

**Kvázi-bozonok kvantummechanikai leírása a
Bose-Hubbard modellben**

Jeszenszki Péter
II. vegyész MSc

Szakdolgozat

Témavezető: Szabados Ágnes és Surján Péter

**Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Fizikai Kémiai Tanszék
Budapest, 2011.**

Tartalomjegyzék

1	Bevezetés és célkitűzések	2
2	Hűtés és az optikai rács	4
3	A kvantumgázok általános leírása	6
3.1.	A másodkvantált formalizmus	6
3.2.	Az összetett részecske jelleg	10
3.3.	A Hamilton-operátor	11
4	A Bose-Hubbard modell átlagtér közelítésben	13
4.1.	A Brillouin tétel általánosítása	13
4.2.	A Gross-Pitaevskii egyenlet	14
5	A Bose-Hubbard modell megoldása CI módszerrel	17
5.1.	A Davidson algoritmus	17
5.2.	Indexelés a direkt kódban	20
5.3.	Bázistranszformáció	30
6	Tesztelési eredmények	32
6.1.	A bozonikus Davidson kód hatékonyságának tesztelése	32
6.2.	Szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet	33
	Összefoglalás	38
	Summary	39

1. fejezet

Bevezetés és célkitűzések

A kvantumgáz olyan alacsony hőmérsékletre hűtött atomok halmaza, ahol a kvantumjelenségekből származó tulajdonságok már makroszkopikusan is megjelennek. Ha a kvantumgázt alkotó atom magspinjének és elektronspinjének eredője egész szám, akkor az atomot kvázi-bozonnak nevezünk. Az ilyen atomokat tartalmazó rendszer viselkedése Bose-Einstein statisztikát követ.

Az atomok hűtésének és a csapdázás (azaz egy adott térrészre gyűjtés) lézerrel, illetve mágnesekkel végezhető el. Egy kísérleti munkában 1995-ben három különböző módszerrel és anyaggal (^{87}Rb [1], ^7Li [2], ^{23}Na [3]) sikerült a hőmérsékletet a ritka alkálifém gázok kritikus hőmérséklete alá csökkenteni, ami a Bose-Einstein kondenzátum megjelenéséhez vezetett. Nem sokkal ezután elvégezték a kondenzációt a többi alkálifémre és a hidrogénre [4] is. A kísérletek számos elméleti stúdiumot inspiráltak [5, 6].

A lézerrel létrehozott, térben periodikus potenciált optikai rácsnak hívjuk. Jelentősége abban rejlik, hogy rengeteg szilárdtestfizikai modell tesztelésére ad kísérleti lehetőséget könnyen szabályozható körülmények között. Az optikai rácsban csapdázott atomokról már számos elméleti tanulmány született [7, 8, 9]. Ezen munkák többsége a rendszer egyik legegyszerűbb és legnépszerűbb modelljét, a Bose-Hubbard félempirikus modellt alkalmazza.

A Bose-Hubbard modellt a kvantumkémiaiban gyakran alkalmazott konfigurációs kölcsönhatás (Configuration Interaction, CI) módszerrel [10] vizsgáltam. Ez a módszer nem ismeretlen a kvantumgázok területén sem, ahol főleg kvadrupól csapdába zárt gázra végeztek számításokat [11, 12, 13, 14, 15]. A teljes konfigurációs téren vett diagonalizáció (Full CI) adja az adott modellben egzakt megoldást. Ennek optimális beprogramozásával több cikk foglalkozott a Bose-Hubbard modell keretében [16, 17, 18, 19]. A konfigurációs tér dimenziója exponenciálisan nő a részecskék- és a rácspontok számának növelésével,

ezért a számítások igen hamar elvégezhetetlenné válnak. A konfigurációs tér egyik lehetséges redukálása a maximális betöltési szám bevezetése, ilyen technikát alkalmazott Lundh [20] a részecskeszám sűrűség időbeli változásának leírására.

Az itt bemutatott munkám célja egy hatékony diagonalizációs algoritmus fejlesztése és programozása a Bose-Hubbard modell numerikus megoldására. A programírás és tesztelés elsődleges szempontja a számítás hatékonysága: minél kisebb futási idő és memória igény.

2. fejezet

Hűtés és az optikai rács

Az atomok hűtésének mechanizmusa a fény abszorpció-emisszió egymásutánján alapul [21]. 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, így az atom impulzusa csökken. Ugyanez az impulzus megmaradás érvényes az emisszió esetében is, ahol az atom a fotont egy véletlenszerű irányban kibocsátja, ezzel ellentétes irányban az atom impulzusának nőnie kell. Mivel az emisszió iránya véletlenszerű, az egymás utáni emissziók egymás hatását kiegyenlítik, ezért az atom sebessége végeredményben 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. Zeeman-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 vele ütköző fotont, ezért kell ennek elnyeléséhez 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 nagyságrendű

hőmérsékletre hűthetőek az atomok.

A mK-es nagyságrend viszont még mindig kevés a ritka alkálifém gőzök Bose-Einstein kondenzációjához. Az áttörést a párologtatásos hűtés [22] hozta, aminek elvét leginkább ahhoz lehet hasonlítani, amikor elfűjjük a meleg gőzt egy bögre kakaó fölött. Ilyenkor a nagy kinetikus energiával rendelkező atomok távoznak a rendszerből, így a rendszer hőmérséklete csökken. Az atomokat mágneses térrel csapdázzák és az "elfűjást" rádiófrekvenciás sugárforrás segítségével valósítják meg. Ha az atom abszorbeálja a főt, akkor megváltozik a spinje és távozik a csapdából. A sugárforrás frekvenciáját, úgy állítják be, hogy csak azok az atomok abszorbeálják, amiknek a kinetikus energiájuk elég nagy, így a rendszer hőmérséklete nK-es nagyságrendig csökkenthető.

A mágneses csapdában az atom rezonanciafrekvenciájától elhangolt frekvenciájú lézerrel optikai rácsot hozunk létre [23]. Három, páronként merőleges lézerrel állóhullámot keltenek. Az atom ebben a térben úgynevezett dipól erőt érez [22], 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 kvantumgázok általános leírása

3.1. A másodkvantált formalizmus

A másodkvantálás egy olyan technikai eszköz amellyel a mátrixelemek kezelése leegyszerűsíthető, ezért gyakran használják a kvantumkémiában, illetve a sokrészecske rendszerek fizikájában. 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 ψ 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 vektorra rendkívül szemléletesen megfogalmazható. Egy keltő operátor a_i^+ az i -edik állapot betöltöttségét növeli eggyel. Hasonlóképp egy eltüntető operátor a_i a eggyel csökkenti a betöltési számot. 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 hajtva 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, $\hat{n}_i = a_i^+ a_i$. Az \hat{n}_i sajátértéke megadja az i -edik állapot betöltését:

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

Ha összegzünk az összes egyrészecskés 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} egyrészecskés operátor hatását a következő kifejezés adja meg:

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

ahol A_{ij} az ún. egyrészecske integrál:

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

ahol φ_i és φ_j bázisfüggvények. Ugyanígy a kétrészecskés operátor másodkvantált kifejezésre:

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

ahol A_{ijkl} a kétrészecskés integrál:

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

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

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

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 betöltési számai 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 egyrészecskés 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:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i=1}^N A_{ii}.$$

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

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

csak úgy lehet nem nulla, ha i virtuális index, j pedig megegyezik i -vel, azaz $\langle HF | a_j a_i^+ | HF \rangle = (1 - n_j) \delta_{ij}$.

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 megfontolással kapjuk, hogy

$$\langle \hat{A} \rangle = NA_{11}.$$

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.

