеология нестационарной теории функционала плотности на решетке (LTD DFT), в комбинации с динамической теорией среднего поля (DMFT) для трёхмерного случая [2] и решением на основе уравнений подстановки Бете для одномерного случая [3] позволяет преодолеть многие трудности в описании обсуждаемых систем. К примеру, с помощью данного метода мы можем корректно описать Моттовский переход в данных системах и их неравновесную динамику. Ввиду неоспоримых преимуществ данного метода, именно он был выбран нами в качестве теоретического инструмента проводимых исследований.

Обсуждаемые модельные многочастичные системы, основанные на модели Хаббарда, и включающие в себя эффекты сильных электронных корреляций, являются дискретными: таким образом, для решения поставленных научных задач было необходимо разработать и применить новые теоретические методы в рамках теории функционала плотности на решетке. При этом для описания же динамики процессов, происходящих в данных экзотических неравновесных системах больших размеров, использовалась нестационарная формулировка решёточной теории функционала плотности в рамках адиабатического приближения. Адиабатическое приближение предполагает, что изменения в системе протекают достаточно медленно и в расчетах возможно не учитывать предысторию эволюции системы. Данное допущение значительно упрощает процесс моделирования, но и одновременно накладывает ограничения, такие как возможность симуляции только медленно меняющихся систем с высоким Кулоновским взаимодействием; для систем с низким значением U возможно моделирование любого режима, что всегда дает адекватные результаты

близкие к результатам расчета методом точной диагонализации, не использующего какие-либо допущения.

В нашей работе, в рамках метода функционала плотности, были изучены процессы, происходящие в системах ультра-холодных атомов, содержащие фазы, так называемого Моттовского изолятора. Поддержка со стороны Российского фонда фундаментальных исследований позволила нам провести численные расчеты на суперкомпьютерных кластерах с помощью параллельной версии нашего компьютерного кода, что дало возможность значительно увеличить размеры рассматриваемых систем и число частиц в них. Впервые в данной области физики, мы провели моделирование процесса соударения облаков фермионов в трехмерной оптической решетке, а также пространственного разделения ферми-частиц с различными спинами в одномерном случае под действием внешнего потенциала. Также в данной работе было рассмотрено влияние разупорядочения на свойства данных систем и его взаимосвязь с электронным взаимодействием. Таким образом, нами был предложен новый теоретический подход для моделирования ультрахолодных атомов в трёхмерной и одномерной оптической решетке на основе модели Хаббарда.

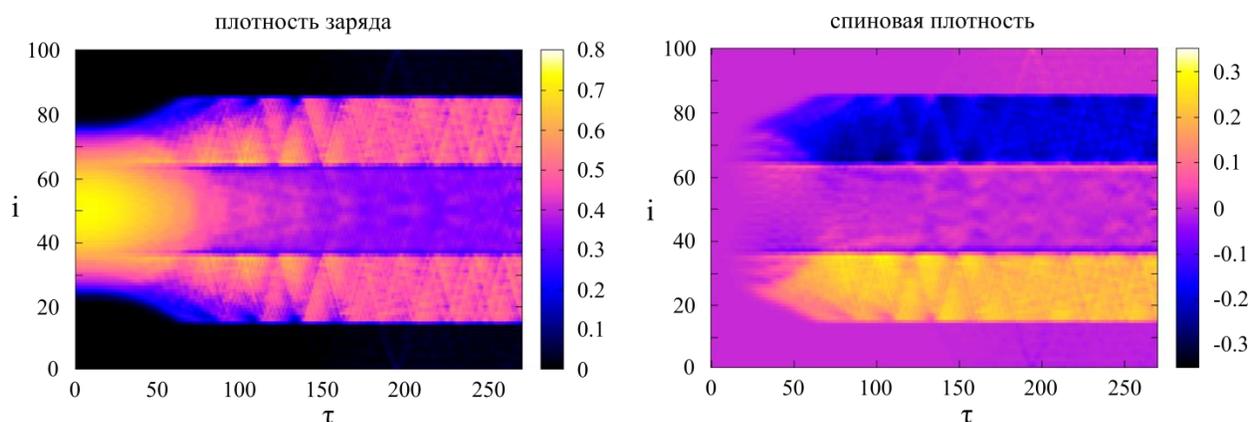


Рис. 2. Результаты моделирования разделения ферми-частиц с противоположенными спинами: представлена зарядовая и спиновая плотности. i -номер узла одномерной оптической решетки. τ -модельное время.

