

**Jeszenszki Péter**

**II. kémia Msc**

**Tudományos Diákköri Konferencia**

**Témavezető: Szabados Ágnes, Surján Péter**

**Eötvös Loránd Tudományegyetem,**

**Fizikai Kémia Tanszék**

**Budapest, 2010.**

# Tartalomjegyzék

<b>1</b>	<b>Bevezetés</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Kvantumgáz optikai rácsban</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>A másodkvantálás</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>A Hamilton-operátor</b>	<b>13</b>
<b>5</b>	<b>A Bose-Hubbard modell átlagtér közelítésben</b>	<b>15</b>
5.1.	A Brillouin tétel általánosítása . . . . .	15
5.2.	A Gross-Pitaevskii egyenlet . . . . .	17
<b>6</b>	<b>A Bose-Hubbard modell egzakt megoldása</b>	<b>19</b>
6.1.	A Davidson algoritmus . . . . .	19
6.2.	Indexelés a direkt kódban . . . . .	22
6.3.	Bázistranszformáció . . . . .	33
<b>7</b>	<b>Tesztelési eredmények</b>	<b>37</b>
7.1.	A bozonikus Davidson kód hatékonyságának tesztelése . . . . .	37
7.2.	Szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet . . . . .	38
<b>8</b>	<b>Összefoglalás</b>	<b>43</b>



# 1. fejezet

## Bevezetés

Ez a beszámoló a lézerrel hűtött és csapdázott atomi rendszerek (ún. kvantumgáz) elméleti leírása területén végzett tanulmányaimat mutatja be. A munka tárgya hatékony algoritmus kidolgozása és programozása a rendszert leíró modell egzakt numerikus megoldására. Az általunk készített programot összehasonlítottam már létező, a mienktől eltérő elven működő programmal [1], különös tekintettel a futási időre, memóriaigényre.

A kvantumgáz olyan alacsony hőmérsékletre hűtött atomok halmaza, amiknél a kvantumjelenségekből származó tulajdonságok már makroszkopikusan is megjelennek. Ha a kvantumgázt alkotó atom magspinjének és elektronspinjének eredője egész szám, akkor az atomot kvázi-bozonnak nevezzük, a sok atomos rendszer viselkedése Bose-Einstein statisztikát követ. Leggyakrabban alkálifémeket használnak kondenzátum létrehozására (pl:  ${}^7\text{Li}$ ,  ${}^{23}\text{Na}$ ,  ${}^{87}\text{Rb}$ ). A hűtés elvégezhető lézerrel vagy mágnesekkel, továbbá az atomokat csapdázni is lehet lézer segítségével (azaz egy adott térszre gyűjteni). A lézerrel létrehozott térben periodikus potenciált optikai rácsnak hívjuk. A kvantumgázok témakörében az utóbbi évtizedben jelentős kísérleti eredmények születtek, ami sok elméleti stúdiumot inspirált (lásd [2, 3, 4] és az ezekben található referenciák).



## 2. fejezet

# Kvantumgáz optikai rácsban

Az optikai rácsban csapdázott kvantumgázokat két fő lépésben hozzák létre. Az első lépés a hűtés, a második lépés az optikai rácsban való csapdázás.

A hűtés mechanizmusa az atomi abszorpció és emisszió egymásutánján alapul [5]. Az abszorbeált és a később emittált fény frekvenciája két atomi szint különbségének megfelelő. Ha az atom egy adott irányba mozog és abból az irányból egy szembejövő fotont abszorbeál, akkor az impulzusuk az atom és foton impulzusának összege lesz. Ugyanez az impulzuszó megmaradás érvényes az emisszió esetében is. Mivel az abszorpció csak egy irányból érkező fotonnal történhet az emisszió során pedig a foton a tér bármely irányába egyenlő valószínűséggel repülhet, az egymás utáni abszorpciók és emissziók sorozata azt eredményezi, hogy az atom fényforrás felé mutató sebességvektorának abszolút értéke csökken.

Mivel az atom mozog, fellép a Doppler-effektus is. Emiatt az atom a szembejövő foton frekvenciáját nagyobbak "érzi", mint amekkora az a labor koordináta-rendszerében. Ezért az abszorpció az atom gerjesztési energiájánál kisebb frekvenciájú foton esetén történik meg. A folyamat során az atom sebessége csökken, így a foton frekvenciáját folyamatosan növelni kellene ahhoz, hogy a hűtési mechanizmus folytatódjon. Egy tipikus kísérleti elrendezésben, az ún. Zeemann-lassítóban a lézer hangolása helyett az atomi energiaszinteket hangolják külső mágneses tér segítségével.

Nézzük meg, hogyan is történik ez! A készülék lelke egy változó erősségű mágneses

teret előállító tekercs. Ha az atomok mágneses térbe kerülnek, akkor az atomi szintek felhasadnak, nagyobb mágneses térben a felhasadás is nagyobb. A lézer frekvenciáját rögzítve, a gyorsabb atom nagyobb mágneses térben képes abszorbeálni a fotont, mint a lassabb atom. A nagyobb sebességű atom ugyanis nagyobb frekvenciájúnak látja a fotont, ezért kell ehhez nagyobb Zeeman-felhasadás. Az abszorbancia a gyorsabb atomoknál a tekercs elején, a lassabbakkal a tekercs végén történik, így egy jól beállított rendszerben a tekercs végére érve az atomok sebessége kicsi és közel azonos lesz (a sebesség szórása lecsökken). Ezzel a módszerrel, körülbelül mK nagyságrendűre hőmérsékletre hűthetőek az atomok.

Az optikai csapdát az atom rezonanciafrekvenciájától elhangolt frekvenciájú lézerrel hozzák létre. Három páronként merőleges lézerrel állóhullámot keltenek. Az atom ebben a térben úgynevezett dipól erőt érez [6], ami a polarizált atom elektromágneses térrel való kölcsönhatását írja le. A kölcsönhatás következtében az atom az állóhullám maximumai és minimumai felé vándorol. Ezzel a berendezéssel egy 3 dimenziós rácsot kapunk, amit optikai rácsnak hívunk.

## 3. fejezet

# A másodkvantálás

A másodkvantálás technikáját a fizikában az elektromágneses tér kvantummechanikai leírására dolgozták ki. Az elméleti kémiában, illetve a sokrészecske rendszerek fizikájában. A másodkvantált operátorok, azaz a részecske keltő és eltüntető operátorok bevezetésével a mátrixelemek kiszámítása válik rendkívül egyszerűvé a soktestrendszerek leírásakor. A következőekben röviden bemutatjuk a dolgozatban alkalmazott másodkvantált formalizmus elemeit. Ismeretes, hogy a sokrészecske rendszer kvantummechanikai leírásának kulcsa a rendszer hullámfüggvényének meghatározása. A hullámfüggvényt leggyakrabban koordináta reprezentációban írjuk fel. Ebben az esetben a függvény változói a részecske térbeli és spin indexei, a függvény négyzete pedig a térbeli megtalálási valószínűség sűrűségét adja. A másodkvantált megközelítés esetén a hullámfüggvényt egy vektornak tekintjük. A vektor dimenzióját az határozza meg, hogy hány darab egyrészecske függvénnyel dolgozunk (bázis mérete). A vektor egy-egy komponense azt adja meg, hogy az adott egyrészecske függvényt (állapotot) hány részecske foglalja el. Egyetlen részecske  $\psi_i(x, \sigma)$  állapota például:

$$|\psi\rangle = | \overset{1}{0}, \overset{2}{0}, \dots, \overset{i}{1}, \overset{i+1}{0}, \dots, \overset{K}{0} \rangle$$

vektorral írható le másodkvantáltan. Látható, hogy a bázis dimenziója ebben a példában  $K$ . Ha a részecske a  $\psi_j(x, \sigma)$  állapottal írható le, akkor a

$$|\psi\rangle = | \overset{1}{0}, \overset{2}{0}, \dots, \overset{j}{1}, \overset{j+1}{0}, \dots, \overset{K}{0} \rangle$$



vektort feleltetjük meg ennek az állapotnak. Ha több mint egy részecskét tartalmaz a rendszer, akkor egyrészecske állapotok (szimmetrizált vagy antiszimmetrizált) szorzata a hullámfüggvény. Ennek másodkvantált megközelítésben a

$$|\psi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_K\rangle$$

vektort feleltetjük meg, ahol  $\sum_{i=1}^K n_i = N$  a részecskék száma. Az  $n_i$  ún. betöltési számok azt adják meg, hogy az  $i$ -edik egyrészecske állapotot hány részecske foglalja el. A  $\psi$  vektort betöltésszám vektornak hívjuk.

Fermion rendszerben a Pauli elv miatt  $n_i$  csak a 0 és az 1 értéket veheti fel, mert különben egynél több részecske lenne egy állapotban. Bozon rendszerben  $n_i$  bármilyen természetes szám lehet.

A másodkvantált operátorok hatása egy betöltésszám vektora rendkívül szemléletesen megfogalmazható. Egy keltő operátor  $a_i^+$  az  $i$ -edik állapot betöltöttségét növeli eggyel. Hasonlóképp egy eltüntető operátor  $a_i$  a betöltési számot csökkenti eggyel. Az operátorok hatása bizonyos szorzófaktorokkal is jár, amelyek eltérőek a bozonokból, illetve a fermionokból álló rendszerek esetén. Bozonok esetében:

$$\begin{aligned} a_i^+ |\dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\dots n_i + 1 \dots\rangle \\ a_i |\dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |\dots n_i - 1 \dots\rangle. \end{aligned}$$

és fermionoknál:

$$\begin{aligned} a_i^+ |\dots n_i \dots\rangle &= (1 - n_i) |\dots n_i + 1 \dots\rangle \\ a_i |\dots n_i \dots\rangle &= n_i |\dots n_i - 1 \dots\rangle. \end{aligned}$$

Az operátorokat egymás után hatattva egy vektorra meghatározható az operátorok kommutátora (bozonok esetén), illetve antikommutátora (fermionok esetén):

bozon	fermion
$[a_i^+, a_j^+]_- = 0$	$[a_i^+, a_j^+]_+ = 0$
$[a_i, a_j]_- = 0$	$[a_i, a_j]_+ = 0$
$[a_i, a_j^+]_- = \delta_{ij}$	$[a_i, a_j^+]_+ = \delta_{ij}$

Azonos indexű keltő és eltüntető operátorok szorzatára bevezetjük a részecskeszám operátort,  $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$ . Az  $\hat{n}_i$  sajátértéke megadja az  $i$ -edik állapot betöltését:

$$a_i^\dagger a_i |\dots n_i \dots\rangle = n_i |\dots n_i \dots\rangle.$$

Ha összegzünk az összes egyrészecskes állapotra megkapjuk a teljes részecskeszám operátort:

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^K \hat{n}_i$$

melynek bármely betöltésszám vektor sajátvektora, sajátértéke a rendszerben lévő részecskék száma  $N$ .