3.2. Az összetett részecske jelleg

A fent említett keltő és eltüntető operátorok elemi részecskékre vonatkoznak. Az általunk vizsgált rendszert főleg atomok közötti kölcsönhatás befolyásolja, ezért célszerű lenne közvetlenül atomok szintjén megvizsgálni a kölcsönhatás jellegét. Ezzel a kérdéskörrel először Ehrenfest és Oppenheimer foglalkozott [24], ahol bebizonyították, hogy két atomi hullámfüggvény együttes hullámfüggvénye bozon (fermion) jellegű az atomok felcserélésére, ha az atomok teljes spinje egész (félegész).

Vizsgáljuk meg mi is közelebről a témakört, az egyszerűség kedvéért nézzük csupán a páros részecskeszámú atomok, és ezen belül a 1H atom keltő és eltüntető operátorait:

$$A_l^+ | \text{vac} \rangle = \sum_{ij}^N C_{ij}^l b_j^+ a_i^+ | \text{vac} \rangle \quad \langle \text{vac} | A_l = \sum_{ij}^N C_{ij}^{l*} \langle \text{vac} | a_i b_j$$

ahol b_j^+ (b_j) a j -edik proton állapotba és a_i^+ (a_i) az i -edik elektron állapotba keltő (eltüntető) operátor. C_{ij} a megfelelő konfigurációhoz tartozó együttható. A keltő (eltüntető) operátorok egymással vett kommutátora könnyen kiszámítható, annak ismeretében, hogy különböző elemi részecskéken ható operátorok felcserélhetők, mert különböző Hilbert-téren hatnak.

$$[A_k^+, A_l^+] = \sum_{ijmn} C_{ij}^{k*} C_{mn}^l [b_j^+ a_i^+, b_n^+ a_m^+] = 0$$

és hasonlóan az eltüntetőkre is. A keltő és az eltüntető operátor kommutátora sajnos nem ilyen egyszerű:

$$\begin{aligned} [A_k, A_l^+] &= \sum_{ijmn} C_{ij}^{k*} C_{mn}^l [b_j a_i, b_n^+ a_m^+] = \sum_{ijmn} C_{ij}^{k*} C_{mn}^l (\delta_{jm} \delta_{in} - \delta_{in} b_n^+ b_j - \delta_{jm} a_i^+ a_m) \\ [A_k, A_l^+] &= \underbrace{\sum_{ij} C_{ij}^{k*} C_{ij}^l}_{\delta_{kl}} - \underbrace{\left(\sum_{ijm} C_{ij}^{k*} C_{mj}^l b_n^+ b_j + \sum_{ijn} C_{ij}^{k*} C_{in}^l a_m^+ a_i \right)}_{D_{kl}} = \delta_{kl} - D_{kl}. \end{aligned}$$

A bonyolult kommutálási szabályok miatt a mátrixelemek számítása nehezen végezhető el, ezért sokakban felmerült az igény a kommutátor egyszerűsítésére. Az első jelentős cikk Girardoau-tól származik [25], aki a Fock-Tani transzformáció segítségével az úgynevezett "ideális térbe" transzformálta az atomi operátorokat, ahol az atomok úgy kommutálnak, mint az elemi részecskék keltő és eltüntető operátorai. A transzformáció egyik nagy hátránya, hogy $N > 1$ részecskére esetére már nem végezhető el egzaktul. A következő nagy lépést Combescot hozta, aki belátta, hogy a $\langle \text{vac} | A_i^N A_i^{+N} | \text{vac} \rangle = 1$, ha elég

kicsi az atomgázok sűrűsége [26], illetve levezetett egy rekurzívan megoldható képletet arra az esetre, ha ez a feltétel nem teljesül. Ezt a kérdéskört kvantuminformációs módszerekkel is vizsgálta Law [27] és Wootters [28], de jelentősen új eredményre sajnos nem jutottak. Habár az összetett részecske jelleg a kvantumgázok némely tulajdonságát befolyásolja [29, 30] az irodalomban túlnyomó többségben az operátorokat elemi részecske operátorokként kezelik, és ennek ellenére a számítások nem vezettek a valóságtól kvalitatíven eltérő eredményekhez.

A számításaink során az atomi keltő és eltüntető operátorokat, mi is elemi bozonok operátorainak tekintjük, mert így a mátrixelemek számítása egyszerűbb. Nem is tudunk olyan algoritmus létezéséről, ami hatékonyan és jól kezelné az összetett részecske jellegét.

3.3. A Hamilton-operátor

Optikai rácsban csapdázott atomi gázok esetén az egyrészecske állapotok a csapdázópotenciál minimum helyein centrált függvények. Jelölje ezeket χ_μ . 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

$$\hat{H} = \sum_{\mu\nu}^K \langle \chi_\mu | -\frac{1}{2m} \Delta + \hat{V}_0 | \chi_\nu \rangle \chi_\mu^+ \chi_\nu^- + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\lambda\sigma}^K \langle \chi_\mu \chi_\nu | \hat{V} | \chi_\lambda \chi_\sigma \rangle \chi_\mu^+ \chi_\nu^+ \chi_\lambda^- \chi_\sigma^- \quad (3.1)$$

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

A rácspontok középpontjainak távolsága kvantumkémiai léptékben nagy (kb. 1000 nm), ezért jó közelítéssel mondható, hogy csak azok az atomok hatnak kölcsön, amelyek egy rácsponton 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 [31].

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:

$$\langle \chi_\mu \chi_\mu | V | \chi_\mu \chi_\mu \rangle = \frac{4\pi a_s}{m} = U. \quad (3.2)$$

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 spin szerinti integrállal is, a Pauli elv miatt. 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 első szomszéd közelítést. Ez azt jelenti, hogy csak az egymás melletti rácspontok esetén számoljuk ki, a többi esetben elhanyagoljuk ($t_{\mu\nu} = 0$, ha μ és ν nem közvetlen szomszédok), továbbá a nem nulla $t_{\mu\nu}$ értéket egyetlen t paraméterrel közelítjük, ami szabályos optikai rács esetén plauzibilis.

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

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mu\nu \rangle} \chi_\mu^\dagger \chi_\nu + \frac{U}{2} \sum_{\mu} \chi_\mu^\dagger \chi_\mu^\dagger \chi_\mu \chi_\mu. \quad (3.3)$$

ahol a $\langle \mu\nu \rangle$ jelölés arra utal, hogy μ és ν közvetlenül szomszédos rácspontok¹.

¹Érdemes megemlíteni, hogy a fent írt χ_μ bázis nem ortogonális, képleteinket mégis úgy vezettük le, mintha az volna. Akkor jártunk el volna korrektül, ha az átfedő bázis helyett bevezettük volna annak például Löwdin-ortogonalizáltját. Mivel azonban félempirikus elméletekkel dolgozunk, gondolkozhatunk úgy, hogy χ_μ az ortogonalizált bázisra vonatkozik és a t és U paraméterek a megfelelő módon transzformáltak.

4. 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. Érdekes 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.

