

# ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ КЛАСТЕРОВ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ АТОМОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ В ДВУМЕРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

А.А. Кузнецов  
НИУ ВШЭ,  
департамент электронной инженерии  
МИЭМ НИУ ВШЭ

## Аннотация

В настоящей работе для кластеров ультрахолодных атомов, локализованных в двумерных оптических решетках, рассчитываются термодинамические свойства и фазовые диаграммы. В ходе выполнения работы проведена разработка соответствующего программного обеспечения для расчетов на суперкомпьютере.

## Введение

В настоящее время одним из основных направлений физики конденсированного состояния является исследование сложных мезоскопических систем, отличающихся сильным взаимодействием между спиновыми магнитными моментами атомов и почти полным отсутствием аналитического описания [1]. Эксперименты для исследования такого рода систем в большинстве случаев чрезвычайно затратны, сложны и дорогостоящи, в связи с чем возникает необходимость численного расчета этих объектов. В данной работе в качестве одного из таких объектов выбрана система ультрахолодных атомов, локализованных в двумерных оптических решетках (лестницах), и взаимодействующих посредством их спиновых магнитных моментов. Рассматривалась конфигурация ловушки в виде двух- и трехногих лестниц на плоскости. В качестве метода исследования были выбраны численные методы, с помощью которых рассчитывались термодинамические свойства и фазовая диаграмма такой системы.

## Модель

В данной работе модель кластеров ультрахолодных атомов была реализована в пакете ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations), созданном для моделирования сильно коррелированных квантово-механических систем. Для описания поведения атомов в оптической ловушке была использована модель Хаббарда для фермионов при нулевой температуре, расположенных в оптических решетках в виде двух- и трехногих лестниц. В качестве алгоритма расчета был выбран метод DMRG (Density Matrix Renormalization Group), являющийся одним из наиболее эффективных методов для расчета энергетического спектра одномерных систем [1]. Взаимодействие с пакетом ALPS проводилось посредством интерфейса Pyalps, реализованном на языке программирования Python.

## Расчеты

Для расчета фазовой диаграммы вычислялись энергии основного состояния системы при различных конфигурациях системы. Конфигурацией системы являлась пара чисел: число фермионов со спином вверх и число фермионов со спином вниз. Далее вычислялись химический потенциал  $\mu$  и эффективное магнитное поле  $h$ , как производные от энергии основного состояния по общему числу частиц и поляризации системы соответственно. Эти производные вычислялись методом аппроксимации конечными разностями.

В работе рассматривались следующие фазы системы:

- вакуум при нулевом количестве частиц (V);
- фаза с равным количеством частиц со спином вверх и спином вниз (ED);

- частично поляризованная фаза при большем количестве спин-вверх частиц (PP);
- две полностью поляризованные фазы при нулевом количестве частиц со спином определенной ориентации (FP<sub>1</sub> и FP<sub>2</sub>);

Для определения границ фаз решались соответствующие уравнения [2]. Получающаяся фазовая диаграмма представляет собой большую каноническую фазовую диаграмму, которая в данной работе была построена для “двуногих” (две цепочки атомов, расположенных параллельно друг другу без смещения) и “трехногих” (три цепочки) лестниц. На рис. 1 показана одна из рассчитанных фазовых диаграмм для системы из трех цепочек атомов.

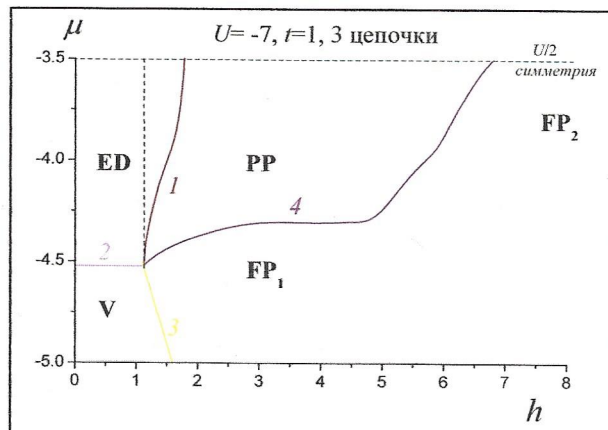


Рис. 1. Фазовая диаграмма для системы из трех цепочек ультрахолодных атомов, помещенных в оптическую ловушку.  $U$  и  $t$  – параметры гамильтониана Хаббарда.

Кроме того, в работе проводилось изучение влияния на фазовую диаграмму изменяющейся амплитуды прыжков между цепочками, что потребовало весьма трудоемких вычислений, на суперкомпьютере.

## Заключение

В работе методом численного моделирования построены фазовые диаграммы кластеров ультрахолодных атомов, находящихся в оптических ловушках, для различных конфигураций ловушек. Выявлены некоторые особенности этих диаграмм, зависящие от числа цепочек и некоторых других параметров системы [2].

## Список литературы

1. В. А. Кашурников, А. В. Красавин “Численные методы квантовой статистики”, Москва, ФИЗМАТЛИТ 2010, 628 с.
2. E.A. Burovski, R.Sh. Ikhsanov, A.A. Kuznetsov and M.Yu. Kagan “Phase diagrams of polarized ultra-cold gases on attractive- $U$  Hubbard ladders”. [Электронный ресурс]. <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1810/1810.06083.pdf>.

Научный руководитель: к.ф.-м.н.,  
доцент ДЭИ МИЭМ ВШЭ

Р.Ш. Ихсанов