A kvantummechanikában használt operátorokat felírhatjuk keltő és eltüntető operátorok segítségével. Az  $\hat{A}$  egyrészecskes operátor hatását a következő kifejezés adja meg:

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} a_i^\dagger a_j$$

ahol  $A_{ij}$  az ún. egyrészecske integrál:

$$A_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle$$

ahol  $\psi_i$  és  $\psi_j$  bázisfüggvények. Ugyanígy a kétrészecskes operátor másodkvantált kifejezésre:

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} A_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

ahol  $A_{ijkl}$  a kétrészecskes integrál:

$$A_{ijkl} = \langle \varphi_i \varphi_j | \hat{A} | \varphi_k \varphi_l \rangle = \int \int d\tau_1 d\tau_2 \psi_i(\tau_1) \psi_j(\tau_2) \hat{A} \psi_k(\tau_1) \psi_l(\tau_2).$$

Vizsgáljuk meg, hogy miben rejlik a másodkvantált formalizmus előnye az operátorok mátrixelemeinek számításakor. Vegyük a következő példát:

$$\langle n_1, \dots, n_K | a_i^\dagger a_j | n'_1, \dots, n'_K \rangle.$$

Feltéve, hogy az egyrészecske állapotok ortogonális függvények, a mátrixelem csak akkor nem nulla, ha a  $\psi = a_i^+ a_j |n'_1, \dots, n'_K\rangle$  vektor betöltésszámai pontosan megegyeznek az  $n'_1, \dots, n'_K$  számokkal. Mivel  $a_j$  eggyel csökkenti,  $a_i^+$  pedig eggyel növeli a megfelelő állapot betöltési számát, csak az

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_K | a_i^+ a_j | n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_K \rangle.$$

alakú mátrixelemek lehetnek nullától különbözőek. Ennek alapján egyszerűen kiszámítható egy egyrészecskes operátor várható értéke a

$$|\psi\rangle = | \overset{1}{1}, \overset{2}{1}, \dots, \overset{N}{1}, \overset{N+1}{0}, \dots, \overset{K}{0} \rangle$$

fermion betöltésszám vektorral:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \langle \text{vac} | a_1 a_2 \dots a_N a_i^+ a_j a_N^+ \dots a_2^+ a_1^+ | \text{vac} \rangle$$

ahol a  $|\text{vac}\rangle$  felel meg a részecskét nem tartalmazó betöltésszám vektornak. Minden lehetőséget egybevéve:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i=2}^N A_{ii}.$$

Az  $\langle \hat{A} \rangle$  értékét fermion esetben még egyszerűbben meghatározhatjuk, ha bevezetjük az ún. Fermi-vákuumot, amelyben az első  $N$  állapot van egy-egy részecskével betöltve:

$$|HF\rangle = | \overset{1}{1}, \overset{2}{1}, \dots, \overset{N}{1}, \overset{N+1}{0}, \dots, \overset{K}{0} \rangle.$$

Az  $1, \dots, N$  indexű egyrészecske függvények alkotják a betöltött teret,  $N+1, \dots, K$  indexűek a virtuális teret. Látható, hogy

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \langle HF | a_i^+ a_j | HF \rangle$$

csak úgy lehet nem nulla, ha  $j$  betöltött index,  $i$  pedig megegyezik  $j$ -vel, azaz  $\langle HF | a_i^+ a_j | HF \rangle = n_j \delta_{ij}$ .

Áttérve a bozonok esetére a

$$\psi = |N, 0, 0, \dots, 0\rangle$$

vektorral vett várhatóértéket érdemes vizsgálni. Az

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \langle \text{vac} | a_1^N a_i^+ a_j (a_i^+)^N | \text{vac} \rangle$$

várható értékre egyszerű megondolással kapjuk, hogy

$$\langle \hat{A} \rangle = N A_{11}.$$

Érdekes megfigyelni, hogy a bozonok esetén nem szokás bevezetni a Fermi-vákuummal analóg Bose-vákuumot:

$$|B\rangle = |N, 0, \dots, 0\rangle$$

hiszen  $a_1^+ |B\rangle \neq 0$ . Betöltött keltővel hatva tehát nem nullát kapunk, hanem egy részecskével nagyobb számú betöltött állapotot. Ez a hiányosság a levezetéseink során nehézséget jelenthet.



## 4. fejezet

# A Hamilton-operátor

Optikai rácsban csapdázott atomi gázok esetén az egyrészecske állapotok a csapdázópotenciál minimum helyein centrált függvények. Jelölje ezeket  $\chi_\mu$ . A csapdázó  $V_0$  potenciál térben periodikus, így a bázist adó egyrészecske függvényeket egyetlen függvényből kiindulva térbeli eltolásokkal generáljuk.

A rendszer Hamilton operátorának kifejezése atomi egységrendszerben

$$\hat{H} = \sum_{\mu\nu}^K \langle \chi_\mu | -\frac{1}{2m} \Delta + V_0 | \chi_\nu \rangle \chi_\mu^+ \chi_\nu^- + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\lambda\sigma}^K \langle \chi_\mu \chi_\nu | V | \chi_\lambda \chi_\sigma \rangle \chi_\mu^+ \chi_\nu^+ \chi_\lambda^- \chi_\sigma^- \quad (4.1)$$

alakú ahol  $\chi_\mu^+$  ( $\chi_\mu$ ) a  $\mu$ -edik rácsponton (site-on) keltő (eltüntető) operátor,  $K$  a rácspontok száma,  $m$  az atomok tömege,  $V$  jelöli az atomok közötti kölcsönhatást operátorát és  $-\frac{1}{2m} \Delta$  a kinetikus energia operátora.

A site-ok középpontjainak távolsága kvantumkémiai léptékben nagy (kb 1000 nm), ezért jó közelítéssel mondható, hogy csak azok az atomok hatnak kölcsön, amik egy site-on vannak. Ez a közelítés képleteinkben úgy jelentkezik, hogy a részecske kölcsönhatás operátorának kizárólag "on-site" integrálja nem nulla.

$$\langle \chi_\mu \chi_\nu | V | \chi_\lambda \chi_\sigma \rangle = \delta_{\mu\nu} \delta_{\mu\lambda} \delta_{\mu\sigma} \langle \chi_\mu \chi_\mu | V | \chi_\mu \chi_\mu \rangle.$$

A  $\langle \chi_\mu \chi_\mu | V | \chi_\mu \chi_\mu \rangle$  integrál számításakor az atomok között ható van der Waals kölcsönhatás operátorával kellene dolgozni. Tekintve hogy az atomok ritkán és egymástól távol helyezkednek el, a kölcsönhatást kontakt potenciállal szokás helyettesíteni.

Azonban még kontakt potenciállal sem számítjuk ki  $\langle \chi_\mu \chi_\mu | V | \chi_\mu \chi_\mu \rangle$  értékét. Ehelyett félempirikus közelítést alkalmazunk, azaz az integrált kísérleti adatok alapján határozzuk meg. Ehhez nyújt segítséget a szóráselméletben használt Lippmann-Swinger (LS) egyenlet [7]. A LS egyenlet egy rekurziós összefüggés, amelyet egyszer iterálva (ún. Born közelítés) kaphatunk egy relációt az ún. s-szórási hossz ( $a_s$ ) és a kölcsönhatási potenciál között:

$$\langle \chi_\mu \chi_\mu | V | \chi_\mu \chi_\mu \rangle = \frac{4\pi a_s}{m} = U. \quad (4.2)$$

Az  $a_s$  kísérleti úton meghatározható és a mért értéket behelyettesítve a kölcsönhatási tag kiszámítható. Érdemes megemlíteni, hogy fermionos esetben a képlet nem ilyen egyszerű, be kell szoroznunk a spinintegrállal is, a Pauli elv miatt. A bozonos esetben nincs Pauli-elv, ezért ilyen egyszerű a (4.2) Hubbard tag. Félempirikus paraméterként kezeljük a  $t_{\mu\nu} = \langle \chi_\mu | \frac{1}{2m} \Delta - V_0 | \chi_\nu \rangle$  ún. "hopping" integrált is, melyre gyakran alkalmazzuk az elsőszomszéd közelítést. Ez azt jelenti, hogy csak az egymás melletti site-okon számoljuk ki, a többi esetben elhanyagoljuk ( $t_{\mu\nu} = 0$ , ha  $\mu$  és  $\nu$  nem közvetlen szomszédok), továbbá a nem nulla  $t_{\mu\nu}$  értéket egyetlen  $t$  paraméterrel közelítjük.

A fent írottakat összegezve, a számításainkban alkalmazott félempirikus Bose-Hubbard Hamilton operátor alakja:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mu\nu \rangle} \chi_\mu^+ \chi_\nu + \frac{U}{2} \sum_{\mu}^K \chi_\mu^+ \chi_\mu^+ \chi_\mu \chi_\mu. \quad (4.3)$$

ahol a  $\langle \mu\nu \rangle$  jelölés arra utal, hogy  $\mu$  és  $\nu$  közvetlenül szomszédos site-ok <sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Érdemes megemlíteni, hogy a fent írt  $\chi_\mu$  bázis nem ortogonális, képleteinket mégis úgy vezettük le, mihha az volna. Akkor jártunk el volna korrektül, ha az átfedő bázis helyett bevezettük volna annak pl. Löwdin-ortogonalizáltját. Mivel azonban félempirikus elméletekkel dolgozunk, gondolkozhatunk úgy, hogy  $\chi_\mu$  az ortogonalizált bázisra vonatkozik és a  $t$  és  $U$  paraméterek a megfelelő módon transzponáltak.

## 5. fejezet

# A Bose-Hubbard modell átlagtér közelítésben

Ahhoz, hogy a csapdázott atomi gázok stacionárius állapotait a Bose-Hubbard modell keretein belül megadjuk, a Hamilton-operátor sajátérték egyenletét kell megoldanunk. A modell egzakt megoldása nem egyszerű, tekintve, hogy kétrészecskés tagot is tartalmaz. Érdeemes ezért megvizsgálni azt a megközelítést, ami az elektronokat tartalmazó rendszerek esetére megismert Hartree-Fock (HF) közelítés analógja. Egy HF módszerrel analóg eljárás ugyanis egy könnyen megoldható egyrészecskés effektív operátort szolgáltat. Ennek megoldása szemléletesen egyetlen atom leírását szolgáltatja a többi átlagos terében. Az átlagtér elmélet egyenleteihez a Brillouin-tétel bozonokra történő általánosításának megfogalmazásán keresztül vezet az út, kezdjük ezért ezzel a tárgyalást.

### 5.1. A Brillouin tétel általánosítása

A Brillouin-tétel kimondja, hogy az egyszeresen gerjesztett állapotok nem hatnak kölcsön az átlagtér közelítés alapállapotú megoldásával. A tétel bozonikus rendszerekben is igaz, a levezetése analóg a fermionoknál [8] megismert levezetéssel. Ennek alapján végeztük el az általánosítást bozonokra.