4.1. A Brillouin tétel általánosítása

A Brillouin-tétel kimondja, hogy az egyszeresen gerjesztett állapotok nem hatnak kölcsön az átlagtér közelítés variációs megoldásával. A tétel bozonikus rendszerekben is igaz, a levezetése analóg a fermionoknál [32] 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 egyrészecskés hullámfüggvényeit φ_i -vel jelöljük. Ezek közül az alapállapothoz tartozó keltő operátor

$$\varphi_0^+ = \sum_{\mu} c_{\mu} \chi_{\mu}^+ \quad (4.1)$$

szerint fejezhető ki a rácspontokon keltő operátorokkal. Az átlagtér közelítés alapállapotú

bozonikus rendszer esetén abból áll, hogy a sokatomos rendszer hullámfüggvényét φ_0^+ ismeretében

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\varphi_0^+)^N |\text{vac}\rangle \quad (4.2)$$

alakban írjuk, azaz az összes részecske ugyanazt az alapállapotot foglalja el. A φ_0^+ (4.1) kifejezésében megjelenő c_μ 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 ψ -t az (4.2) 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 $\delta\varphi_0$ infinitézimális variációjától azt követeljük meg, hogy $\langle\delta\varphi_0|\varphi_0\rangle = 0$ (ez a feltétel a $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$ feltétel variációjából számolható ki). Ekkor $\delta\varphi_0$ -t sorbafejthetjük a φ_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:

$$\langle\varphi_0^N | \varphi_0^+ \varphi_m^- \hat{H} | \varphi_0^N \rangle = 0. \quad (4.3)$$

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

4.2. A Gross-Pitaevskii egyenlet

A Brillouin-tételből kiindulva levezethetjük a φ_0 pálya alakját meghatározó ún. Gross-Pitaevskii¹ egyenletet [32, 33]. Helyettesítsük be a Bose-Hubbard Hamilton operátor (3.3)

¹A 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.

kifejezését az (4.3) egyenletbe:

$$\langle \varphi_0^N | \varphi_0^+ \varphi_m^- \left(-t \sum_{\langle \mu\nu \rangle} \chi_\mu^+ \chi_\nu^- + \frac{U}{2} \sum_{\mu} \chi_\mu^+ \chi_\mu^+ \chi_\mu^- \chi_\mu^- \right) | \varphi_0^N \rangle = 0. \quad (4.4)$$

Fejtsük sorba χ_μ -t a φ_i -k bázisán:

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

és helyettesítsük be ezt a kifejtést az (4.4) 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 egyrészcskés operátor m 0-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 φ_m olyan tetszőleges egyrészcskés függvény, amely kielégíti az ortogonalitási feltételt:

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

Ezért G_{m0} csak úgy lehet nulla, ha teljesül a következő sajátérték-egyenlet:

$$\hat{G} | \varphi_0 \rangle = E_{GP} | \varphi_0 \rangle. \quad (4.5)$$

Az (4.5) egyenlet nem más, mint a φ_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 tasztító potenciál. Ha csak U van jelen a részecskék megpróbálnak úgy elhelyezkedni, hogy egy rácsponton minél kevesebb részecske legyen. Ha a részecskék száma egész számú többszöröse a rácspontok számának, akkor az alapállapot az az állapot, amikor a részecskék egyenletesen töltik be a rácspontokat. Ezt az állapotot közelítőleg sem lehet leírni az (4.2) alakú átlagtér függvénnyel. Ennek oka, hogy egyenletes betöltésű φ_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 rácspontok bázisán. Ugyanekkor ehhez az állapothoz, csak egyetlen egyenletesen betöltött konfiguráció tartozik. Ezen felül ha a részecskék száma nem egész számú többszöröse a rácspontok számának, akkor az alapállapot nem egyetlen egyenletes betöltésű állapot, hanem ilyenek szuperpozíciója. Például ha a rácspontok száma K a részecskék száma pedig $nK + 1$ (ahol n egész), és az nK db részecskét egyenletesen lerakjuk a rácspontokra, 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.

5. fejezet

A Bose-Hubbard modell megoldása CI módszerrel

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. Gyakran alkalmazott módszerek közé tartoznak a Sűrűségmátrix Renormalizációs Csoport (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) [34, 35] és a kvantum Monte Carlo technikák [36, 37, 38] is, amik ugyancsak közelítő megoldások, de kvalitatíve jó eredményeket szolgáltatnak. Ha az optikai rács mérete és a csapdázott atomok száma kellően kicsi, a modell egzakt megoldása is megadható, a teljes konfigurációs téren vett mátrix diagonalizációjával (Full Configuration Interaction, FCI) [16, 17]. Ezt az eljárást egy redukált altérben is elvégezhetjük (például úgy hogy megszorítjuk a maximális betöltéseket az egyes rácspontokon). Ebben a fejezetben egy olyan hatékony algoritmust mutatunk be, amivel a fent említett technikák hatékonyan elvégezhetőek.

5.1. A Davidson algoritmus

Az egzakt megoldást úgy kaphatjuk meg, hogy a konfigurációk terében végezzük el a sajátérték-egyenlet megoldását. A Hamilton-mátrix diagonalizációja D^3 műveletigényű, ahol D a konfigurációk száma. Az D nagyon érzékeny a paraméterek növelésére (lásd a későbbi (5.1) képletet), 20 részecskét és 20 rácspontot tartalmazó rendszerben $D = 1654158345840$. Ezért a hagyományos diagonalizálási technikák (pl. Jacobi, Givens) nem alkalmazhatóak, mert a mátrix teljes diagonalizációja 10^{13} TByte memóriát igényelne és túl időigényes volna. 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 [39] és a Davidson [40] 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 λ_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 mínuszegyszerese:

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

A hibavektor kifejezhető a fenti egyenlet $(\mathbf{H} - \lambda_k)^{-1}$ -gyel való szorzásával balról. Ha λ_k -t ismernénk, ez a lépés problematikus volna, hiszen $(\mathbf{H} - \lambda_k)$ nem invertálható, ha 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 λ_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 $(\mathbf{D} - \lambda'_k)$ 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 $\langle v_l|\mathbf{H}|v_l\rangle$ 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 ψ' sajátvektorát és sajátértékét (λ').
5. Számítsuk ki a reziduális vektort:

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

Ha $|r\rangle$ normája kisebb mint egy küszöb érték (ϵ), akkor a ψ' 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 legtöbbször 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 diagonalizálás 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. Ez a módszer a kvantumgázok területén nem teljesen idegen: Vänskä és Sundholm már írt egy olyan *ab initio* direkt CI kódot [14, 15], ami mágneses csapdába zárt kvantumgázok tulajdonságait számolja. Az általunk használt algoritmus alapja a Streltsov, Alon és Cederbaum által írt cikkben [41] található, aminek számítási igényét csökkentettük, illetve a hatását általánosítottuk a betöltési szám korlátozásával megszorított alterre is. A következő fejezetben azzal foglalkozunk, hogy hogyan számítható az operátor hatása direkt módon.

5.2. Indexelés a direkt kódban

A konfigurációk azonosítása a sorszám segítségével – az indexelés

Az indexelés megértéséhez először határozzuk meg a konfigurációk számát egy K db rácspontot 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 táliban. A K db tálibat 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:

$$N_{conf} = \frac{(N + K - 1)!}{N!(K - 1)!} = \binom{N + K - 1}{K - 1}. \quad (5.1)$$

Most pedig próbáljuk meg sorrendbe rakni a konfigurációkat! Számozzuk be a rácspontokat és rakjuk be az összes (N db) részecskét az első rácspontra. 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 rácspontot 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 rácsponton van részecske, akkor csökkentjük az első rácsponton lévő részecskék számát eggyel és növeljük a második rácsponton lévő részecskék számát eggyel.

- Ha az első rácsponton nincs részecske, akkor keressük meg azt a legkisebb sorszámú rácspontot, amin van és vegyük le róla az összeset. Az egyiket rakjuk fel az eggyel nagyobb rácspontra, a maradékot pedig az első rácspontra.