Мотивацией для наших исследований послужили эксперименты, проведенные в Массачусетском технологическом университете по соударению облаков фермионов с противоположными спинами в одномерной оптической решётке [4], а так же последующая лавина

теоретических работ по данной тематике. Проведенное нами моделирование спин-поляризованной системы в одномерии дает точное теоретическое описание динамики данных систем, а главное, выгодно отличает его от методов, уже получивших применение в физике конденсированного состояния своей способностью описать достаточно большие системы и их продолжительную динамику во времени. Выполненная компьютерная симуляция пространственного разделения фермионов с различными спинами имеет важное значение для экспериментальной области физики ультрахолодных атомов и является логическим продолжением вышеупомянутых теоретических и экспериментальных исследований.

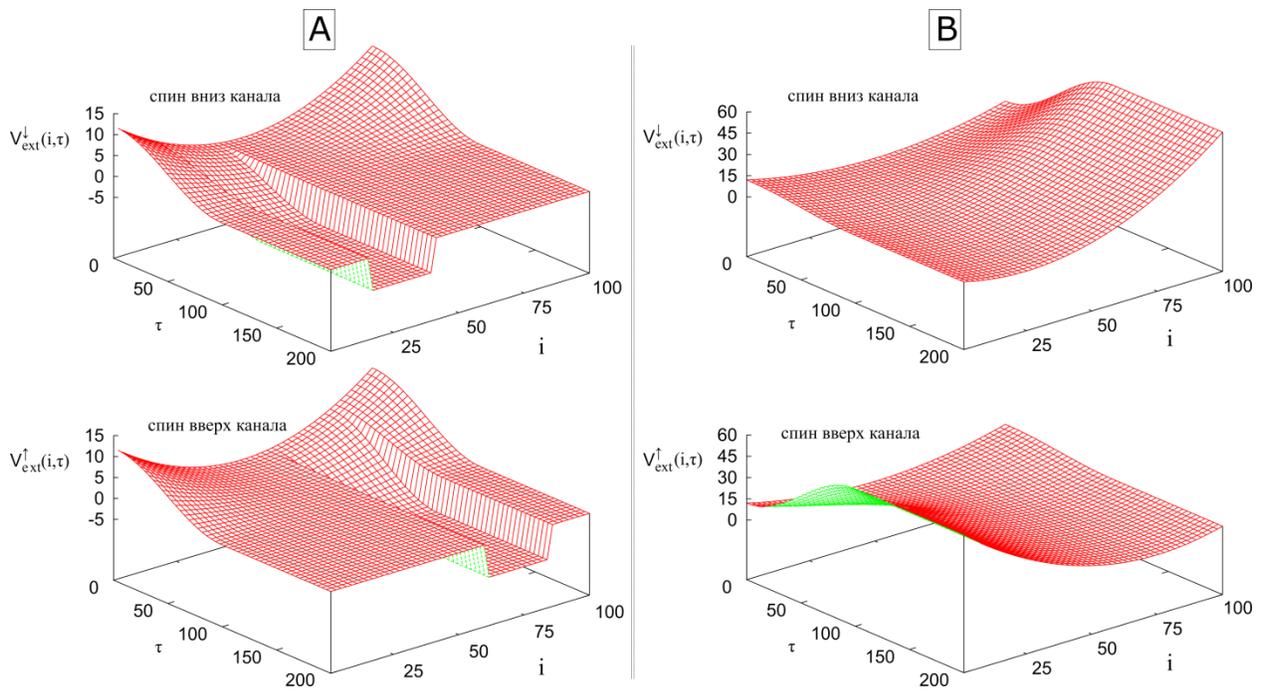


Рис. 3. Два различных протокола разделения ферми-атомов из общей параболической ловушки в две спин-поляризованные ловушки в форме параболы (А) и 'карманов' (В). i -номер узла одномерной оптической решетки. τ -модельное время. $V^{\uparrow}(V^{\downarrow})$ -общий внешний потенциал действующий на канал спин-вверх(спин-вниз).

