

Ultrahideg atomok kezelése a Bose-Hubbard modellben

Jeszenszki Péter, II. évf. vegyész MSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Surján Péter** egyetemi tanár
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék
Dr. Szabados Ágnes egyetemi adjunktus
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

A kutatásaim során a kvantumkémiai körökben jól ismert és gyakran használt direkt Davidson algoritmust alkalmaztam egy olyan rendszerre, amelyet mindeddig a kvantumkémikusok nem tanulmányoztak. A vizsgált rendszer az optikai rácsban csapdázott, alacsony hőmérsékletre hűtött atomok halmaza. Az optikai csapdák mérete kvantumkémiai léptékben nagy (nagyságrendileg 1000 nm), így az atomok egymással csak szóródási folyamatokon keresztül lépnek kölcsönhatásba. Egy atom spinje a magspin és elektronok spinjeinek eredője. Ha ez az érték egész szám, akkor az atomokat kvázi bozonoknak tekintjük, viselkedésük Bose-Einstein statisztikát követ. Az optikai rácsban csapdázott atomokat a Bose-Hubbard közelítés keretében vizsgáltuk.

A Bose-Hubbard operátor a rendszer Hamilton operátorának félempirikus közelítése, amely számos fizikai folyamatot (pl. szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet) jól leír. Megvizsgáltuk a Bose-Hubbard modell megoldását az átlagtér közelítésben és az egzakt diagonalizációs technikát alkalmazva. Kiemelkedően fontos eredményünk az egzakt megoldást szolgáltató direkt algoritmus, amelyet bozonikus rendszerekre dolgoztunk ki. Az általunk készített programot összehasonlítva már létező kóddal (ALPS), azt találtuk, hogy mind a gépidő mind a memóriaigényt tekintve a mi algoritmusunk hatékonyabb.