Ezzel az algoritmussal az összes konfigurációt legenerálhatjuk és minden konfigurációhoz egyértelműen rendelhetünk egy sorszámot (hányadik 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 betöltésiszám 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 rácspontot (Legyen a rácspont sorszáma i , a rácspont betöltési száma n_i , ha $i = 1$ lépünk a 7-es pontra).
2. Az (5.1) egyenlet segítségével határozzuk meg azon konfigurációk számát, amelyet N' részecske és $i - 1$ db rácspont esetén kapunk. Itt az i -edik rácspont betöltését 0-ra állítjuk.
3. Növeljük meg gondolatban az i -edik rácspont 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 $i - 1$ rácsponton való szétosztásával kaphatunk.
4. Ismételjük a 3-as lépést.
5. Amikor ide jutottunk az i -edik rácspont betöltése elérte n_i -t. Ezen a ponton bevezetjük az eddig leszámolt konfigurációk összegére az

$$I_i = \sum_{l=0}^{n_i-1} \binom{N+i-2-n_{i,I}^{TOT}-l}{i-2} \quad (5.2)$$

számot, ahol $n_i^{TOT} = \sum_{j=i+1}^K n_j$. Az I_i pontosan megadja azon konfigurációk számát, melyek esetén az i -edik rácspont betöltése kisebb az n_i -nél. Ezek a konfigurációk mind kisebb sorszámúak a keresetnél.

6. Az i -edik rácspont betöltését n_i értéken rögzítjük és visszalépünk az 1-es pontra, úgy hogy $i - 1$ rácsponttal, $N' = N - n_i^{TOT}$ részecskével számolunk és a betöltésiszám 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 sorszámja:

$$N_I = \sum_{i=1}^K I_i + 1. \quad (5.3)$$

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

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:

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

A legkézenfekvőbb megoldásnak az tűnik, ha \underline{J} sorszámát a 5.3 képletből határozzuk meg. Ezt az eljárást követi a [41] cikk is, de az indexszámítás kevesebb összeadással (és olvasással) is elvégezhető. Számoljuk ki a két konfiguráció sorszámának különbségét!

$$\Delta = \sum_{p=1}^K I_p + 1 - \left(\sum_{p=1}^K J_p + 1 \right) = \sum_{p=1}^K (I_p - J_p). \quad (5.4)$$

Helyettesítsük be a (5.2) egyenletet a fenti (5.4) egyenletbe.

$$\Delta = \sum_{p=1}^K \left[\sum_{l=0}^{n_p^I-1} \binom{N+p-2-n_{p,I}^{TOT}-l}{p-2} - \sum_{m=0}^{n_p^J-1} \binom{N+p-2-n_{p,J}^{TOT}-m}{p-2} \right]. \quad (5.5)$$

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy $i < j$. A (5.5) 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 (5.4). Így a (5.5) 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 rácsponttól eltüntetünk egy részecskét. Ugyanekkor $n_{j,I}^{TOT} = n_{j,J}^{TOT}$, mert a j -nél magasabb sorszámú rácspontoknál a részecskék számát nem változtattuk meg. Így a (5.5) 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 Δ_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 rácspontoknak a részecskeszámát nem változtatjuk meg. De $n_{p,I}^{TOT} - 1 = n_{p,J}^{TOT}$, mert a j -edik rácsponton csökkentettük a részecskék számát. Ezért a (5.5) 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 rácsponton keltettünk egy részecskét és $n_{p,I}^{TOT} - 1 = n_{p,J}^{TOT}$, mert a j -edik rácsponton csökkentettük a részecskék számát. Az (5.5)-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 Δ_4 -hez kapott egyetlen járulék:

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

- Ha $p < i$ az $n_i^I = n_i^J$, mert ezeken a rácspontokon nem változtatjuk meg a részecskék számát, emellett $n_{p,I}^{TOT} = n_{p,J}^{TOT}$, mert ugyan az i -edik rácsponton és keltettük a j -edikről eltüntettünk egy részecskét, de ezek a különbségek pont kiejtik egymást. Ezért a (5.5) 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:

$$\begin{aligned} \Delta = & - \binom{N+i-1-n_{i,I}^{TOT}}{i-2} + \binom{N+j-1-n_{j-1,I}^{TOT}}{j-2} \\ & + \sum_{p=i+1}^{j-1} \left[\binom{N+p-1-n_{p-1,I}^{TOT}}{p-2} - \binom{N+p-1-n_{p,I}^{TOT}}{p-2} \right]. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Ez az alak tovább egyszerűsíthető, a következő összefüggés felhasználásával:

$$\begin{aligned} & \binom{a+b+1}{b+1} - \binom{a+b}{b} = \frac{(a+b+1)!}{a!(b+1)!} - \frac{(a+b)!}{a!b!} \\ & = \frac{(a+b)!}{a!b!} \left(\frac{a+b+1}{b+1} - 1 \right) = \frac{(a+b)!}{(a-1)!(b+1)!} = \binom{a+b}{b+1} \end{aligned} \quad (5.7)$$

ez az úgynevezett teleszkópikus összeg. Csoportosítsuk most a (5.6)-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 (5.7) felhasználásával a tagok száma felére csökkenthető. Az \underline{I} és \underline{J} konfigurációk sorszámának különbségére végül ezt kapjuk:

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

ami kisebb tagszámú összeg, mint az 5.3 esetben. 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 rácspont betöltés esetén

A konfigurációs tér dimenziója a paraméterek növelésével olyan nagyvá 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 rácspontokon 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 rácsponton. Egy hosszabb levezetés után [7] a konfigurációk számára a következőt kapjuk:

$$N_{conf}^r = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{N}{K+1} \rfloor} (-1)^j \binom{M+N-1-j(K+1)}{M-1} \binom{M}{j}. \quad (5.8)$$

Érdeemes összevetni a (5.8) képletet a megszorítás nélküli eset (5.1) kifejezésével, amely az N_{conf} -ot adja. Látnivaló, hogy bár N_{conf}^r értéke kisebb mint N_{conf} , számítása (5.8) 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 alábbi egyenletet:

$$R(x) = \sum_{n=0}^K c_n x^n. \quad (5.9)$$

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

$$R(x) = \left(\sum_{n=0}^M x^n \right)^K. \quad (5.10)$$

A c_N szám pontosan azon lehetőségek száma ahányféleképp a (5.10) 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 hányadik tényezőtől származott az x hatvány. A könnyebb megértés kedvéért tekintsünk egy $K=3$, $M=2$ -es rendszert:

$$(x^0 + x^1 + x^2)^3 = (x_1^0 + x_1^1 + x_1^2)(x_2^0 + x_2^1 + x_2^2)(x_3^0 + x_3^1 + x_3^2) \quad (5.11)$$

$$= x_1^0 x_2^0 x_3^0 + x_1^1 x_2^0 x_3^0 + x_1^2 x_2^0 x_3^0 + x_1^0 x_2^1 x_3^0 + \dots \quad (5.12)$$

Az alsó indexek megfeleltethetők a rácspontoknak a felső indexek pedig az egyes rácspontokra 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 (5.12) egyenlet bal oldalán szereplő hatványozandó polinom szabja meg a maximális részecskék számát. A rácspontok 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 (5.12) 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 (5.9) 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:

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

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 megkapjunk $M + 1$ 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 együtthatóknak, a sorai pedig annak, hogy hányadik hatványra van emelve a kifejezés (a számozás nullától kezdődik). Az 5.2. 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:

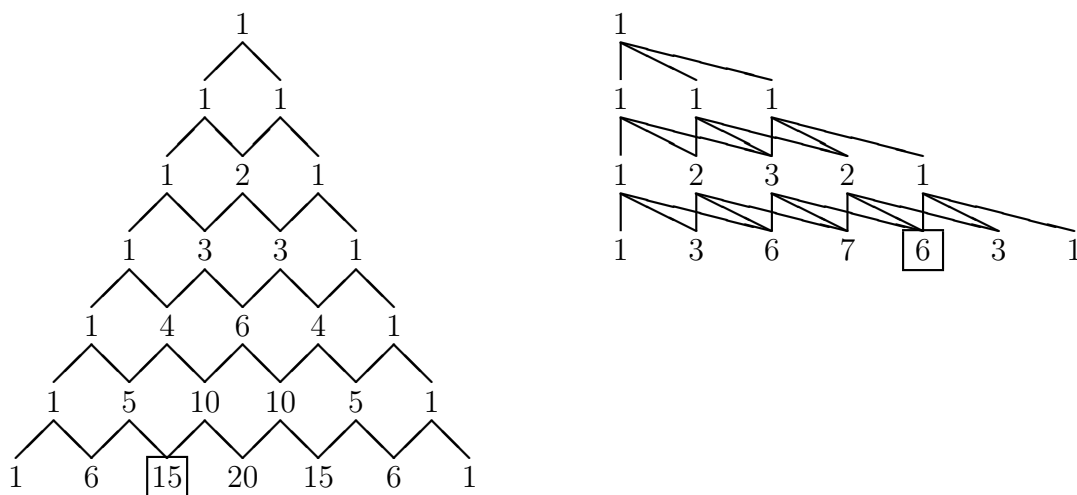
1. Az első konfiguráció megfelel annak, amikor az első $\lfloor \frac{N}{M} \rfloor$ db rácspontra M db részecskét rakunk és a $\lfloor \frac{N}{M} \rfloor + 1$ -ik rácspontra $N - M \lfloor \frac{N}{M} \rfloor$ db részecskét (itt $[x]$ jelölje x egész részét).
2. Ha az első rácsponton nincs részecske lépj a 4-re. Ha az első rácsponton van részecske, akkor csökkentsük az első rácsponton lévő részecskék számát eggyel és növeljük annak a legkisebb sorszámú rácspontnak a részecskeszámát eggyel, ahol a részecskék száma kisebb mint M .

3. Lépj a 2-re.

4. Keressük meg azt a legkisebb sorszámú rácspontot amin van részecske és vegyük le róla az összeset. Az egyiket rakjuk fel arra következő legkisebb sorszámú rácspontra, ahol a részecskék száma kisebb mint M . A többi részecskét pedig rakjuk fel az első rácspontra.

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 rácspont betöltés esetén jelöljük C_M -mel. Egy N , K paraméterű rendszer konfigurációinak a számát az (5.9) generátorfüggvény x^N együtthatója adja, amit a $C_M(K, N)$ mátrixelemben tárolunk.



1. ábra. A bal oldalon egy 4 részecskés 3 rácspontból álló rendszerre vonatkozó Pascal-háromszög látható, a jobb oldalon egy általánosított Pascal-háromszög, ahol az egyes rácspontokon lévő részecskék betöltési számát megszorítottuk 2-re. A bekeretezett számok az adott rendszerre vonatkozó konfigurációk számai.

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 rácspont 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 Δ 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 egyenlők 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 Δ_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:

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

5.3. Bázistranszformáció

A kvantumkémiaiában az átlagtér (Hartree-Fock) közelítésen túllépő módszerek tipikusan a kanonikus molekulapályák bázisán dolgoznak. A mi esetünkben ennek analógja a Gross-Pitaevskii pályák bázisa. A kvantumkémiai atompálya bázisnak a mi problémánkban a rácspont okon centrált bázisfüggvények feleltethetők meg. Érdekes megfigyelni, hogy a Hamilton-operátor (3.1) kifejezése a rácspontok bázisán számított integrálokat és azokon keltő/eltüntető operátorokat tartalmaz. A (3.3) kifejezés egyszerűnek mondható, elsősorban azért mert a részecske-részecske kölcsönhatást tartalmazó Hubbard tag kizárólag on-site (egy rácsponton ható) tagokból áll. Ha a (3.3) 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, a rácspontok bázisán írt alakban számítjuk. Ez azzal jár, hogy minden vektort a rácspontok bázisán írt konfigurációk segítségével kell kifejtenuünk. A GP egyenlet

megoldása azonban a rácspontok bázisa helyett GP bázison adódik, és ott egyetlen konfigurációból áll:

$$|\psi_0\rangle = (\varphi_0^+)^N |\text{vac}\rangle. \quad (5.13)$$

Ahhoz, hogy ezt a vektort az egzakt megoldás kiindulásaként használjuk, át kell írjuk a bázist. Ehhez φ_0 -t fejtjük sorba a rácspontok bázisán:

$$|\varphi_0\rangle = \sum_{\mu} c_0^{\mu} |\chi_{\mu}\rangle. \quad (5.14)$$

A c_0^{μ} együtthatókat a Gross-Pitaevskii megoldás során kaptuk meg. Helyettesítsük be a (5.14) egyenletet a (5.13) egyenletbe:

$$|\psi_0\rangle = \left(\sum_{\mu} c_0^{\mu} \chi_{\mu}^+ \right)^N |\text{vac}\rangle = \sum_J C_J X_J^+ |\text{vac}\rangle \quad (5.15)$$

ahol X_J a J -edik konfiguráció:

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

ahol n_{μ}^J a μ -edik rácspont betöltöttsége ($\sum_{\mu} n_{\mu}^J = N$, ahol N a részecskék száma). Az n_{μ}^J nem jelent mást mint, hogy a X_J konfigurációban, hányszor fordul elő a χ_{μ} . 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 μ -edik rácspont a következő járulékot hozza:

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

A binomiális tagot könnyen megérthetjük, ha a χ_{μ}^+ -n kívül az összes tagot összevonjuk. Ekkor a (5.15) 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.

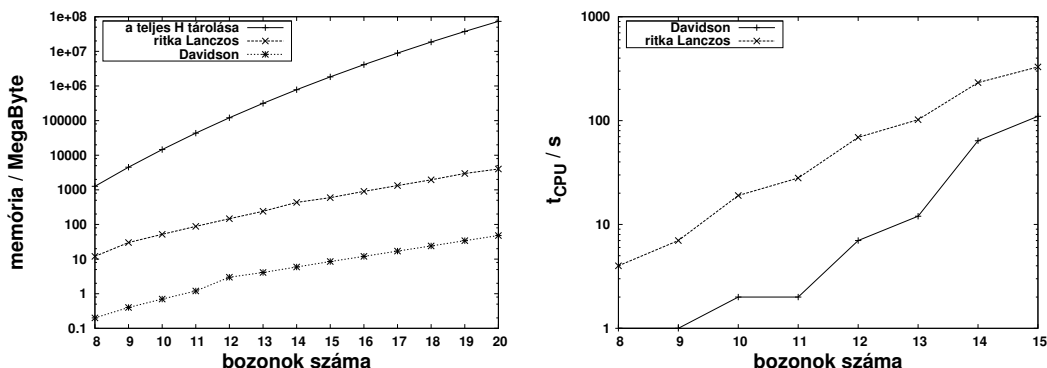
6. fejezet

Tesztelési eredmények

6.1. A bozonikus Davidson kód hatékonyságának tesztelése

A saját készítésű programunkat összehasonlítottuk az Advanced Library for Physical Simulations (ALPS) [42] nyílt forráskódú programmal. Az ALPS egy másik iteratív sajátérték kereső eljárást, a Lánczos algoritmust alkalmazza. A mátrix-vektor 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 6.1. 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, a mátrix nem nulla elemeit mégis tárolnia kell, 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 Lánczos [42] és a direkt Davidson kód memória igényének és futási idejének összehasonlítása, egy kétdimenziós, 3×3 rácspontot tartalmazó rendszeren a részecskeszám függvényében.