A tétel bizonyításához azt kell meggondolnunk, hogy milyen alakú az átlagtér



közelítéssel kapható bozonikus alapállapot. Az atom egyrészecskes hullámfüggvényeit  $\varphi_i$ -vel jelöljük. Ezek közül az alapállapothoz tartozó keltő operátort a

$$\varphi_0^+ = \sum_{\mu} c_{\mu} \chi_{\mu}^+$$

szerint fejezhető ki a site-okon keltő operátorokkal. Az átlagtér közelítés abból áll, hogy a sokatomos rendszer hullámfüggvényét  $\varphi_0^+$  ismeretében

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\varphi_0^+)^N |\text{vac}\rangle \quad (5.1)$$

alakban írjuk, azaz az összes részecske ugyanazt az alapállapotot foglalja el. A  $\varphi_0^+$  kifejezésében megjelenő  $c_{\mu}$  együtthatókat a variációs elv alapján határozzuk meg. Ezek szerint keressük a  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  funkcionál minimumát, a  $\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 1$  mellékfeltétellel:

$$\delta \left[ \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \lambda (\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle - 1) \right] = 0.$$

Helyettesítsük be  $\psi$ -t az (5.1) egyenletből és értékeljük ki a variációt!

$$\frac{1}{N!} N \langle \text{vac} | \delta \varphi_0^- (\varphi_0^-)^{N-1} \hat{H} (\varphi_0^+)^N | \text{vac} \rangle - \lambda \langle \text{vac} | \delta \varphi_0^- \varphi_0^+ | \text{vac} \rangle + cc = 0.$$

A  $\delta \varphi_0$  függvényt ne tekintsük normálnak, hanem azt követeljük meg, hogy  $\langle \delta \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 0$ . Ekkor  $\delta \varphi_0$ -t sorbafejthetjük a  $\varphi_0$ -ra merőleges  $\{\varphi_m\}$  pályák bázisán

$$\delta \varphi_0 = \sum_{m \neq 0} d_m \varphi_m.$$

Ezt kihasználva értékeljük ki a kifejezést!

$$\sum_{m \neq 0} d_m \left[ \langle \varphi_0^N | \varphi_0^+ \varphi_m^- \hat{H} | \varphi_0^N \rangle - \lambda \underbrace{\langle \text{vac} | \varphi_m^- \varphi_0^+ | \text{vac} \rangle}_0 \right] + cc = 0.$$

Mivel a fenti egyenletnek  $d_m$  minden értékére teljesülnie kell, ezért az összeg minden tagja külön-külön el kell tűnjön:

$$\langle \varphi_0^N | \varphi_0^+ \varphi_m^- \hat{H} | \varphi_0^N \rangle = 0. \quad (5.2)$$

Ez a jól ismert Brillouin-tétel bozonikus rendszerekre megfogalmazva. Látjuk, hogy a  $|\varphi_0\rangle$  Bose-kondenzátum játssza a Fermi-vákuum szerepét.

## 5.2. A Gross-Pitaevskii egyenlet

A Brillouin-tételből kiindulva levezethetjük a Gross-Pitaevskii <sup>1</sup> egyenletet [8, 9], ami a fermionos esetben használt Hartree-Fock egyenlettel analóg. Helyettesítsük be a Bose-Hubbard Hamilton operátor (4.3) kifejezését az (5.2) egyenletbe:

$$\langle \varphi_0^N | \varphi_0^+ \varphi_m^- \left( -t \sum_{\langle \mu\nu \rangle} \chi_\mu^+ \chi_\nu^- + \frac{U}{2} \sum_{\mu} \chi_\mu^+ \chi_\mu^+ \chi_\mu^- \chi_\mu^- \right) | \varphi_0^N \rangle = 0. \quad (5.3)$$

Fejtsük sorba  $\chi_\mu$ -t a  $\varphi_i$ -k bázisán:

$$\chi_\mu = \sum_i c_i^\mu \varphi_i$$

és helyettesítsük be ezt a kifejtést az (5.3) egyenletbe:

$$\langle \varphi_0^N | \varphi_0^+ \varphi_m^- \left( -t \sum_{\langle \mu\nu \rangle} \sum_{ij} c_i^\mu c_j^\nu \varphi_i^+ \varphi_j^- + \frac{U}{2} \sum_{\mu} \sum_{ijkl} c_i^\mu c_j^\mu c_k^\mu c_l^\mu \varphi_i^+ \varphi_j^+ \varphi_k^- \varphi_l^- \right) | \varphi_0^N \rangle = 0.$$

A keltő/eltüntető operátorok szorzatainak várható értékét a korábbiakban mutatott megfontolással értékelhetjük ki. Ennek nyomán kapjuk:

$$-tN \sum_{\langle \mu\nu \rangle} c_m^\mu c_0^\nu + UN(N-1) \sum_{\mu} c_m^\mu (c_0^\mu)^3 = 0$$

A fenti egyenlet bal oldala úgy írható, mint egy egyrészecskés operátor  $m0$ -adik mátrixeleme ( $G_{m0}$ ):

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | \hat{G} | \varphi_0 \rangle &= \langle \varphi_m | -t \sum_{\langle \mu\nu \rangle} \underbrace{\sum_i c_i^\mu \varphi_i^+}_{\chi_\mu^+} \underbrace{\sum_j c_j^\nu \varphi_j^-}_{\chi_\nu^-} \\ &+ U(N-1) \sum_{\mu} |c_0^\mu|^2 \underbrace{\sum_i c_i^\mu \varphi_i^+}_{\chi_\mu^+} \underbrace{\sum_j c_j^\mu \varphi_j^-}_{\chi_\mu^-} | \varphi_0 \rangle = 0. \end{aligned}$$

A  $\varphi_m$  olyan tetszőleges egyrészecskés függvény amely kielégíti az ortogonalitási feltételt:

$$\langle \varphi_m | \varphi_0 \rangle = 0.$$

<sup>1</sup>A magyar helyesírás szabályai szerint a Pitaevskii-t Pitajevszkijként kellene írunk. Mivel a nemzetközi körökben a fent is írt írásmód az elterjedtebb, ezért a dolgozatban az angolszász írásmódot követjük.

Ezért  $G_{n0}$  csak úgy lehet nulla, ha teljesül a következő sajátértékegyenlet:

$$\hat{G}|\varphi_0\rangle = E_{GP}|\varphi_0\rangle. \quad (5.4)$$

Az (5.4) egyenlet nem más, mint a  $\varphi_0$ -t meghatározó Gross-Pitaevskii (GP) egyenlet. Figyeljük meg, hogy a HF egyenlethez hasonlóan a GP egyenlet is iteratív, hiszen a  $\hat{G}$  operátor függ a keresendő  $c_n$  koefficiensektől. Az iterációt a Hückel közelítéssel kapott eredményekből indítjuk. Hückel közelítésben az  $U$ -t nullának vesszük, így csupán  $t$ -vel számolva a Hückel mátrix felírható és diagonalizálható. Érdeemes megjegyezni, hogy a GP iteráció annál rosszabbul konvergál, minél nagyobb  $U/t$ . Ennek megértéséhez vegyük a  $t = 0$  esetet. Tudjuk, hogy  $U$  taszító potenciál. Ha csak  $U$  van jelen a részecskék megpróbálnak úgy elhelyezkedni, hogy egy site-on minél kevesebb részecske legyen. Ha a részecskék száma egész számú többszöröse a site-ok számának, akkor az alapállapot az az állapot, amikor a részecskék egyenletesen töltik be a site-okat. Ezt az állapotot közelítőleg sem lehet leírni az (5.1) alakú átlagtér függvénnyel. Ennek oka, hogy egyenletes betöltésű  $\varphi_0$ -at tekintve a

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \frac{1}{\sqrt{K}} \sum_{\mu=1}^K \chi_{\mu}^+ \right)^N |\text{vac}\rangle$$

kifejezésben több konfiguráció is megjelenik a site-ok bázisán. Ugyanekkor ehhez az állapothoz, csak egyetlen egyenletesen betöltött konfiguráció tartozik. Ezen felül ha a részecskék száma nem egész számú többszöröse a site-ok számának, akkor az alapállapot nem egyetlen egyenletes betöltésű állapot, hanem ilyenek szuperpozíciója. Például ha a site-ok száma  $K$  a részecskék száma pedig  $nK + 1$  (ahol  $n$  egész), és az  $nK$  db részecskét egyenletesen lerakjuk a site-okra, akkor a plusz egy részecskét bárhová téve az energia ugyanakkora lesz. Az alapállapot tehát nem egy függvény, hanem több függvény (a fenti példa esetén  $nK$  db függvény) lineárkombinációja lesz.

## 6. fejezet

# A Bose-Hubbard modell egzakt megoldása

Az átlagtér megoldás sokszor jó közelítése a kvantumgáz alapállapotának. Ha azonban  $U/t$  túl nagy, vagy szükségünk van gerjesztett állapotokra is, más megoldáshoz kell folyamodnunk. Ha az optikai rács mérete és a csapdázott atomok száma kellően kicsi, a modell egzakt megoldása is megadható. Több technika is ismert az egzakt megoldás előállítására [3], ilyen a Sűrűségmátrix Renormalizációs Csoport Módszer (Density Matrix Renormalization Group, DMRG), vagy az iteratív diagonalizáció. Az utóbbi módszert alkalmazza például Lundh [10], a részecskeszám sűrűség időbeli változásának leírására. Ebben a tanulmányban a konfigurációk egy korlátozott terében kerül megoldásra a sajátérték probléma. Mi a továbbiakban azzal foglalkozunk, hogy a sajátérték egyenletet akár a konfigurációk teljes terében megoldhassuk.

### 6.1. A Davidson algoritmus

Az egzakt megoldást úgy kaphatjuk meg, hogy a konfigurációk terében végezzük el a sajátértékegyenlet megoldását. A Hamilton-mátrix diagonalizációja  $N^3$  műveletigényű, ahol  $N$  a konfigurációk száma. Az  $N$  szám nagyon érzékeny a paraméterek növelésére (lásd a későbbi (6.1) képletet), 20 részecskét és 20 site-ot tartalmazó rendszerben  $N = 1654158345840$ . Ezért a hagyományos diagonalizálási technikák (pl:

Jacobi, Givens) nem alkalmazhatóak, mert  $10^{13}$  TByte memóriát igényelne a fenti példa és túl időigényes volna a mátrix teljes diagonalizációja. Ismert azonban egy másik sajátérték kereső technika, amit iteratív diagonalizálásnak hívnak. Az algoritmus nagy vonalakban úgy működik, hogy egy próbavektorra hatunk a mátrixszal és az eredményvektorból, illetve az előző iterálási lépések során kapott vektorokból határozunk meg egy újabb vektort. Az új vektor a korábbiaknál jobb közelítése a keresett sajátvektornak. A sokszori mátrixhatás elvégzése nyomán megkaphatjuk a mátrix néhány sajátvektorát és sajátértékét. A kvantumkémiaiában a Lánczos [11] és a Davidson [12] módszer terjedt el. A módszerek előnyei a teljes diagonalizálással szemben, hogy gyorsabbak, és eredményül legkönnyebben a legalsó, illetve legfelső állapotok kaphatóak meg. Ez hasznos, hiszen a gyakorlatban általában a legalsó néhány sajátértékre, illetve sajátvektora van szükségünk (általában az alap és néhány alsó gerjesztett állapot elegendő a rendszer leírásához).