На рисунке 2 приведен пример полученных нами результатов моделирования разделения ферми-частиц с различными спинами во времени в рамках нестационарной решеточной теории функционала плотности. Впервые, была показана невозможность пространственного разделения изначально смешанных частиц в одномерии под действием внешнего удерживающего потенциала (так называемая ловушка) при наличии

Мотовской фазы. Мы попытались применить различные формы внешнего потенциала для разделения частиц, но эффект невозможности разделения оказался несвязанным с формой ловушек и начальными условиями. На рисунке 3 изображены два различных протокола разделения ферми-атомов в пространстве из общей параболической ловушки в две спи-поляризованные ловушки для канала спин-вверх и канала спи-вниз в форме парабол и так называемых ‘карманов’. Изменение протокола дает возможность включить в рассматриваемую систему разупорядочение. Таким образом, наличие фазы Мотовского изолятора объясняет блокирующий разделение механизм.

Второй тип систем, рассмотренный нами в данной работе, это трехмерные оптические решетки. Впервые в мире нами было проведено моделирование процесса соударения в трехмерном решеточном пространстве облаков фермионов изначально находившихся в магнитных ловушках. На рисунке 4 представлены примеры результатов моделирования ‘медленного’ соударения облаков ферми-частиц для случая сильного Кулоновского взаимодействия, когда ловушки для ферми-частиц двух отдельных облаков адиабатически переходят в одну общую. В результате образуется единое Мотовское плато. В случае ‘быстрого’ соударения выраженное Мотовское плато не образуется. Под процессом ‘быстрого’ соударения здесь мы понимаем процесс соударения облаков фермионов мгновенно выпущенных из ловушек и направленных друг на друга с помощью другого внешнего потенциала, ‘медленный’ же процесс это процесс постепенного перехода во времени двух ловушек в одну единую. Таким образом, нам удалось шагнуть дальше в теоретическом исследовании соударения и динамики облаков ферми-частиц в оптической решетке, а так же расширить класс рассматриваемых систем до трехмерных.

Так как описание динамики в реальном времени многочастичных квантовых систем в присутствии разупорядочения и сильных корреляций до сих пор остаётся одной из актуальных проблем, в особенности в трехмерном случае, в продолжение данной работы и, основываясь на полученных результатах, мы и дальше планируем развивать методы нестационарной теории функционала плотности в применении не только к модельным, но и к реальным низкоразмерным системам и материалам с сильным межэлектронным взаимодействием, и внедрить их в уже существующие широко используемые в материаловедении первопринципные коды. Все это придает данным исследованиям важнейшее фундаментальное значение, так

как они обеспечат развитие новых методов моделирования физики конденсированного состояния и возможность проведения расчетов для широкого спектра сильно коррелированных электронных систем.

