Bachelorarbeit
Bose-Hubbard-Modell

Simon Fernbach

Gliederung

- Einleitung
- Grundlagen
- Bose-Hubbard-Modell
- Numerische Behandlung
- Ergebnisse
- Zusammenfassung
- Quelltext
- Literaturverzeichnis

Einleitung

Das Hubbard Modell wurde eingeführt von:

- J. Hubbard – 1963 „Electron correlations in narrow energy bands“ Leitung in Übergangsmetallen [3]
- J. Kanamori – itineranten Ferromagnetismus [5]
- M. C. Gutzwiller – Metall-Isolator Übergang [4]
- R. Pariser, R. Parr, J. Pople – erweiterte Pi-Elektronen Systeme [9]

Einleitung

Hubbard-Modell

- Modell Hamiltonoperator
- Approximative Beschreibung korrelierter Vielteilchensysteme
- Einfachst mögliches Modell mit „echten“ Vielteilchenphänomenen

Einleitung

Unterschied zu „Hartree-Fock“ und „DFT“

- Enthält Zwei-Teilchen-Operatoren in nicht gemittelter Form

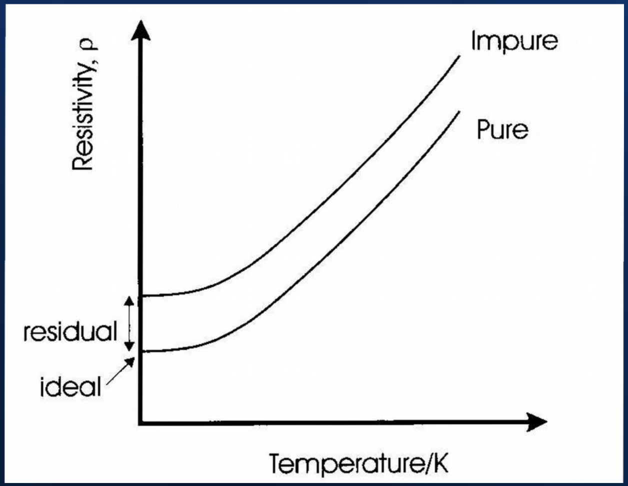
Erfolge:

- Mott-Isolator: Isolator obwohl ungerade Anzahl an Elektronen pro Einheitszelle (z.B: Cobalt-Oxid) [1]
- Magnetismus in Übergangsmetallen [4]
- Hoch-Temperatur Supraleitung [1]
- Ultra-kalte Atome in optischen Fallen [6],[13]
- Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands in organischen Leitern [14]

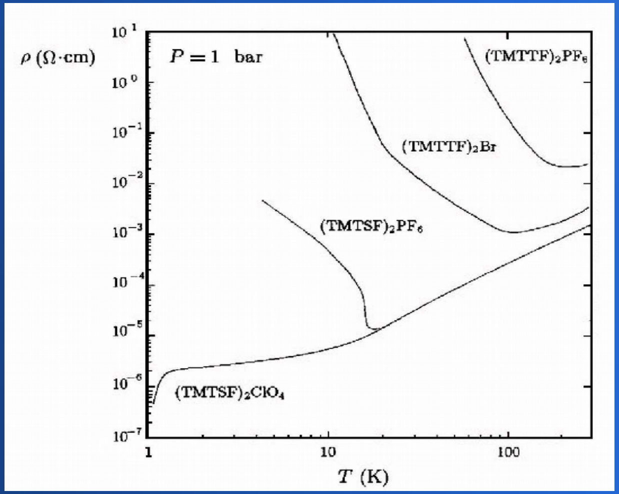
Einleitung

Organische Metalle:

Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands in organischen Leitern



Normales Metall



organische Metalle

Einleitung

Optische Fallen:

Das Bose-Hubbard-Modell kann erxperimentell durch ultra-kalte Atome in optischen Fallen realisiert werden