6.2. Szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet

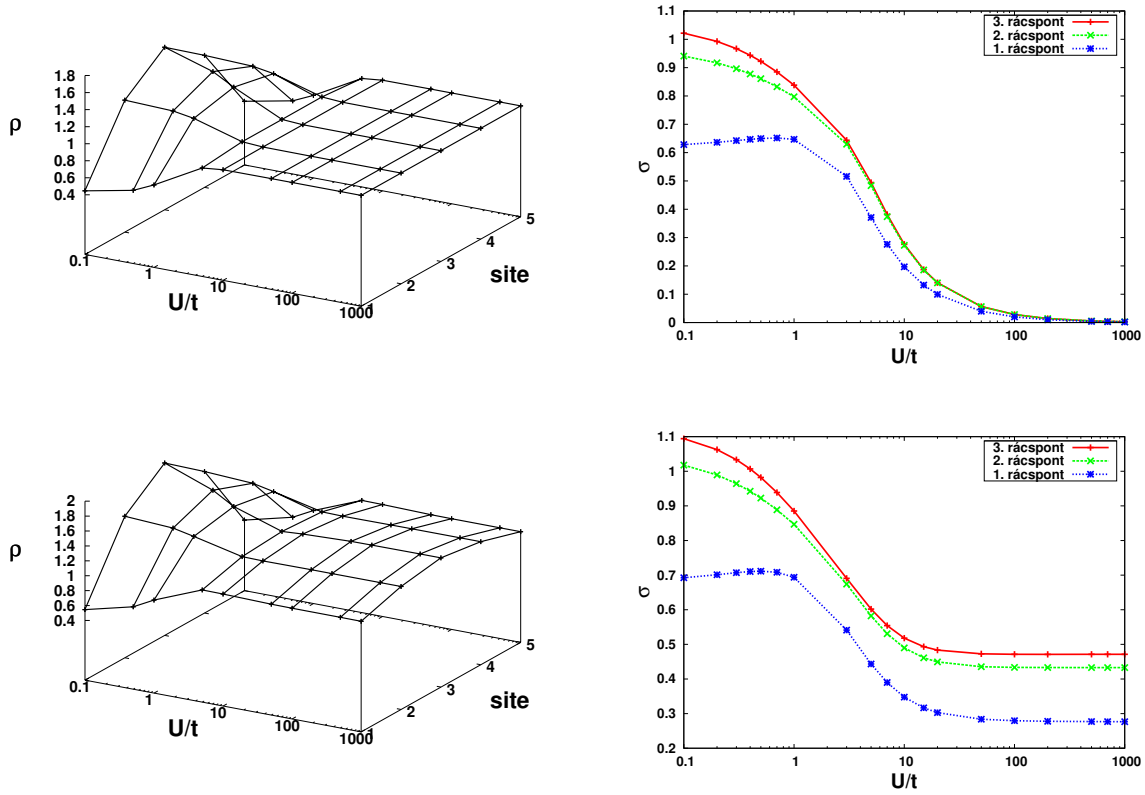
Az optikai rács egyik érdekessége, hogy szilárdtestfizikai jelenségek modellezésére, illetve szilárdtestfizikai jellemzők mérésére alkalmazható. Egy szilárdtestben például csak közvetetten és körülményesen tudjuk meghatározni a kötési energiát. Az optikai rácsban csupán ki kell kapcsolni a lézereket és a kinetikus energia növekedésből egyszerűen lehet következtetni a kötési energiára. Egy másik példa a szilárdtestfizikában gyakran alkalmazott szuperfolyékony, illetve Mott szigetelő rendszer modellje, amit elméleti szempontból először Jaksch és munkatársai vizsgáltak [43], majd később Greiner és munkatársai [44] vizsgáltak meg kísérleti szempontból.

Szuperfolyékonynak a mi esetünkben azt a rendszert tekintjük, amikor a részecskék akadály mentesen tudnak közlekedni a rácspontok között. Az ilyen rendszerben a hopping kölcsönhatás dominál, a Hubbard-taszítás elhanyagolható ($U/t = 0$). Nincs energetikai akadály annak, hogy az összes részecske akár egyetlen rácsponton 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 rácspont többszörös betöltése nagy energia növekménnyel jár, az ilyen rendszerre a rácspontok lehető legegyszerűsebb betöltése jellemző.

Az U/t arányt a gyakorlatban a csapdázó lézerfény intenzitásának változtatásával állítják be. Nagyobb intenzitásnál a potenciálgödör mélysége nő, ezért a "hopping paraméter" t csökken. Modellünkben az U és t integrálokat félempirikus 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. A 6.2. ábrán a rácspontokon lévő részecskeszám sűrűséget ($\rho_{\mu\mu}$ -t) ábrázoltuk az egzakt hullámfüggvénnyel, ami az alábbi képlettel számítható:

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

ahol $\rho_{\mu\mu}$ a μ -edik rácspontokra vonatkozó sűrűség (a sűrűségmátrix $\mu\mu$ -edik mátrixeleme), N_{conf} konfigurációk száma, n_{μ}^I a μ -edik rácspont 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 rácspontok betöltöttsége egyenletessé válik, a rendszer Mott szigetelő állapotba kerül. Érdekes megfigyelni az alsó ábrán, hogy ha a részecskék száma



2. ábra. A szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet szemléltetése 5 rácspontot tartalmazó rács példáján. A felső ábrán az 5 részecskés, az alsó ábrán a 6 részecskés rendszer látható. Bal oldali ábránál: részecskesűrűség, jobb oldali ábránál: betöltésszám variancia

nem egész számú többszöröse a rácspontok számának, akkor a Mott szigetelő állapot nem érhető el. Jelen esetben a plusz egy részecskét a rácspontok bármelyikén elhelyezhetjük, ezért a hullámfüggvény nem egyetlen egy konfigurációhoz fog tartozni a rácspontok bázisán, hanem konfigurációk szuperpozíciójához.

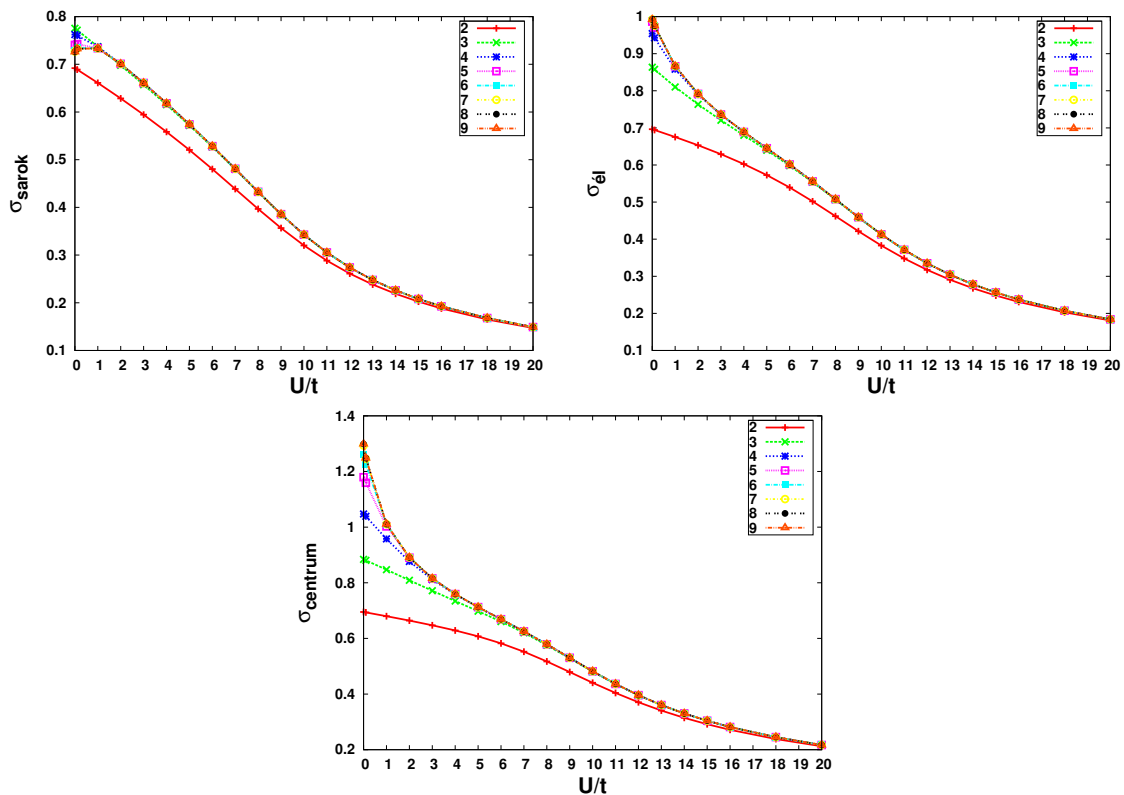
A fázisátmenet jól jellemzi egy másik mennyiség, a rácspontok betöltésszám varianciája (σ_μ), amit a következőképp számolunk:

$$\sigma_\mu = \sqrt{\langle \psi | \chi_\mu^+ \chi_\mu^- \chi_\mu^+ \chi_\mu^- | \psi \rangle - \langle \psi | \chi_\mu^+ \chi_\mu^- | \psi \rangle^2} = \sqrt{\sum_I^{N_{\text{conf}}} n_\mu^I{}^2 c_I^2 - \left(\sum_I^{N_{\text{conf}}} n_\mu^I c_I^2 \right)^2}.$$