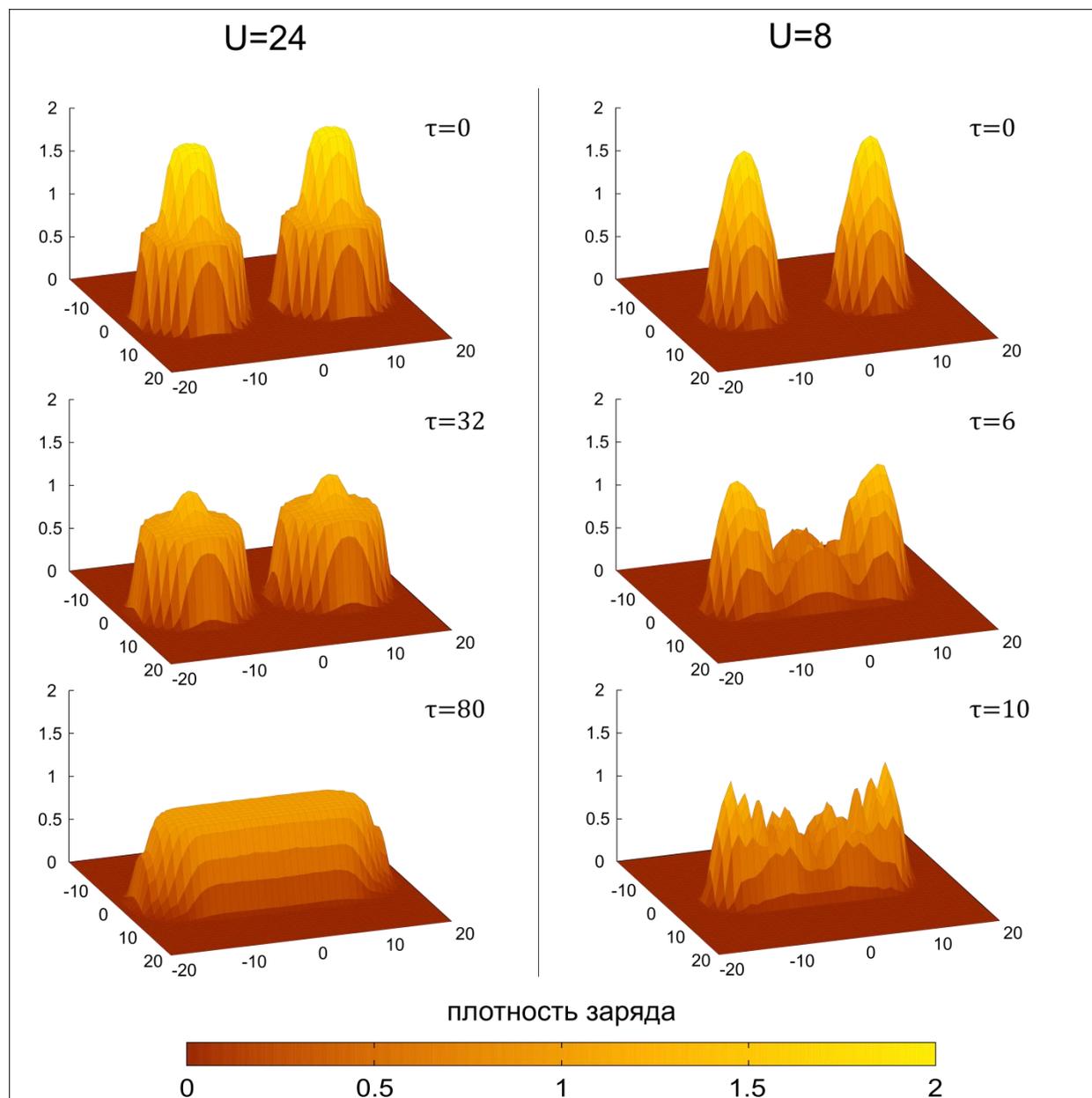


Рис. 4. Результаты моделирования соударения облаков ферми-частиц в трехмерной решетке для случая 'быстрого' и 'медленного' соударения при различном значении U . На рисунке представлен профиль распределения заряда частиц вдоль плоскости $z=0$. τ -модельное время.

Авторы выражают благодарность фонду РФФИ за поддержку данного проекта в рамках гранта мол_а № 16-32-00157.

Список литературы:

[1] [Steinhauer, Jeff. "Observation of quantum Hawking radiation and its entanglement in an analogue black hole." Nature Physics \(2016\).](#)

[2] [V. Vettchinkina, A. Kartsev, D. Karlsson, C. Verdozzi, Interacting fermions in 1D disordered lattices: Exploring localization and transport properties with lattice density functional theories, Phys. Rev. B 87, 115117 \(2013\).](#)

[3] [Karlsson, D., Verdozzi, C., Odashima, M. M. & Capelle, K. Dynamical selfstabilisation of the Mott insulator: Time evolution of the density and entanglement entropy of out-of-equilibrium cold fermion gases. EPL 93, 23003 \(2011\).](#)

[4] [Sommer, A., Ku, M., Roati, G. and Zwierlein, M.W., 2011. Universal spin transport in a strongly interacting Fermi gas. Nature, 472\(7342\), pp.201-204.](#)