Überlagerung von linear polarisierten Laserstrahlen bilden stehende Wellen und damit periodisches Potential

Superfluid/Mott-Isolator Übergang konnte experimentell überprüft werden

Einleitung

Cooper Paare:

Elektronen können sich bei niedrigen Temperaturen zu Cooper-Paaren zusammenschließen

Cooper-Paare verhalten sich wie spinlose Bosonen und können mit dem Bose-Hubbard-Modell beschrieben werden

Einleitung

Ziel der Arbeit:

- bestimmen des Phasenübergangs Mott-Isolator/Superfluid
- Teilchen-Fluktuation im Grund und 1. angeregten Zustand
- Zeitentwicklung der Besetungsdichte der Gitterplätze
- Schreiben eines MATLAB-Programms zum lösen des 1D-Bose-Hubbard-Modells

Grundlagen

Hamilton-Operator

$$H = -J \sum_{<i,j>} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i$$

Grundlagen

Hamilton-Operator:

- Statisches Gitter
- tight-binding Näherung
- Wechselwirkung nur auf Gitterplatz → keine weit-reichenden Wechselwirkungen
- Hüpfprozesse nur zu nächsten Nachbarn
- Nur unterstes Band wird betrachtet

Grundlagen

Zeitentwicklung:

Zeitentwicklungs-Operator:

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}|m\rangle\langle m|$$

Eigenzustände des Hamilton-Operators:

$$|m\rangle = \sum_j c_j^m |\vec{n}_j\rangle$$

Zeitenwicklung eines Anfangszustands:

$$|\vec{n}_a(t)\rangle = \hat{U}(t)|\vec{n}_a\rangle \quad = \sum_m \sum_{l,j} e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} c_l^{m*} c_j^m |\vec{n}_l\rangle\langle\vec{n}_j|\vec{n}_a\rangle$$

$$= \sum_m \sum_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} c_l^{m*} c_a^m |\vec{n}_l\rangle$$

Grundlagen

Zweite Quantisierung:

- Quantisierung von Feldern (Feldoperatoren)
- Keine Symmetrisierung der Wellenfunktion
- Besetzungszahl-Zustände
- Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Grundlagen

Fock-Raum:

- Viel-Teilchen-Hilbert-Raum ist ein direktes Produkt aus Ein-Teilchen-Hilbert-Räumen
- Einzelner Viel-Teilchen-Hilbert-Raum kann nur bestimmte Zahl an Teilchen beschreiben

→ Probleme mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Grundlagen

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

Kommutations- bzw. Anti-Kommutationsrelationen:

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0 \qquad [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0 \qquad [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

$$\{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}\} = 0 \qquad \{\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} = 0 \qquad \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$$

und die Operator-Vorschrift:

$$\hat{b}_i^\dagger|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots, n_M\rangle = \sqrt{n_i + 1}|n_1, n_2, \ldots, n_i + 1, \ldots, n_M\rangle$$

$$\hat{b}_i|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots, n_M\rangle = \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_M\rangle$$

$$\hat{b}_i|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots, n_M\rangle = 0 \qquad \leftrightarrow \qquad n_i = 0$$

$$\hat{b}_i^\dagger|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots, n_M\rangle = 0 \qquad \leftrightarrow \qquad n_i = 1$$

Bose-Hubbard-Modell

Band-Limit (U=0):

für U << J ist es Superfluid und im Grenzfall U=0 exakt lösbar

$$\hat{H} = -2J \sum_k \cos(k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = -2J \sum_k \cos(k) \hat{n}_k$$

Bose-Hubbard-Modell

atomares Limit (J=0):

bei U>>J handelt es sich um einen Mott-Isolator und ist exakt lösbar

$$
\begin{aligned}
|\vec{n}_m\rangle &= |n_1^m, n_2^m, \ldots, n_i^m, \ldots, n_M^m\rangle \\
E_m &= \frac{U}{2}\left(\sum_{i=1}^{M} {n_m^i}^2 - N\right)
\end{aligned}
$$