Most pedig ismerkedjünk meg a Davidson algoritmussal! A Davidson-iteráció fő motívuma egy kis mátrix felépítése és diagonalizálása. A kis mátrix tulajdonképp az eredeti mátrix projekciója egy olyan altérre, amelyet a keresett sajátvektort közelítő vektorokból áll. A kis mátrix diagonalizációja során egy újabb közelítő vektort kapunk, jelölje ezt  $|\psi'_k\rangle$ . A hiba a kapott sajátérték és az egzakt sajátérték különbsége, ezt kell minimalizálnunk. Definiáljuk a reziduális (maradék) vektort:

$$|r_k\rangle = \mathbf{H}|\psi'_k\rangle - \lambda_k|\psi'_k\rangle$$

ahol  $\lambda_k$  az egzakt sajátérték. Ha a  $|\psi'_k\rangle$  egzakt sajátvektor volna,  $|r_k\rangle$  nullvektor lenne. Definiáljuk az eltérés vektort, ami az egzakt sajátvektor és a közelítő sajátvektor különbsége.

$$|z\rangle = |\psi_k\rangle - |\psi'_k\rangle.$$

Szorozzunk be a fenti kifejezést balról  $\mathbf{H} - \lambda_k$ -val és vegyük észre, hogy ez a reziduális minuszegyszerese:

$$(\mathbf{H} - \lambda_k)|z\rangle = -(\mathbf{H} - \lambda_k)|\psi'_k\rangle = -|r_k\rangle.$$

A hibavektor kifejezhető a fenti egyenlet  $(\mathbf{H} - \lambda_k)^{-1}$ -gyel való szorzásával balról. Ha  $\lambda_k$ -t ismernénk, ez a lépés problematikus volna, hiszen  $(H - \lambda_k)$  nem invertálható, mivel van nulla sajátértéke. Ezen a ponton azonban két közelítést is teszünk:  $\mathbf{H}$  helyett annak csak a diagonális elemeit tekintjük ( $\mathbf{D}$ ), így az invertálás könnyen elvégezhető. Emellett az egzakt  $\lambda_k$  sajátérték helyett közelítő sajátvektort használunk, ami  $\lambda'_k = \langle \psi'_k | \mathbf{H} | \psi'_k \rangle$ . A hibavektor közelítő kifejezése ezek után:

$$|z\rangle \approx -(\mathbf{D} - \lambda'_k)^{-1} |r_k\rangle.$$

Ha véletlenül  $(D - \lambda'_k)$  valamely diagonális eleme nullává válna, akkor a kifejezés nem lenne invertálható. Ezért ilyenkor egy csillapító faktort adunk ehhez az elemhez ( $10^{-6} - 10^{-8}$  nagyságrendű szám). Az alapállapotot keverő algoritmus a következő lépésekből épül fel:

1. Válasszunk egy kezdővektort ( $|v_l\rangle$ ,  $l = 1$ ).
2. Helyezzük el a  $|v_l\rangle$  vektort, a  $\mathbf{B}$  tömb  $l$ -edik oszlopaként.
3. Számítsuk ki a  $\mathbf{H}|v_l\rangle$  szorzatot és helyezzük el a  $\mathbf{C}$  tömb  $l$ -edik oszlopába.
4. Számítsuk ki a  $\langle v_l | \mathbf{H} | v_i \rangle$  skalárszorzatokat, ahol  $i < l$  az iteráció során már felhalmozott sajátvektorokra megy. Rakjuk az eredményt az  $\mathbf{A}$  tömb  $l$ -edik sorába és oszlopába. Diagonalizáljuk az  $\mathbf{A}$  mátrixot, hogy megkapjuk az alapállapotú  $\psi'$  sajátvektorát és sajátértékét ( $\lambda'$ ).
5. Számítsuk ki a reziduális vektort:

$$|r\rangle = (\mathbf{C} - \lambda' \mathbf{B}) |\psi'\rangle.$$

Ha  $|r\rangle$  normája kisebb mint egy küszöb érték ( $\epsilon$ ), akkor a  $\psi'$  a keresett sajátvektor és az algoritmus leáll. Különben folytassuk az iterációt.

6. Számítsuk ki az eltérésvektort:

$$|z\rangle = (\mathbf{D} - \lambda')^{-1} |r\rangle.$$

Schmidt-ortogonalizáljuk  $|z\rangle$ -t  $|v_i\rangle$ -re és normáljuk.

7. Legyen  $l = l + 1$  és ugorjunk a 2-es pontra.

A fent leírt algoritmus csak egy sajátvektor meghatározására alkalmas, de természetesen ez általánosítható úgy, hogy több gyököt is meghatározzunk. A Davidson algoritmus a legtöbb esetben hatékonyabb mint a Lánczos, viszont kevésbé robusztus, érzékenyebb a kiindulási vektorra. A mi esetünkben kiindulási vektorként a Gross-Pitaevskii vektort választjuk. Ha az  $U/t$  arány túl nagy, a GP vektor helyett egyenlő súllyal vesszük a rács egyenletes betöltését leíró konfigurációt, illetve konfigurációkat. Az iteratív diagonizálás egyik előnye, hogy néhány, formálisan  $N^2$ -es időigényű mátrix-vektor szorzás eredményeképp megkapjuk a keresett gyököt. A gépidő igény így jelentősen csökken, a mátrix tárolási problémája azonban továbbra is fennáll. Hogy ezt a nehézséget feloldjuk, a mátrix hatást fogjuk fel úgy, hogy mátrix a kezdeti vektor valamely komponensével végez valamilyen műveletet és azt a kimeneti vektor komponenseibe írja. Ha a mátrix felépítése és tárolása nélkül meg tudjuk mondani, hogy a Hamilton operátor a kimeneti vektor adott komponensét melyik kezdeti vektor elemekből generálja, akkor a kimeneti vektort meg tudjuk határozni. Így a  $\mathbf{H}$  mátrix tárolására nincs szükség, elegendő csupán a vektorokat tárolni. Ez a memória igényt jelentősen lecsökkenti, a fenti példában 10 TByte-ra. Ez még mindig túlságosan nagy ahhoz, hogy a vektort egyszerre tároljuk a memóriában, azonban diszkre írva és darabonként olvasva be a vektort, a feladat megoldható. Az operátor hatását a mátrix felépítése nélkül számító algoritmust direkt eljárásnak hívjuk. A következő fejezetben azzal foglalkozunk, hogy hogyan számítható az operátor hatása direkt módon.

## 6.2. Indexelés a direkt kódban

### A konfigurációk azonosítása a sorszám segítségével – az indexelés

Az indexelés megértéséhez először határozzuk meg a konfigurációk számát egy  $K$  db site-ot és  $N$  db részecskét tartalmazó rendszerben. A feladat azzal a feladattal

analóg, amikor ki akarjuk számolni, hogy hányféleképpen tudunk elhelyezni  $N$  db golyót  $K$  db tálban. A  $K$  db tálat helyettesítsük  $K - 1$  db elválasztó fallal és határozzuk meg a labdák és a falak összes lehetséges sorrendjét, figyelembe véve hogy a labdák és a falak megkülönböztethetetlenek:

$$N_{conf} = \frac{(N + K - 1)!}{N!(K - 1)!} = \binom{N + K - 1}{K - 1}. \quad (6.1)$$

Most pedig próbáljuk meg sorrendbe rakni a konfigurációkat! Számozzuk be a site-okat és rakjuk be az összes ( $N$  db) részecskét az első site-ra. Ez lesz az első konfiguráció. A konfigurációk azonosítására a betöltésszám vektort használjuk. Ez egy  $K$  db egész számból álló vektor, amelynek  $i$ -edik komponense az  $i$ -edik site-ot elfoglaló részecskék számát adja. Az első konfiguráció tehát  $(N, 0, 0, \dots, 0)$ . A további konfigurációkat a következő algoritmust alkalmazásával kapjuk meg:

- Ha az első site-on van részecske, akkor csökkentsük az első site-on lévő részecskék számát eggyel és növeljük a második site-on lévő részecskék számát eggyel.
- Ha az első site-on nincs részecske, akkor keressük meg azt a legkisebb sorszámú site-ot, amin van és vegyük le róla az összeset. Az egyiket rakjuk fel az eggyel nagyobb site-ra, a maradékot pedig az első site-ra.

Ezzel az algoritmussal az összes konfigurációt legenerálhatjuk és minden konfigurációhoz egyértelműen rendelhetünk egy sorszámot (hanyadik lépésben került sorra a fenti algoritmusban). A módszer hátránya az, hogy csupán a sorszámból nehéz megkapni a konfigurációt (gyakorlatilag le kell számolni), de szerencsére erre a számításaink során nem is volt szükség. A sorszámot viszont meglehetősen könnyen megkaphatjuk a konfiguráció ismeretében a következő algoritmus segítségével. Legyen az azonosítandó konfiguráció a következő betöltésszám vektor:  $(n_1, n_2, \dots, n_k)$ . Az algoritmus kezdetekor  $N' = N$ , ahol  $N$  a részecskék száma.

1. Keressük meg a legmagasabb sorszámú betöltött site-ot (Legyen a site sorszáma  $i$ , a site betöltési száma  $n_i$ , ha  $i = 1$  lépünk a 8-as pontra). Vegyük az összes olyan site-ot, ami ennél kisebb.



2. Az (6.1) egyenlet segítségével határozzuk meg azon konfigurációk számát, amelyet  $N'$  részecske és  $i - 1$  db site esetén kapunk. Itt az  $i$ -edik site betöltését 0-ra állítjuk.
3. Növeljük meg gondolatban az  $i$ -edik site betöltését eggyel (ezt jelölje  $n'_i$ ). Ha  $n'_i = n_i$  lépünk az 5-os pontra. Ha  $n'_i < n_i$ , akkor határozzuk meg azon konfigurációk számát, amiket  $N' - n'_i$  részecske  $i - 1$  site-on való szétosztásával kaphatunk.
4. Ismételjük a 3-as lépést.
5. Amikor ide jutottunk az  $i$ -edik site betöltése elérte  $n_i$ -t. Ezen a ponton bevezetjük az eddig leszámolt konfigurációk összegére az

$$I_i = \sum_{l=0}^{n_i-1} \binom{N + i - 2 - n_{i,I}^{TOT} - l}{i - 2} \quad (6.2)$$

számot. Az  $I_i$  pontosan megadja azon konfigurációk számát, melyek esetén az  $i$ -edik site betöltése kisebb az  $n_i$ -nél. Ezek a konfigurációk mind kisebb sorszámúak a keresetnél.