A 6.2. ábra a három különböző elhelyezkedésű rácspont betöltésszám varianciáját ábrázolja. Jól látható, hogy azon rácspontok varianciája a nagyobb, amiken nagyobb

a részecskesűrűség. Az U/t növelésével az öt részecskés esetben a három variancia azonos értékhez konvergál, a hat részecskés esetben pedig különbözőkhöz. Így mind a részecskeszám sűrűség, mind a variancia alkalmas arra, hogy jóslásokat tegyen a rendszer állapotára vonatkozólag.

Most pedig vizsgáljuk meg, hogyan hat a maximális betöltés megszorítása a rendszer tulajdonságaira! A 6.2. ábrán három fajta variancia látható különböző maximális betöltési számoknál egy 3×3 -as négyzetrácson 9 részecskével. Jól látható, hogy a hiba leginkább középen lévő rácspont varianciáján jelentkezik (legalsó ábra). Ennek oka, hogy a középső rácspont a hopping paraméter szempontjából a legkedvezőbb elhelyezkedésű (ennek van a legtöbb szomszédja), ezért a szuperfolyékony állapotban ennek a rácspontnak a legnagyobb a betöltési száma. Így a nagyobb betöltési számú konfigurációk elhagyása főleg ennél a rácspontnál jelent gondot.

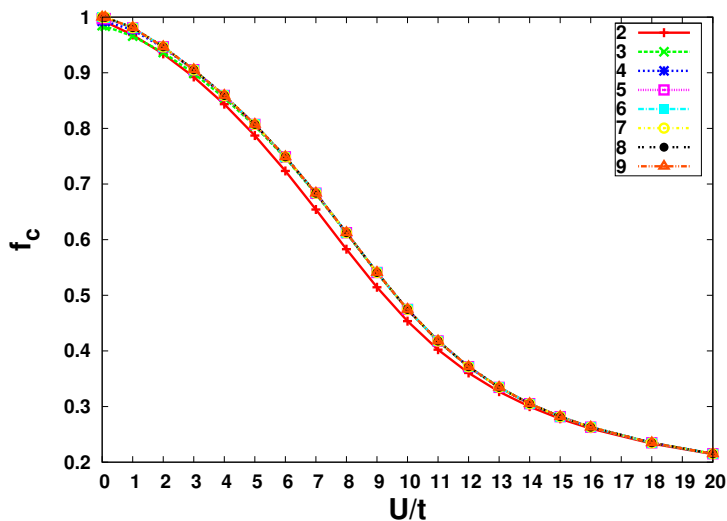


3. ábra. Betöltésszám varianciák változása az U/t függvényében, különböző maximális betöltések esetén egy 3×3 db rácspontot tartalmazó 9 részecskés rendszerben. A három panel három különböző elhelyezkedésű rácspontra vonatkozik sarok, él, centrum. A maximális betöltések értékét a grafikonok címkeje mutattja.

Érdemes azt is megvizsgálni, hogy a megszorítás milyen hatással van a Bose-Einstein kondenzációra. Tekintsük a kondenzált frakció nagyságát mérő paramétert[45]:

$$f_c = \lambda/N$$

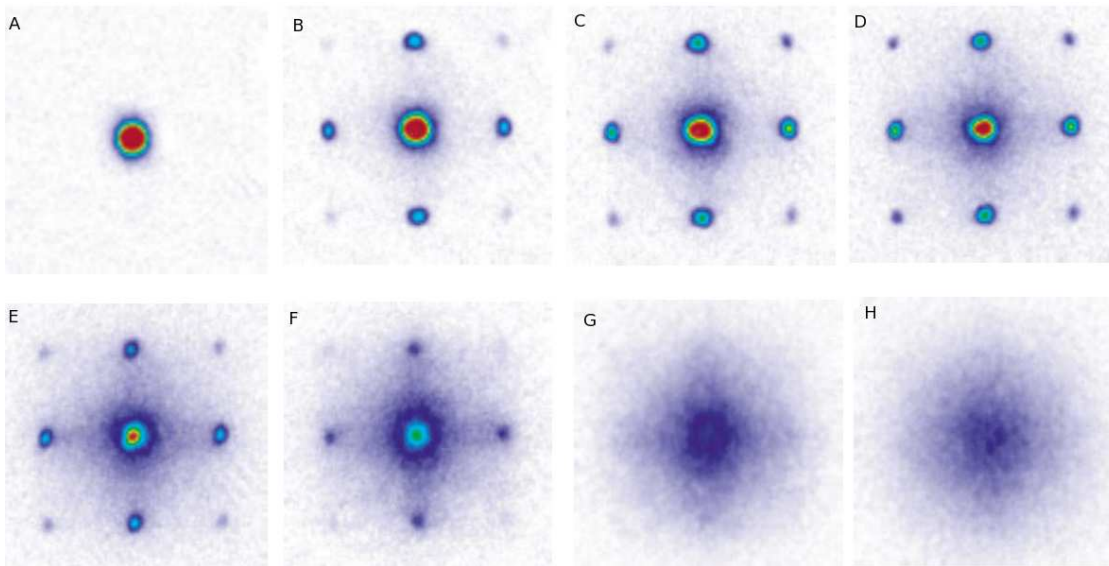
ahol λ a sűrűségmátrix legnagyobb sajátértéke, N a részecskék száma. Ha $f_c \approx 1$ (praktikusan $f_c > 95\%$), akkor Bose-Einstein kondenzációról beszélünk. Számításaink azt mutatják (6.2. ábra), hogy ennek értékét a betöltési számok megszorítása kevésbé befolyásolja, kvalitatíven jó eredményt ad. Általánosságban elmondható, hogy a megszorított altéren végzett számítás mind a kondenzáció mértékét, mind a varianciát a nagy U/t tartományban kielégítően leírja, illetve a kis U/t tartományban, nem túl durva megszorításoknál, az egzakt függvényt alulról jól becsli. Ennek alapján érdemesnek tűnik olyan több lépéses, fokozatosan növekedő megszorított betöltési számokkal dolgozó eljárás vizsgálata, ami lehetőséget úteremt az egzakt megoldás extrapolációjával történő meghatározásra.



4. ábra. Az f_c paraméter változása az U/t függvényében, különböző maximális betöltések esetén egy 3×3 db rácspontot tartalmazó, 9 részecskés rendszerben.