Numerische Behandlung

- Lösen des Hamilton-Operators für verschiedene U/J
- Berechnen der Erwartungswerte von interessanten Größen
- Temperaturabhängigkeit über Bose-Einstein-Verteilung

Numerische Behandlung

Dimension des Hilbert-Raums (n):

$$n = \binom{N+M-1}{M-1} = \frac{(N+M-1)!}{N!(M-1)!}$$

Tabelle 1: Wachstum der Hilbert-Raum-Dimension

N	n	$H_{mn} \sim n^2$	kB
3	10	100	0.8
5	126	$1.58 \cdot 10^4$	127.0
10	$9.23 \cdot 10^4$	$8.53 \cdot 10^9$	$6.82 \cdot 10^7$
15	$7.75 \cdot 10^7$	$6.01 \cdot 10^{15}$	$4.81 \cdot 10^{13}$
20	$6.89 \cdot 10^{10}$	$4.75 \cdot 10^{21}$	$3.80 \cdot 10^{19}$

Numerische Behandlung

Hamilton-Matrix:

$$H_{mn} \quad = \langle \vec{n}_m | \hat{H} | \vec{n}_n \rangle = H_J + H_U$$

Wechselwirkung und chemisches Potential sind problemlos

Hüpfterm etwas aufwändiger:

$$\hat{H}_J = -J(\,\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_M + \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2 + \hat{b}_M^\dagger \hat{b}_{M-1} + \hat{b}_M^\dagger \hat{b}_1 + \sum_{i=2}^{M-1} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i-1} + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1}))$$

Ergebnisse

Bandlücke:

$$\Delta = E_{ox} + E_{ion} = (E_G(N+1) - E_G(N)) + (E_G(N-1) - E_G(N))$$

Entscheidet ob Mott-Isolator/Superfluid

- $\Delta > 0$ Mott-Isolator
- $\Delta = 0$ Superfluid

Phasenübergang dort wo Δ verschwindet

Ergebnisse

Bandlücke: $\Delta = (-0.6 \pm 1.7) \cdot 10^{-2}$

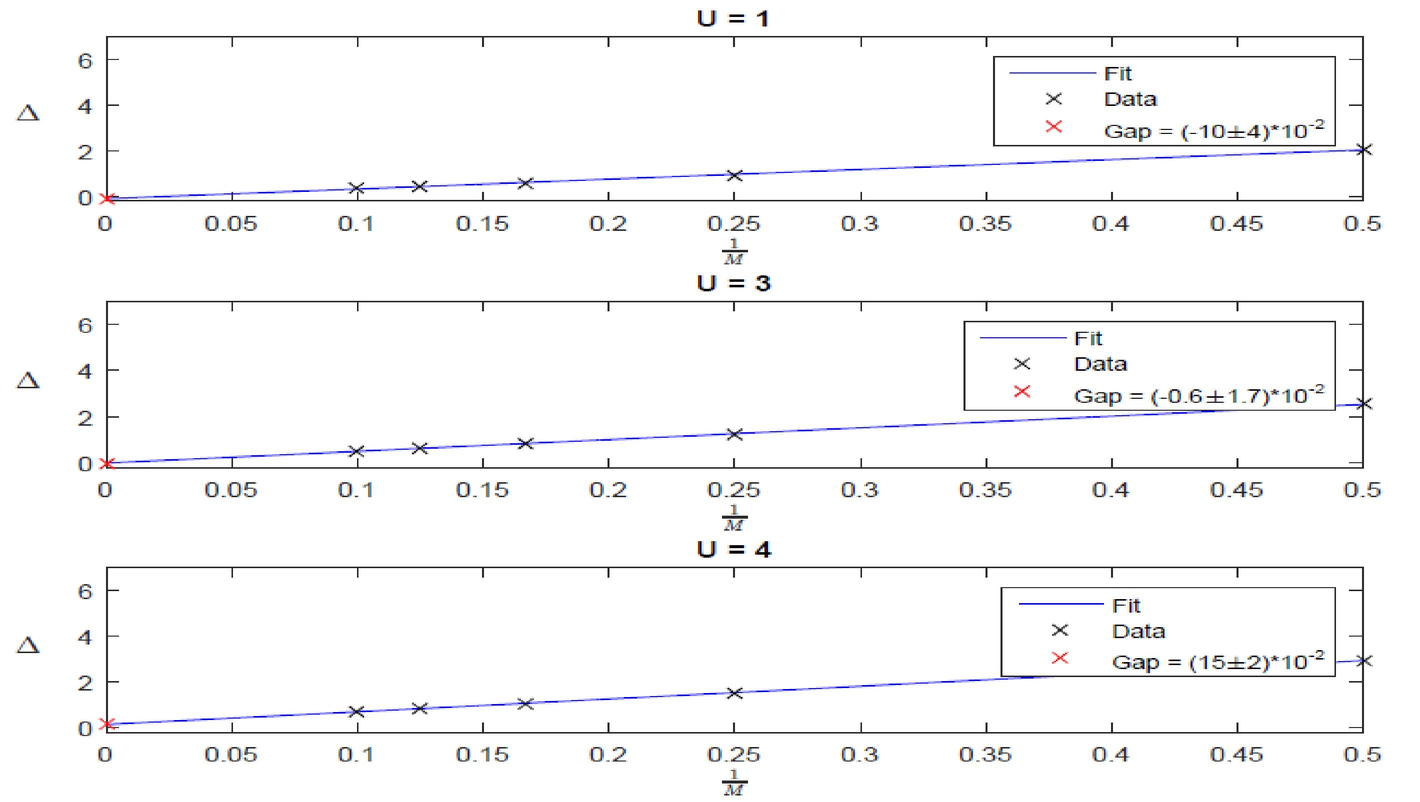


Abbildung 2: Gap Δ für verschiedene U mit $\frac{N}{M} = 1$. Man sieht die Gap verschwindet im Rahmen der Unsicherheit für $U \approx 3$