6. Az  $i$ -edik site betöltését  $n_i$  értéken rögzítjük és visszalépünk az 1-es pontra, úgy hogy  $i - 1$  site-tal,  $N' = N - n_i^{TOT}$  ( $n_i^{TOT} = \sum_{j=i+1}^K n_j$ ) részecskével számolunk és a betöltésszám vektor  $(n_1, n_2, \dots, n_{i-1})$  fragmensét tekintjük.
7. Ezen a ponton előállt a sorszám vektor, amelyet az  $I_i$ -kből építünk

$$\underline{I} = (I_1, I_2, \dots, I_i, \dots, I_K).$$

$\underline{I}$  azon komponensei melyekre  $n_i = 0$ ,  $I_i = 0$  értéket kapnak. A konfiguráció sorszáma:

$$N_I = \sum_{i=1}^K I_i + 1.$$

Egy konfiguráció azonosítására mind az  $\underline{n}$  betöltésszám vektor, mind az  $\underline{I}$  sorszámvektor alkalmas, ezek egymásnak egyértelműen megfeleltethetők. A továbbiakban az  $\underline{I}$  sorszám vektort fogjuk főleg használni, mivel ez áll közvetlenebb kapcsolatban a konfiguráció sorszámával.

## A Hamilton operátor hatása a kódban

Most hogy tudjuk indexelni a konfigurációkat, lássuk hogyan programozható a Hamilton operátor hatása egy tetszőleges konfigurációra! A Hamilton operátor hatásának számításához arra van szükségünk, hogy megállapítsuk tetszőleges  $\underline{I} = (I_1, I_2, \dots, I_K)$  konfigurációra hatva melyik  $\underline{J} = (J_1, J_2, \dots, J_K) = \hat{H}\underline{I}$  konfigurációt kapjuk eredményül. Tudjuk, hogy a Bose-Hubbard operátor kétrészecskés tagja nem változtatja meg a konfigurációt, ezért elég csak az egyrészecskés taggal foglalkoznunk. Nyilvánvaló, hogy az  $\underline{I}$  konfigurációnak megfelelő

$$\underline{n}^I = (n_1^I, n_2^I, \dots, n_K^I)$$

a betöltésszám vektorból az  $i^+j^-$  ( $i < j$ ) operátor hatására az

$$\underline{n}^J = (n_1^J, n_2^J, \dots, n_K^J) = (n_1^I, n_2^I, \dots, n_i^I + 1, \dots, n_j^I - 1, \dots, n_K^I)$$

eredményvektort kapjuk. Azt keressük, hogy hogyan fejezhető ki az eredménynek megfelelő  $\underline{J}$  sorszám vektor a kiindulási  $\underline{I}$  sorszám vektor segítségével:

$$(I_1, I_2, \dots, I_i, \dots, I_K) \xrightarrow{i^+j^-} (J_1, J_2, \dots, J_i, \dots, J_K).$$

Számoljuk ki a két konfiguráció sorszámának különbségét!

$$\Delta = \sum_{p=1}^K I_p + 1 - \left( \sum_{p=1}^K J_p + 1 \right) = \sum_{p=1}^K (I_p - J_p). \quad (6.3)$$

Helyettesítsük be a (6.2) egyenletet a fenti (6.3) egyenletbe.

$$\Delta = \sum_{p=1}^K \left[ \sum_{l=0}^{n_p^I-1} \binom{N+p-2-n_{p,I}^{TOT}-l}{p-2} - \sum_{m=0}^{n_p^J-1} \binom{N+p-2-n_{p,J}^{TOT}-m}{p-2} \right]. \quad (6.4)$$

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy  $i < j$ . A (6.4) egyenletben a  $p$ -re futó összeget öt részre bontjuk :

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4 + \Delta_5.$$

- Minden  $p > j$  esetén az  $n_p$  az  $i^+j^-$  hatására nem változik. Hasonlóképp az  $n_p^{TOT}$  se változik, lásd (6.3). Így a (6.4) egyenletben szereplő különbség mindkét tagjában ugyanazok a paraméterek állnak, ezért az eredmény nulla.

$$\Delta_1 = 0.$$

- Ha  $p = j$ ,  $n_j^I - 1 = n_j^J$ , hiszen a  $j$ -edik site-ról eltüntetünk egy részecskét. Ugyanekkor  $n_{j,I}^{TOT} = n_{j,J}^{TOT}$ , mert a  $j$ -nél magasabb sorszámú site-oknál a részecskék számát nem változtattuk meg. Így a (6.4) egyenletbe behelyettesítve:

$$\Delta_2 = \sum_{l=0}^{n_j^I-1} \binom{N+j-2-n_{j,I}^{TOT}-l}{j-2} - \sum_{m=0}^{n_j^I-2} \binom{N+j-2-n_{j,I}^{TOT}-m}{j-2}.$$

Az egyenlő tagokat kivonva, a  $\Delta_2$ -höz ez fog járulékot adni:

$$\Delta_2 = \binom{N+j-2-n_{j,I}^{TOT}-(n_j-1)}{j-2} = \binom{N+j-1-n_{j-1,I}^{TOT}}{j-2}.$$

- Minden  $i < p < j$ ,  $n_j^I = n_j^J$ , mert ezeknek a site-oknak a részecskeszámát nem változtatjuk meg. De  $n_{p,I}^{TOT} - 1 = n_{p,J}^{TOT}$ , mert a  $j$ -edik site-on csökkentettük a részecskék számát. Ezért a (6.4) kifejezésbe helyettesítve ezt kapjuk:

$$\Delta_3 = \sum_{p=i+1}^{j-1} \sum_{l=0}^{n_p^I-1} \binom{N+p-2-n_{p,I}^{TOT}-l}{p-2} - \sum_{m=0}^{n_p^I-1} \binom{N+p-2-(n_{p,I}^{TOT}-1)-m}{p-2}.$$

Vezessük be az  $m = l + 1$  indexet és vonjuk ki az egyenlő tagokat egymásból:

$$\Delta_3 = \sum_{p=i+1}^{j-1} \binom{N+p-1-n_{p-1,I}^{TOT}}{p-2} - \binom{N+p-1-n_{p,I}^{TOT}}{p-2}.$$

- Ha  $p = i$  akkor  $n_i^I + 1 = n_i^J$ , mert az  $i$ -edik site-on keltettünk egy részecskét és  $n_{p,I}^{TOT} - 1 = n_{p,J}^{TOT}$ , mert a  $j$ -edik site-on csökkentettük a részecskék számát. Az (6.4)-be újra behelyettesítve kapjuk:

$$\Delta_4 = \sum_{l=0}^{n_i^I-1} \binom{N+i-2-n_{i,I}^{TOT}-l}{i-2} - \sum_{m=0}^{n_i^I} \binom{N+i-2-(n_{i,I}^{TOT}-1)-m}{i-2}.$$

Vezessük be az  $m = l + 1$  indexet és vonjuk ki az egyenlő tagokat egymásból.

A  $\Delta_4$ -hez kapott egyetlen járulékok:

$$\Delta_4 = - \binom{N+i-1-n_{i,I}^{TOT}}{i-2}.$$

- Ha  $p < i$  az  $n_i^I = n_i^J$ , mert ezeken a site-okon nem változtatjuk meg a részecskék számát, emellett  $n_{p,I}^{TOT} = n_{p,J}^{TOT}$ , mert ugyan az  $i$ -edik site-on és keltettük a  $j$ -edikről eltüntetünk egy részecskét, de ezek a különbségek pont kiejtik egymást. Ezért a (6.4) egyenletbe helyettesítve az eredmény nulla.

$$\Delta_5 = 0.$$

A fent részletezett öt esetet összegezve az alábbi kifejezést kapjuk az  $\underline{I}$  és  $\underline{J}$  konfigurációk sorszámának különbségére:

$$\begin{aligned} \Delta = & - \binom{N+i-1-n_{i,I}^{TOT}}{i-2} + \binom{N+j-1-n_{j-1,I}^{TOT}}{j-2} \\ & + \sum_{p=i+1}^{j-1} \left[ \binom{N+p-1-n_{p-1,I}^{TOT}}{p-2} - \binom{N+p-1-n_{p,I}^{TOT}}{p-2} \right]. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Ez az alak tovább egyszerűsíthető, a következő összefüggés felhasználásával:

$$\begin{aligned} & \binom{a+b+1}{b+1} - \binom{a+b}{b} = \frac{(a+b+1)!}{a!(b+1)!} - \frac{(a+b)!}{a!b!} \\ = & \frac{(a+b)!}{a!b!} \left( \frac{a+b+1}{b+1} - 1 \right) = \frac{(a+b)!}{(a-1)!(b+1)!} = \binom{a+b}{b+1} \end{aligned} \quad (6.6)$$

ez az úgynevezett teleszkopikus összeg. Csoportosítsuk most a (6.5)-ban szereplő tagokat úgy, hogy az összevonható párok egymás mellé kerüljenek.

$$\begin{aligned} \Delta = & - \underbrace{\binom{N+i-1-n_{i,I}^{TOT}}{i-2} + \binom{N+i-n_{i,I}^{TOT}}{i-1}}_{\binom{N+i-1-n_{i,I}^{TOT}}{i-1}} - \dots \\ & - \underbrace{\binom{N+j-2-n_{j-1,I}^{TOT}}{j-3} + \binom{N+j-1-n_{j-1,I}^{TOT}}{j-2}}_{\binom{N+j-2-n_{j-1,I}^{TOT}}{j-2}}. \end{aligned}$$

Látható, hogy (6.6) felhasználásával a tagok száma felér csökkenthető. Az  $\underline{I}$  és  $\underline{J}$  konfigurációk sorszámának különbségére végül ezt kapjuk:

$$\Delta = \sum_{p=i+1}^j \binom{N+p-n_{p-1,I}^{TOT}-2}{p-2}.$$

A konfigurációk sorszámát az  $IDX$  függvénnyel jelölve:

$$IDX(\underline{I}) - IDX(\underline{J}) = \Delta$$

$$IDX(\underline{J}) = IDX(\underline{I}) - \Delta.$$

A  $j^+i^-$  ( $i < j$ ) hatás is egyszerűen kiértékelhető ha az előző feladat inverzét oldjuk meg:

$$(I_1, I_2, \dots, I_i, \dots, I_K) \xleftarrow{j^+i^-} (J_1, J_2, \dots, J_i, \dots, J_K)$$

mert itt csak arról van szó, hogy egy másik operátor köti össze a két konfigurációt, de a sorszámok különbsége nem változik.

$$IDX(I) = IDX(J) + \Delta.$$

Mivel a faktoriális függvény számítása gépidőigényes feladat, akkor járunk el hatékonyan, ha a binomiális együtthatókat (a Pascal-háromszöget) egyszer a futás elején generáljuk a szükséges indexekig bezárólag. A binomiálisok tárolásigénye elhanyagolható a megoldásvektor mellett, ezért a memóriában tartható.