A szuperfolyékony és a Mott-szigetelő rendszer mélyebb megértése céljából tanulmányozzuk végül a 6.2. ábrán látható, kísérletileg mért képeket [44]. Az interferencia képet úgy kapták, hogy a kvantumgáz csapdázó lézer fejét kikapcsolták és a gáz alkotó atomok becsapódását rögzítették egy ernyőn. Kicsi 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 rácspontokon centrált függvények szimmetrizált szorzata, mindegyik függvény betöltése azonos és egyenlő a K/N hányadossal, ahol K a rácspontok és N a részecskék száma. Ennek az állapotnak nem feleltethető meg a makroszkopikus hullámfüggvény, nincs fáziskohérensia 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 6.2. 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 6.2. ábrán a szuperfolyékony komponensből származó elhajlási kép egyre kisebb intenzitású, míg a Mott-szigetelő komponensből származó elmosódott kép folyamatosan erősödik.



5. ábra. A szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet interferencia képei [44]. (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 rácspontot tartalmazott, a csapdázó frekvencia 852 nm volt.

Összefoglalás

Dolgozatomban a kvantumkémiai körökben jól ismert és gyakran használt direkt Davidson algoritmust alkalmaztam az optikai rácspan csapdázott, alacsony hőmérsékletre hűtött kvázi bozonok rendszerére. A dolgozat elején megismerkedhettünk a folyamat alapvető fizikájával és az általunk használt egyszerűsített leírással, a Bose-Hubbard modellel. A Bose-Hubbard Hamilton operátor a rendszer egzakt Hamilton operátorának félempirikus közelítése, amely számos fizikai folyamatot (pl. szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet) elfogadhatóan modellez. Megvizsgáltuk a Bose-Hubbard modell megoldását az átlagter közelítésben és egzaktul. Az utóbbi megoldást a Davidson által a kvantumkémiaiában bevezetett és sikerrel használt eljárással határoztuk meg. Kiemelkedően fontos eredményünk az egzakt megoldást szolgáltató direkt algoritmus, amely a Streltsov, Alon és Cederbaum [41] közleményében leírt algoritmus egy fejlettebb változata. A rácspontok maximális betöltésének megszorításával közelítő megoldás is kapható, melyre szintén készítettünk egy hatékony, direkt Davidson elven működő algoritmust.

Programunkat alkalmaztuk egy kis rendszer szuperfolyékony - Mott szigetelő fázisátalakulásának vizsgálatára és megvizsgáltuk a hiba nagyságát annak függvényében, ahogy a rácspontok maximális betöltését folyamatosan csökkentjük. Az általunk készített programot összehasonlítva egy már létező kóddal (ALPS[42]), azt találtuk, hogy mind a gépidőt mind a memóriagigényt tekintve a mi algoritmusunk hatékonyabb.

Summary

In this thesis, the system of quasi-bosons is treated, cooled to low temperature and trapped in an optical lattice. In the first part, the basic theory is introduced as well as a simplified description, termed the Bose-Hubbard model. The Bose-Hubbard Hamiltonian is a semiempirical approximation of the exact Hamiltonian, which gives an acceptable description of several of physical processes, like the superfluid - Mott insulator transition. The solution of the Bose-Hubbard model is examined in the mean field approximation as well as by a technique providing the exact states and state energies. For the exact solution we use the procedure introduced by Davidson in the field of quantum chemistry. The main result of the present work is the direct algorithm, which gives the exact solution. Approximate solutions may be obtained by restricting the maximal occupation of the sites. The direct Davidson code we implemented is capable of handling this approximation efficiently. Our algorithm can be viewed as an important development of the one described by Streltsov, Alon and Cederbaum [41].

Our program is applied to the description of the superfluid - Mott insulator transition of a small system. We examine the error committed when restricting the maximal occupation of the sites. Comparison of our code with an implementation freely available on the internet (ALPS [42]) have been performed. We find that our code is more efficient, both regarding the processor and the memory requirement.

Irodalomjegyzék

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. *Science*, 269:198, 1995.
- [2] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1687, 1995.
- [3] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten and D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3969, 1995.
- [4] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak. *Phys. Rev. Lett.*, 81:18, 1998.
- [5] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari. *Rev. Mod. Phys.*, 71, 1999.
- [6] R. M. Noack and S. R. Manmana. *AIP Conf. Proc.*, 789:93–163, 2005.
- [7] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen, and U. Sen. *Adv. Phys.*, 56:243, 2007.
- [8] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zeweger. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885, 2008.
- [9] V. I. Yukalov. *Laser Physics*, 19:1–110, 2009.
- [10] A. Szabó and N. S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry*. Donver, New York, 1996.
- [11] B. D. Esry. *Phys. Rev. A*, 55:1147, 1997.
- [12] T. Haugset and H. Haugerud. *Phys. Rev. A*, 57:3809, 1998.
- [13] A. I. Streltsov, O. E. Alon, and L. S. Cederbaum. *Phys. Rev. A*, 73(063626), 1990.
- [14] T. Vänskä and D. Sundholm. *J. Phys. B*, 37:2933, 2004.
- [15] T. Vänskä and D. Sundholm and M. Lindberg. *Phys. Rev. A*, 75:023621, 2007.
- [16] J. M. Zhang and R. X. Dong. *Eur. J. Phys.*, 31:591, 2010.

- [17] D. Zhang and F. Pang. *Commun. Theor Phys.*, 41:183, 2004.
- [18] M. A. E. Leung and W. P. Reinhardt. *Computer Physics Communication*, 117:348, 2007.
- [19] G. Kalosakas and A. R. Bishop. *Phys. Rev A*, 65(043616), 2002.
- [20] E. Lundh. *Phys. Rev. A*, 70:033610, 2004.
- [21] W. D. Phillips. Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Nobel Lecture*, 1997.
- [22] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [23] O. Morsch and M. Oberthaler. *Rev. Mod. Phys.*, 78:179, 2006.
- [24] P. Ehrenfest and J. R. Oppenheimer. *Phys. Rev. Letters*, 37:333, 1931.
- [25] M. D. Girardeau. *J. Math. Phys*, 16:1901, 1975.
- [26] M. Combescot, O. Betbeder-Matibet, and Francois Dubin. *Phys. Rep.*, 463:215, 2008.
- [27] C. K. Law. *Phys. Rev. A*, 71(034306), 2005.
- [28] C. Chudzicki, O. Oke, and W. K. Wootters. *Phys. Rev. Letters*, 104(070402), 2010.
- [29] S. Rombouts, D. Van Neck, K. Peirs, and L. Pollet. *Mod. Phys. Lett. A*, 17:1899, 2002.
- [30] M. Combescot and D. W. Snoke. *Phys. Rev. B*, 78(144303), 2008.
- [31] Gy. Marx. *Kvantummechanika*. Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1971.
- [32] I. Mayer. *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry*. Kluwer, New York, 2003.
- [33] P. R. Surján. *Second Quantized Approach to Quantum Chemistry*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1989.
- [34] B. Schmidt and M. Fleischauer. 75(021601), 2007.
- [35] S. Ejima, H. Fehske, and F. Gebhard. *Eur. Phys. Lett.*, 93(30002), 2011.
- [36] K. Sengupta. *Physica A*, 384:115, 2007.
- [37] C. Trefzger and K. Sengupta. 106(095702), 2011.
- [38] G. E. Astrakharchik and S. Girogini. 66(053614), 2002.

- [39] C. Lanczos. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45:255–282, 1950.
- [40] E. R. Davidson. *J. Comp. Phys.*, 17:87, 1975.
- [41] A. I. Streltsov, O. E. Alon, and L. S. Cederbaum. *Phys. Rev. A*, 81:022124, 2010.
- [42] Algorithms and libraries for physics simulations. <http://alps.comp-phys.org>.
- [43] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller. *Phys. Rev. Lett.*, 81(15), 1998.
- [44] M. Greiner, M. O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch, and I. Bloch. *Nature*, 39:415, 2002.
- [45] O. Penrose and L. Onsager. *Phys. Rev.*, 104:576, 1956.