Ergebnisse

Bandlücke: $\Delta = (-0.6 \pm 1.7) \cdot 10^{-2}$

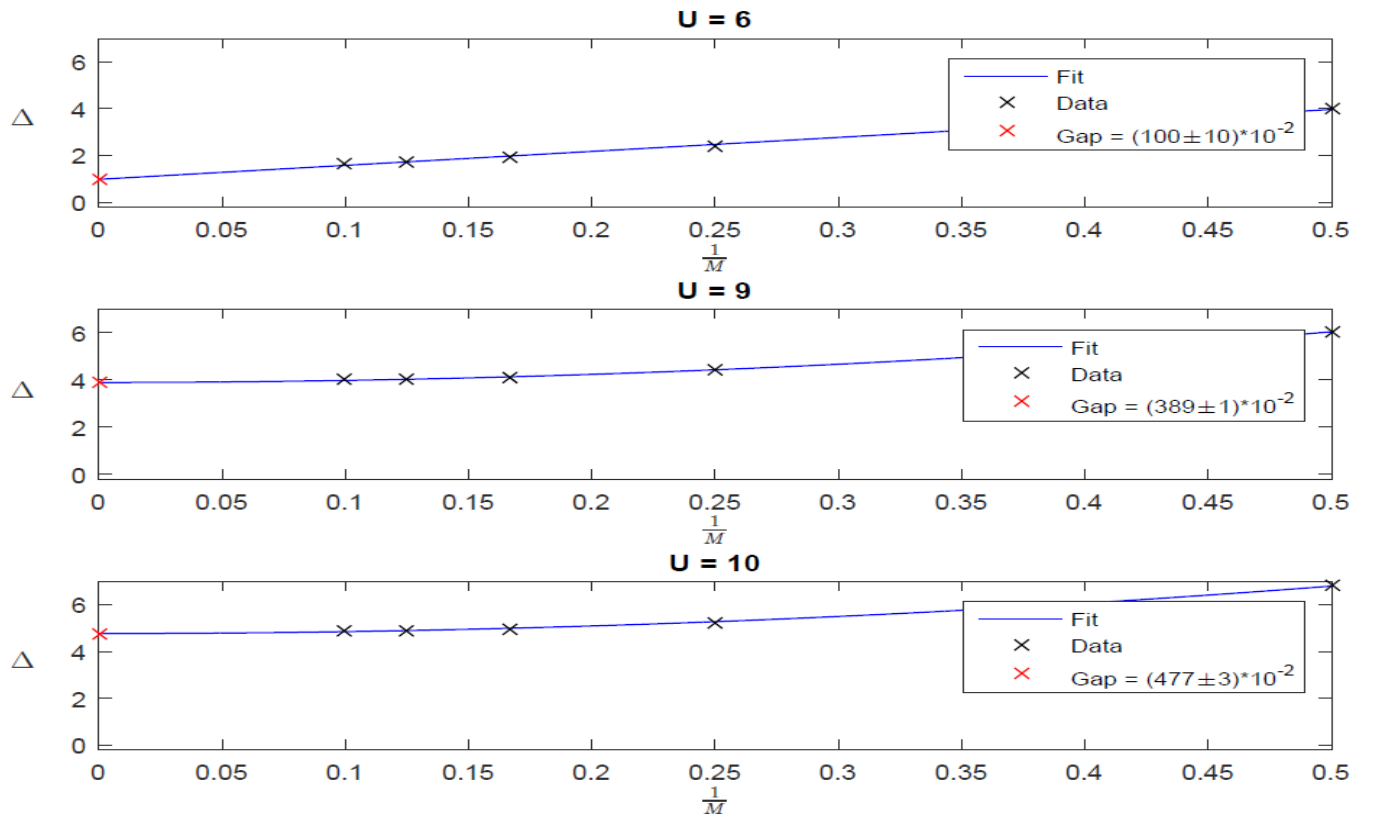