### Indexelés megszorított maximális site betöltés esetén

A konfigurációs tér dimenziója a paraméterek növelésével olyan nagyra válhat, hogy nemhogy a Hamilton mátrixot, de a hullámfüggvényt ábrázoló vektort sem tudjuk a számítógép memóriájában tárolni. Ezért gyakran szoktak élni azzal a közelítéssel, hogy a betöltési számot a site-okon maximálják. Ehhez újra kell gondolnunk, mind a sorszám generáló, mind a különbség számláló algoritmust.

Első lépésben határozzuk meg a konfigurációk számát a megszorított esetben. Legyen  $M$  a részecskék maximális száma egy site-on. Egy hosszabb levezetés után [4] a konfigurációk számára a következőt kapjuk:

$$N_{conf}^r = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{N}{K+1} \rfloor} (-1)^j \binom{M+N-1-j(K+1)}{M-1} \binom{M}{j}. \quad (6.7)$$

Érdemes összevetni a (6.7) képletet a megszorítás nélküli eset (6.1) kifejezésével, amely az  $N_{conf}$ -ot adja. Látnivaló, hogy bár  $N_{conf}^r$  értéke kisebb mint  $N_{conf}$ , számítása (6.7) alapján bonyolultabb, mivel binomiálisok szorzását és összegzését igényli. Létezik azonban egy másik megfontolás amelynek nyomán  $N_{conf}^r$ -et egy általánosított Pascal-háromszög megfelelő elemeként kapjuk, hasonlóan a megszorítatlan esethez. Ennek bemutatásához tekintsük az

$$R(x) = \sum_{n=0}^K c_n x^n \quad (6.8)$$

egyenletet. Ha a  $c_n$ -ek valamely sorozat elemei, akkor  $R(x)$ -et generátorfüggvénynek hívjuk. A  $c_n$ -eket a következő egyenlet határozza meg:

$$R(x) = \left( \sum_{n=0}^M x^n \right)^K. \quad (6.9)$$

A  $c_N$  szám pontosan azon lehetőségek száma ahányféleképp a (6.9) egyenletben szereplő  $M + 1$  tagú összeg  $K$ -adik hatványában az  $x^N$  kifejezés előfordulhat. Most végezzük el a  $K$  tényező szorzását, de az alsó indexben jegyezzük meg, hogy hanyadik tényezőtől származott az  $x$  hatvány. A könnyebb megértés kedvéért tekintsünk egy  $K=3$ ,  $M=3$ -as rendszert:

$$(x^0 + x^1 + x^2)^3 = x_1^0 x_2^0 x_3^0 + x_1^1 x_2^0 x_3^0 + x_1^2 x_2^0 x_3^0 + x_1^0 x_2^1 x_3^0 + \dots \quad (6.10)$$

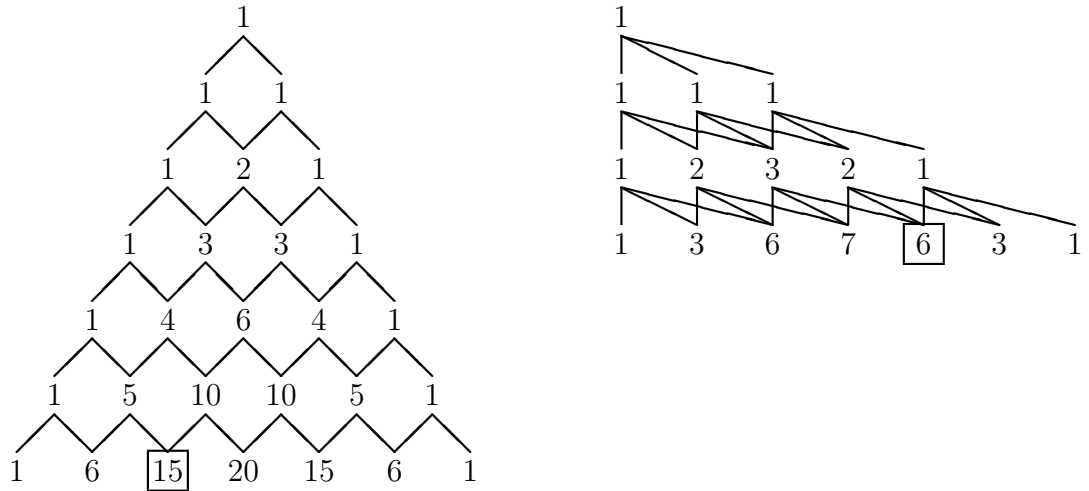
Az alsó indexek megfeleltethetők a site-oknak a felső indexek pedig az egyes site-okra vonatkozó betöltési számoknak. Tehát például a  $x_1^1 x_2^2 x_3^0$  kifejezés a  $(1, 2, 0)$  betöltésszám vektornak feleltethető meg. Így már az is könnyen látható, hogy miért a (6.10) egyenlet bal oldalán szereplő hatványozandó polinom szabja meg a maximális részecskék számát. A site-ok maximális  $M$  betöltését az biztosítja, hogy  $x^{M+1}$ -ediken kifejezés nem jelenik meg a polinomban, így egyszerűen az  $M + 1$  betöltési szám nem jelenik meg a konfigurációban sem. Ha a mi rendszerünkben  $N$  db részecske van, ki kell választanunk azokat a konfigurációkat, ahol a betöltési számok összege megadja az  $N$ -et. Nincs más dolgunk, mint megkeresni a (6.10) egyenletből azokat a tagokat, ahol a kitevők összege  $N$ . A fenti példát tovább véve  $N = 3$  esetre:

$$(x^0 + x^1 + x^2)^3|_N = x_1^2 x_2^1 x_3^0 + x_1^1 x_2^2 x_3^0 + x_1^2 x_2^0 x_3^1 + x_1^1 x_2^1 x_3^1 + x_1^0 x_2^2 x_3^1 + x_1^0 x_2^1 x_3^2.$$

A tagok száma nem más, mint a (6.8) egyenletben szereplő  $c_N$ .

Hogyan kaphatóak meg a  $c_N$  számok? Mindenki ismeri az  $M = 1$  esetet, amikor a  $c_N$ -ek nem mások, mint a Pascal-háromszögbeli számok. Jelölje most  $c_N^K$  a  $K$ -adik sorban  $x^N$  együtthatóját! Minden sor eggyel hosszabb a következőnél, mivel  $K$  növelésével a maximális kitevő is eggyel nő. A  $K + 1$ -edik sor  $c_N^{K+1}$ -jét úgy kapjuk, hogy az előző sor  $c_{N-1}^K$ -it és  $c_N^K$ -jét összeadjuk. Ennek oka, hogy:

$$(1 + x)^{K+1} = (1 + x)^K (1 + x) = (\dots + c_{N-1}^K x^{N-1} + c_N^K x^N + \dots)(1 + x).$$



1. ábra. A bal oldalon egy 4 részecskés 3 site-os rendszerre vonatkozó Pascal-háromszög látható, a jobb oldalon egy általánosított Pascal-háromszög, ahol az egyes site-okon lévő részecskék betöltési számát megszorítottuk 2-re. A bekeretezett számok az adott rendszerre vonatkozó konfigurációs számok.

Csak a baloldalon lévő két kiírt tag adhat járulékot  $x^n$  kifejezéshez, ezért:

$$(1+x)^{K+1} = \dots + \underbrace{(c_{N-1}^K + c_N^K)}_{c_N^{K+1}} x^N + \dots$$

Miben különbözik ettől a tetszőleges  $M$  esete? A  $c_N^K$  számokat továbbra is egy háromszögben tudjuk elrendezni, de a sorok minden lépésben  $M$ -mel hosszabbak, hiszen ennyivel nő a maximális kitevő, ha  $K$  értéke eggyel nő. Ahhoz, hogy  $c_N^{K+1}$ -et megkapjuk  $M+1$  db  $K$ -adik sorban lévő elemet kell felhasználnunk, hiszen:

$$\begin{aligned} R(x) &= (1+x+\dots+x^M)^{K+1} \\ R(x) &= (1+x+\dots+x^M)^K (1+x+\dots+x^M) \\ R(x) &= (\dots c_{N-M}^K x^{N-M} + c_{N-M+1}^K x^{N-M+1} + \dots + c_N^K x^N + \dots)(1+x+\dots+x^M) \\ R(x) &= \dots + \underbrace{(c_{N-M}^K + c_{N-M+1}^K + \dots + c_N^K)}_{c_N^{K+1}} x^N + \dots \end{aligned}$$

Azt látjuk tehát, hogy az általánosított Pascal-háromszögben a felette lévő és attól balra lévő  $M - 1$  db tag összege adja a következő elemet, feltéve hogy létezik az összes tag. A háromszög oszlopai megfelelnek  $x$  hatványaihoz tartozó együtt-hatóknak, a sorai pedig annak, hogy hányadik hatványra van emelve a kifejezés (a számozás nullától kezdődik). Az 1 ábrán egy példát láthatunk a Pascal és az általánosított Pascal-háromszög elemeinek a kiszámítására.

Ebben a csonkolt rendszerben a konfiguráció generáló algoritmus a következő szerint módosul:

1. Az első konfiguráció megfelel annak, amikor az első  $\lfloor \frac{N}{M} \rfloor$  db site-ra  $M$  db részecskét rakunk és a  $\lfloor \frac{N}{M} \rfloor + 1$ -ik site-ra  $N - M \lfloor \frac{N}{M} \rfloor$  db részecskét (itt  $[x]$  jelölje  $x$  egész részét).
2. Ha az első site-on nincs részecske lépj a 4-re. Ha az első site-on van részecske, akkor csökkentjük az első site-on lévő részecskék számát eggyel és növeljük annak a legkisebb sorszámú site-nak a részecskeszámát eggyel, ahol a részecskék száma kisebb mint  $M$ .
3. Lépj a 2-re.
4. Keressük meg azt a legkisebb sorszámú site-ot amin van részecske és vegyük le róla az összeset. Az egyiket rakjuk fel arra következő legkisebb sorszámú site-ra, ahol a részecskék száma kisebb mint  $M$ . A többi részecskét pedig rakjuk fel az első site-ra.
5. Lépj a 2-re.

A sorszámot ugyanúgy határozzuk meg, mint a megkötés nélküli esetben, azzal a különbséggel, hogy a konfigurációk számát a fent említett általánosított Pascal-háromszögből olvassuk ki. Az általánosított Pascal-háromszöget (mátrixot)  $M$  maximális site betöltés esetén jelöljük  $C_M$ -mel. Egy  $N$ ,  $K$  paraméterű rendszer konfigurációinak a számát az (6.8) generátorfüggvény  $x^N$  együtthatója adja, amit a  $C_M(K, N)$  mátrixelemben tárolunk.



## A Hamilton-operátor hatása megszorított maximális betöltés esetén

A korábbiakhoz hasonlóan azt keressük, hogyan hat a csonkolt térben az  $i^+j^-$  ( $i < j$ ) operátor egy  $\underline{I} = (I_1, I_2, \dots, I_K)$  sorszám vektorral jellemezhető konfigurációra. Ahogy az előbb, most is a két konfiguráció sorszámának a különbségét keressük:

$$\Delta = \sum_{p=1}^K I_p - J_p.$$

Az  $I_p$  számok a csonkolt esetben a

$$I_p = \sum_{l=0}^{n_p} C_M(p-1, N - n_{p,I}^{TOT} - l).$$

A megszorítatlan esethez hasonlóan összeadjuk azon konfigurációkat amit, a  $p$ -edik site betöltését 0-tól  $n_p$ -ig futtatva kapunk.

$$\Delta = \sum_{p=1}^K \sum_{l=0}^{n_p^I} C_M(p-1, N - n_{p,I}^{TOT} - l) - \sum_{l=0}^{n_p^J} C_M(p-1, N - n_{p,J}^{TOT} - l).$$

Szintén a korábban látottak szerint a  $p < i$  és  $p > j$  esetben  $n_p^I = n_p^J$  és  $n_{p,I}^{TOT} = n_{p,J}^{TOT}$ , ezért a két tag kiejti egymást, így már az  $i \leq p \leq j$  esetet kell vizsgálnunk. Válasszuk szét az összeget három részre és vizsgáljuk meg külön-külön az eseteket. A számítások során alkalmazom a teljes térben való hatásnál tanultakat. A  $\Delta$  mennyiséget ismét öt részre bontjuk:

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4 + \Delta_5.$$

- A  $p > j$  és  $p < i$  esetek járuléka 0. Ahogy az előző esetben, itt is a paraméterek egyenlőek ezért a tagok kiejtik egymást:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = 0.$$

- Ha  $p = j$ , akkor  $n_j^I - 1 = n_j^J$  és  $n_{j,I}^{TOT} = n_{j,J}^{TOT}$ . Így  $\Delta_2$ -re a következőt kapjuk:

$$\Delta_2 = \sum_{l=0}^{n_j^I} C_M(j-1, N - n_{j,I}^{TOT} - l) - \sum_{l=0}^{n_j^I - 1} C_M(j-1, N - n_{j,I}^{TOT} - l).$$

Az egyenlő tagokkal kiegyeszerűsítve:

$$\Delta_2 = C_M(j-1, N - n_{j-1,I}^{TOT}).$$

- Ha  $i < p < j$ , akkor  $n_j^I = n_j^J$  és  $n_{j,I}^{TOT} - 1 = n_{j,J}^{TOT}$ .

$$\Delta_3 = \sum_{l=0}^{n_p^I} C_M(p-1, N - n_{p,I}^{TOT} - l) - \sum_{l=0}^{n_p^I} C_M(p-1, N - n_{p,I}^{TOT} - l + 1).$$

Az egyenlő tagok kiesése után a következőt kapjuk:

$$\Delta_3 = C_M(p-1, N - n_{p-1,I}^{TOT}) - C_M(p-1, N - n_{p,I}^{TOT} + 1).$$

- Ha  $i = p$ , akkor  $n_i^I + 1 = n_i^J$  és  $n_{i,I}^{TOT} - 1 = n_{i,J}^{TOT}$ .

$$\Delta_4 = \sum_{l=0}^{n_i^I} C_M(i-1, N - n_{i,I}^{TOT} - l) - \sum_{l=0}^{n_i^I+1} C_M(i-1, N - n_{i,I}^{TOT} - l + 1).$$

Az egyenlő tagok kiesése után a következőt kapjuk:

$$\Delta_4 = -C_M(i-1, N - n_{i,I}^{TOT} + 1).$$

Tehát a sorszámok különbségére a következőt kapjuk:

$$\Delta = \sum_{p=i+1}^j C_M(p-1, N - n_{p-1,I}^{TOT}) - C_M(p-2, N - n_{p-2,I}^{TOT} + 1).$$

## 6.3. Bázistranszformáció

A kvantumkémiában az átlagtér (Hartree-Fock) közelítésen túllépő módszerek tipikusan a kanonikus molekulapályák bázisán dolgoznak. A mi esetünkben ennek analógja a Gross-Pitaevskii pályák bázisa. A kvantumkémiái atompálya bázisnak a mi problémánkban a site-okon centrált bázisfüggvények feleltethetők meg. Érdekes megfigyelni, hogy a Hamilton-operátor (4.1) kifejezése a site-bázison számított integrálokat és azokon keltő/eltüntető operátorokat tartalmaz. A (4.3) kifejezés egyszerűnek mondható, elsősorban azért mert a részecske-részecske kölcsönhatást tartalmazó Hubbard tag kizárólag on-site tagokból áll. Ha a (4.3) képletet a GP

függvények bázisára átírnánk (azaz helyettesítenénk a  $\chi_\mu = \sum_i c_\mu^i \varphi_i$  kifejezést minden helyen), a Hubbard tag jóval bonyolultabbá válna, akár négy különböző GP pályát ( $\varphi_i^+ \varphi_j^+ \varphi_k^- \varphi_l^-$ ) is tartalmazó tag is megjelenne benne. Hogy ezt elkerüljük, a Hamilton operátor hatását az eredeti, site-bázison írt alakban számítjuk. Ez azzal jár, hogy minden vektort a site-bázison írt konfigurációk segítségével kell kifejtenuünk. A GP egyenlet megoldása azonban site-bázis helyett GP bázison adódik, és ott egyetlen konfigurációból áll:

$$|\psi_0\rangle = (\varphi_0^+)^N |\text{vac}\rangle. \quad (6.11)$$

Ahhoz, hogy ezt a vektort az egzakt megoldás kiindulásaként használjuk, át kell írjuk a site-bázis. Ehhez  $\varphi_0$ -t fejtsük sorba a site-ok bázisán:

$$|\varphi_0\rangle = \sum_\mu c_0^\mu |\chi_\mu\rangle. \quad (6.12)$$

A  $c_0^\mu$  együtthatókat a Gross-Pitaevskii megoldás során kaptuk meg. Helyettesítsük be a (6.12) egyenletet a (6.11) egyenletbe:

$$|\psi_0\rangle = \left( \sum_\mu c_0^\mu \chi_\mu^+ \right)^N |\text{vac}\rangle = \sum_J C_J X_J^+ |\text{vac}\rangle \quad (6.13)$$

ahol  $X_J$  a  $J$ -edik konfiguráció:

$$X_J^+ = \prod_\mu (\chi_\mu^+)^{n_\mu^J}$$

ahol  $n_\mu^J$  a  $\mu$ -edik site betöltöttsége ( $\sum_\mu n_\mu^J = N$ , ahol  $N$  a részecskék száma). Az  $n_\mu^J$  nem jelent mást mint, hogy a  $X_J$  konfigurációban, hányszor fordul elő a  $\chi_\mu$ . A  $C_J$  koefficienseket a következő algoritmussal tudjuk meghatározni:

1.  $\mu = 0$ ,  $C_J = 1$  és  $N$  a részecskék száma.
2. Ellenőrizzük le, hogy  $n_\mu^J > 0$ , ha nem akkor ugorjunk az 5-ös pontra.
3. A  $\mu$ -edik site a következő járulékot hozza:

$$C_J = C_J (c_0^\mu)^{n_\mu^J} \binom{N}{n_\mu^J}.$$

A binomiális tagot könnyen megnézhetjük, ha a  $\chi_\mu^+$ -n kívül az összes tagot összevonjuk. Ekkor a (6.13) képlet egy kéttagú összeg  $N$ -edik hatványával analóg, és ebben  $(\chi_\mu^+)^{n_\mu^J}$  együtthatója a fent felírt binomiális taggal egyenlő.

4.  $N = N - n_\mu^J$ .

5. Ha  $N = 0$ , akkor a ciklus leáll, egyébként  $\mu = \mu + 1$  és ugorjunk vissza a 2-es pontra.



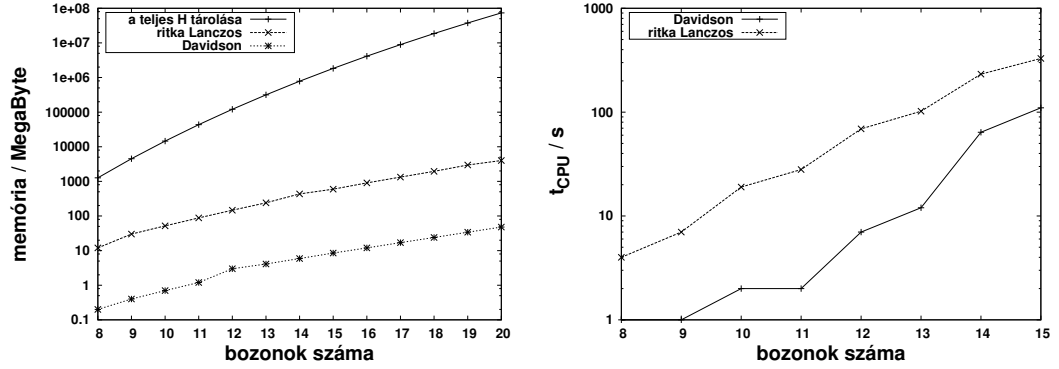
## 7. fejezet

# Tesztelési eredmények

### 7.1. A bozonikus Davidson kód hatékonyságának tesztelése

A saját készítésű programunkat összehasonlítottuk az Advanced Library for Physical Simulations (ALPS) [1] nyílt forráskódú programmal. Az ALPS egy másik iteratív sajátérték kereső eljárást, a Lánczos algoritmust alkalmazza. A mátrixvektor szorzást ez a kód nem direkt módon, hanem hagyományos úton, a mátrixot eltárolva számítja. Ugyanakkor a mátrix és a vektor tárolására ritkamátrix technikát alkalmaz, a memória lehető legjobb kihasználása céljából.

Az 1. ábrán jól látható, hogy a direkt kód memóriaigényt és futási időt tekintve egyaránt előnyösebb a Lánczos kódnál. A kisebb memóriaigény oka, hogy bár az ALPS ritka mátrixot használ, mégis tárolnia kell a mátrix nem nulla elemeit, míg a direkt kód fel sem építi a mátrixot. Az alacsonyabb számítási idő elérése a Davidson algoritmus hatékonyságának és a ritkamátrix technika többlet számításigényének köszönhető.



1. ábra. A ritka Lánzos és a direkt Davidson kód memória igényének és futási idejének összehasonlítása, egy kétdimenziós,  $3 \times 3$  site-ot tartalmazó rendszeren a részecskeszám függvényében.