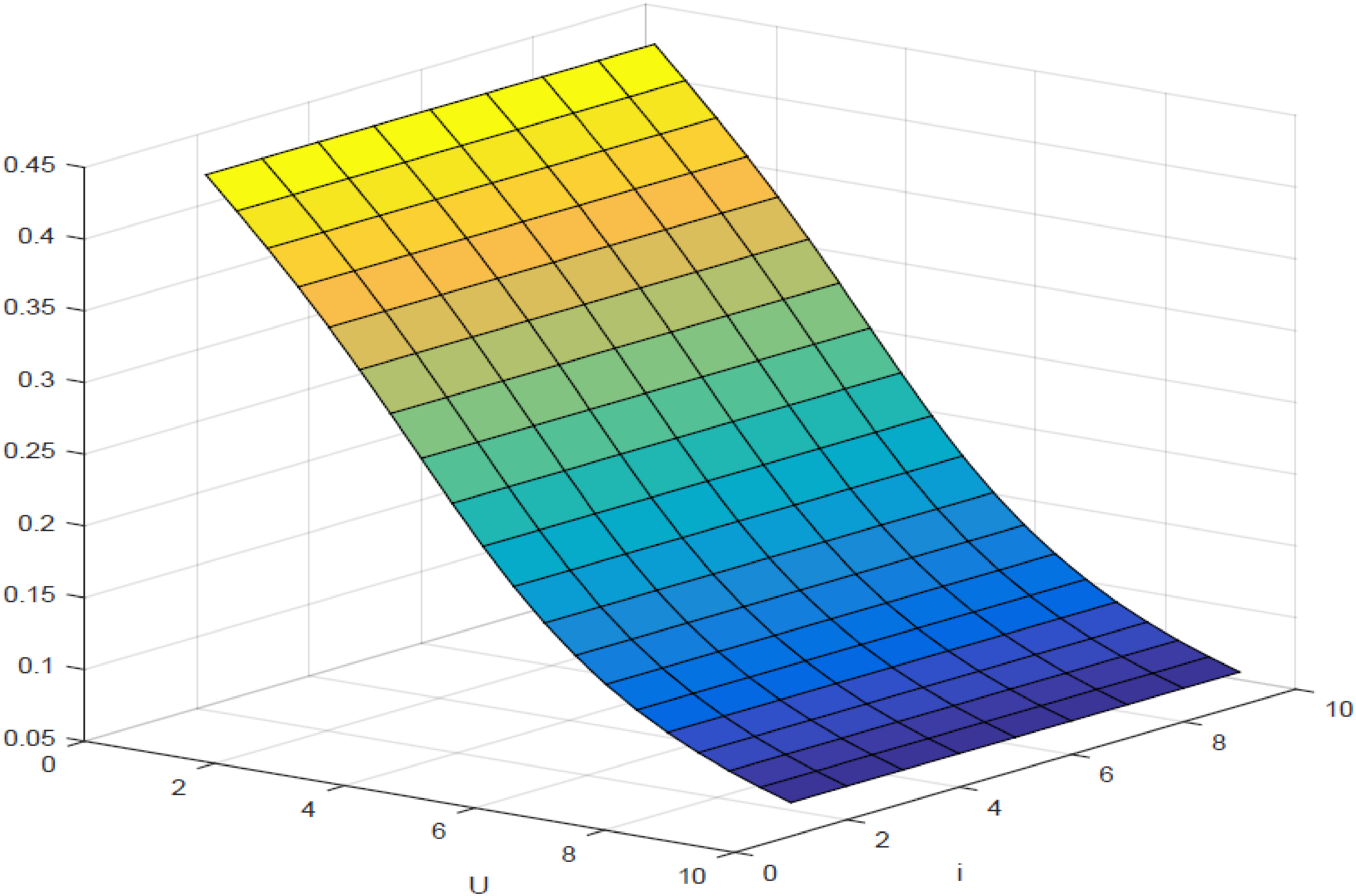
Abbildung 3: Gap Δ für verschiedene U mit $\frac{N}{M} = 1$