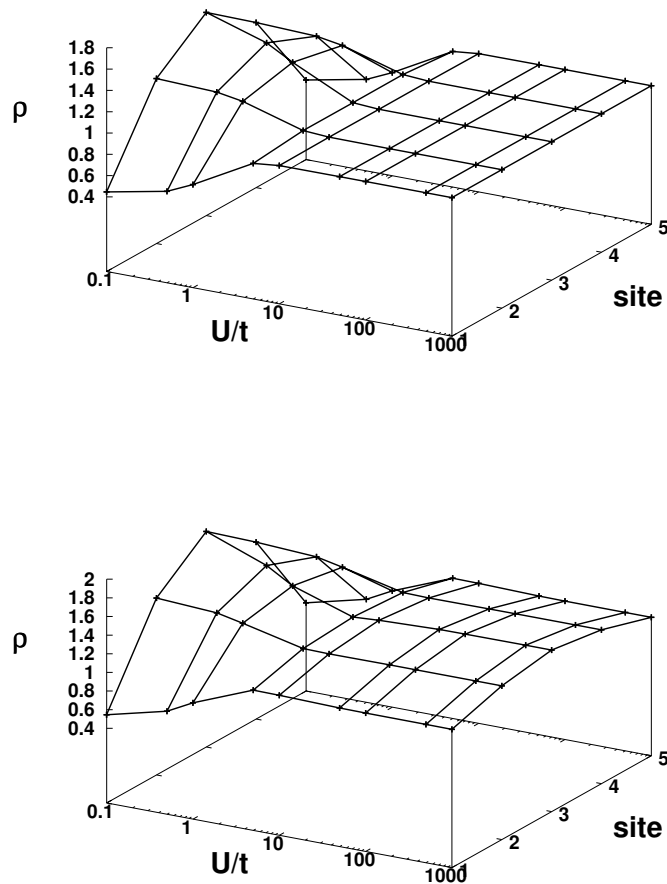
## 7.2. Szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet

Az optikai rács egyik érdekessége, hogy szilárdtestfizikai jelenségek modellezésére, illetve szilárdtestfizikai jellemzők mérésére alkalmazható. Egy szilárdtestben például csak közvetetten és körülményesen tudjuk meghatározni a kötési energiát. Az optikai rácsban csupán ki kell kapcsolni a lézereket és a kinetikus energia növekedésből egyszerűen lehet következtetni a kötési energiára. Egy másik példa a szilárdtestfizikában gyakran alkalmazott szuperfolyékony, illetve Mott szigetelő rendszer modellje.

Szuperfolyékonnak a mi esetünkben azt a rendszert tekintjük, melynek alapállapota szupravezető állapot. Az ilyen rendszerben a hopping kölcsönhatás dominál, a Hubbard-taszítás elhanyagolható ( $\frac{U}{t} = 0$ ). Nincs energetikai akadály annak, hogy az összes részecske akár egyetlen site-on lokalizálódjon, a részecskék ellenállás nélkül mozoghatnak a rácsban. A Mott szigetelő rendszer a másik szélsőséges eset: ilyen rendszer esetében a Hubbard-tag dominál, a  $t$  integrál hatása elhanyagolható ( $t/U = 0$ ). Mivel egyetlen site többszörös betöltése nagy energia növekménnyel jár, az ilyen rendszerre a site-ok lehető legegyszerűsebb betöltése jellemző.

Az  $U/t$  arányt a gyakorlatban a csapdázó lézerefény intenzitásának változtatásával állítják be. Nagyobb intenzitásnál a potenciálgödör mélysége nő, ezért a "hopping paraméter"  $t$  csökken. Modellünkben az  $U$  és  $t$  integrálokat félempirikus pa-

paraméterként kezeljük. Mivel tudjuk, hogy a gyakorlatban a teljes  $U$  és  $t$  skálán végig lehet menni, a paramétereket nem kísérleti adatokból számítjuk, hanem bemeneti adatként kezeljük és tetszőlegesen változtatjuk. Az  $U/t$  arányt folyamatosan növelve meg lehet figyelni a fázisátalakulást a szuperfolyékony állapotból a Mott szigetelő állapotba (2. ábra).



2. ábra. A szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet szemléltetése 5 site-ot tartalmazó rács példáján. A felső ábrán az 5 részecskés, az alsó ábrán a 6 részecskés rendszer látható.

A 2. ábrán a site-okon lévő részecskeszám sűrűséget ( $\rho_\mu$ -t) ábrázoltuk az egzakt



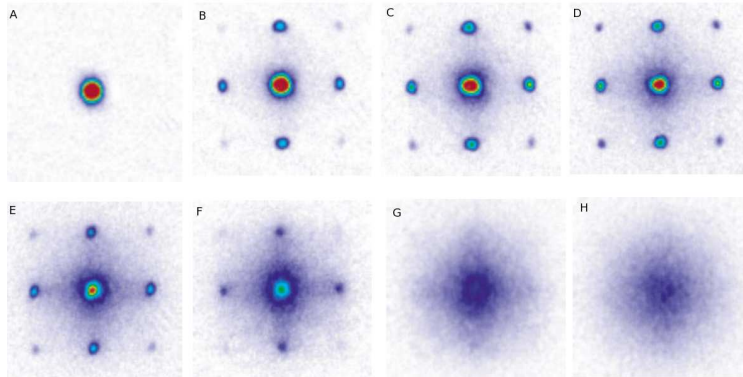
hullámfüggvénnyel, ami az alábbi képlettel számítható:

$$\rho_\mu = \langle \psi | \chi_\mu^+ \chi_\mu^- | \psi \rangle = \sum_I^{N_{\text{conf}}} n_\mu^I c_I^2$$

ahol  $\rho_\mu$  a  $\mu$ -edik site-ra vonatkozó sűrűség,  $N_{\text{conf}}$  konfigurációk száma,  $n_\mu^I$  a  $\mu$ -edik site betöltöttsége az  $I$ -edik konfigurációban és  $c_I$  az  $I$ -edik konfigurációhoz tartozó hullámfüggvény koefficiens. A felső ábrán jól látható, hogy a nagy  $U/t$  felé tartva a site-ok betöltöttsége egyenletessé válik, a rendszer Mott szigetelő állapotba kerül. Érdekes megfigyelni az alsó ábrán, hogy ha a részecskék száma nem egész számú többszöröse a site-ok számának, akkor a Mott szigetelő állapot nem érhető el. Jelen esetben a plusz egy részecskét a site-ok bármelyikén elhelyezhetjük, ezért a hullámfüggvény nem egyetlen egy konfigurációhoz fog tartozni a site-ok bázisán, hanem konfigurációk szuperpozíciójához.

A szuperfolyékony és a Mott-szigetelő rendszer mélyebb megértése céljából tanulmányozzuk végül a [13]. ábrán látható, kísérletileg mért képeket (3). Az interferencia képet úgy kapták, hogy a kvantumgáz csapdázó lézer fejét kikapcsolták és a gázt alkotó atomok becsapódását rögzítették egy ernyőn. Kicsi  $\frac{U}{t}$  arányhoz az A ábra tartozik. Ebben az állapotban a GP hullámfüggvény jó közelítése a rendszer alapállapotának, ezért gondolhatjuk azt, hogy mindegyik részecske ugyanazt a delokalizált GP pályát tölti be. Ennek az állapotnak megfeleltethető egy makroszkopikus hullámfüggvény, amelynek fázisa az egész rácsra kiterjedően koherens. Ebből az állapotból szabadon engedve az atomokat, azok becsapódási képe kirajzolja a rács geometriájának megfelelő interferencia képet. Vizsgáljuk meg most a Mott-szigetelő határesetet (H ábra). Ebben a rendszerben az alapállapot a site-okon centrált függvények szimmetrizált szorzata, mindegyik függvény betöltése azonos és egyenlő a  $K/N$  hányadossal, ahol  $K$  a site-ok és  $N$  a részecskék száma. Ennek az állapotnak nem feleltethető meg a makroszkopikus hullámfüggvény, nincs fáziskoherencia a lokalizált egyrészecske függvények között. Ezért ebből az állapotból szabadon engedve az atomokat, azok interferencia képet nem hoznak létre. Ehelyett a kioltások és erősítések minden ponton kiátlagolódnak és egy elmosódott foltot eredményeznek. A két szélsőséges eset közötti állapotokat mutatja be a 3. ábra sorozata. Jól látható,

hogy az  $U/t$  növelésével ( $E_r$  növelésével) az interferencia maximumok száma és szélessége is nő. Ezt a GP pálya egyre lokalizáltabb karaktere okozza. Ugyanakkor az is megfigyelhető, hogy megjelenik egy elmosódott háttér, ami az alapállapot egyre növekvő Mott-szigetelő karakterére utal. Az  $U/t$  további növelésével 3. ábrán a szuperfolyékony komponenstől származó elhajlási kép egyre kisebb intenzitású, míg a Mott-szigetelő komponenstől származó elmosódott kép folyamatosan erősödik.



3. ábra. A szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet interferencia képei [13]. (A)  $0E_r$ , (B)  $3E_r$ , (C)  $7E_r$ , (D)  $10E_r$ , (E)  $13E_r$ , (F)  $14E_r$ , (G)  $16E_r$ , (H)  $20E_r$ . Az  $E_r = \frac{k^2}{2m}$  egy gyakran használt egység a csapdázó potenciál mérésére,  $k$  a fény hullámvektora,  $m$  az atom tömege. A kísérletet 3D-s köbös rácsban végezték. A rácsban  $2 \cdot 10^5$  db  $^{87}Rb$  atom volt. A rendszer egy irányban 65 db site-ot tartalmazott, a csapdázó frekvencia 852 nm volt.



## 8. fejezet

# Összefoglalás

Dolgozatomban 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 kvázi bozonok rendszere. A dolgozat elején megismerkedhettünk a folyamat alapvető fizikájával és az általunk használt egyszerűsített leírással, a Bose-Hubbard modellel. A Bose-Hubbard operátor a rendszer Hamilton operátorának félempirikus közelítése, amely számos fizikai folyamatot (pl. szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet) elfogadhatóan modellez. 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. Programunkat alkalmaztuk egy kis rendszer szuperfolyékony - Mott szigetelő fázisátalakulásának vizsgálatára. A jövőben a fázisátalakulás témakörében szeretnék szerteágazóbb vizsgálatokat folytatni, illetve vizsgálni kívánok megszorított betöltés alkalmazhatóságát a rendszer leírására. Program fejlesztése tekintetében a parallelizációs és a translációs szimmetria biztosítása jelöli ki a két fontos igényt.



# Irodalomjegyzék

- [1] Algorithms and Libraries for Physics Simulations. <http://alps.comp-phys.org>.
- [2] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari. *Rev. Mod. Phys.*, 71, 1999.
- [3] R. M. Noack and S. R. Manmana. *AIP Conf. Proc.*, 789:93–163, 2005.
- [4] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), and U. Sen. *Advances in Physics*, 56:243–379, 2007.
- [5] W. D. Phillips. Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Nobel Lecture*, 1997.
- [6] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [7] Gy. Marx. *Kvantummechanika*. Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1971.
- [8] I. Mayer. *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry*. Kluwer, New York, 2003.
- [9] P. R. Surján. *Second Quantized Approach to Quantum Chemistry*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1989.
- [10] E. Lundh. *Phys. Rev. A*, 70:033610, 2004.
- [11] G. Lanczos. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45:255–282, 1950.
- [12] E. R. Davidson. *J. Comp. Phys.*, 17:87, 1975.

- [13] M. Greiner, M. O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch, and I. Bloch. *Nature*, 39:415, 2002.