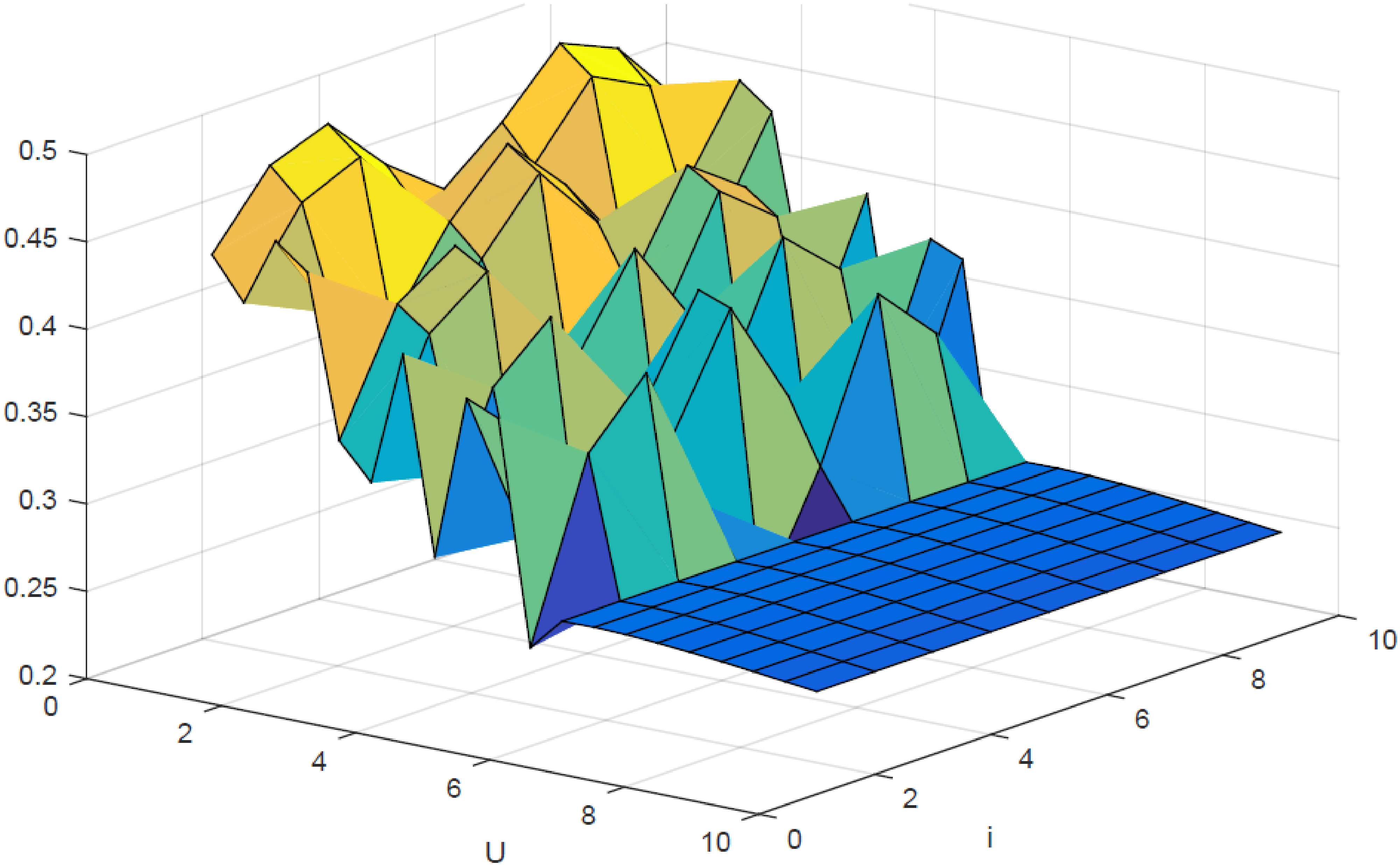
Ergebnisse

Teilchen-Fluktuation:

$$\mathrm{var}(\hat{n}_i) = \langle \hat{n}_i^2 \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle^2$$

- Mobilität der Teilchen
- Ändert sich wenn Teilchen zu oder von Gitterplatz hüpfen
- bei steigendem U nimmt Teilchen-Fluktuation ab


0.45
0.4
0.35
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
2
4
6
8
10
U
0
2
4
6
8
10
i


0.5
0.45
0.4
0.35
0.3
0.25
0.2
0
2
4
6
8
10
U
0
2
4
6
8
10
i

Ergebnisse

Zeitentwicklung der Teilchendichte:

Anfangszustand: $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1,0,0,0,0,0,0,0,0,1\rangle$

$$\langle \hat{n}_i(t)\rangle = \langle \vec{n}_a(t)|\hat{n}_i|\vec{n}_a(t)\rangle = \sum_{n,m}\sum_{l} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t} c_l^n c_a^{n*} c_l^{m*} c_a^m n_l^i$$

Geschwindigkeit der Teilchen kann über max. der Teilchendichte bestimmt werden

$$\langle v\rangle = \sum_{i=1}^{T-1} \frac{\text{max. } \langle n(t_{i+1})\rangle - \text{max. } \langle n(t_i)\rangle}{t_{i+1}-t_i} = 1.4 \text{ Gitterpltze} \cdot \frac{J}{\hbar}$$

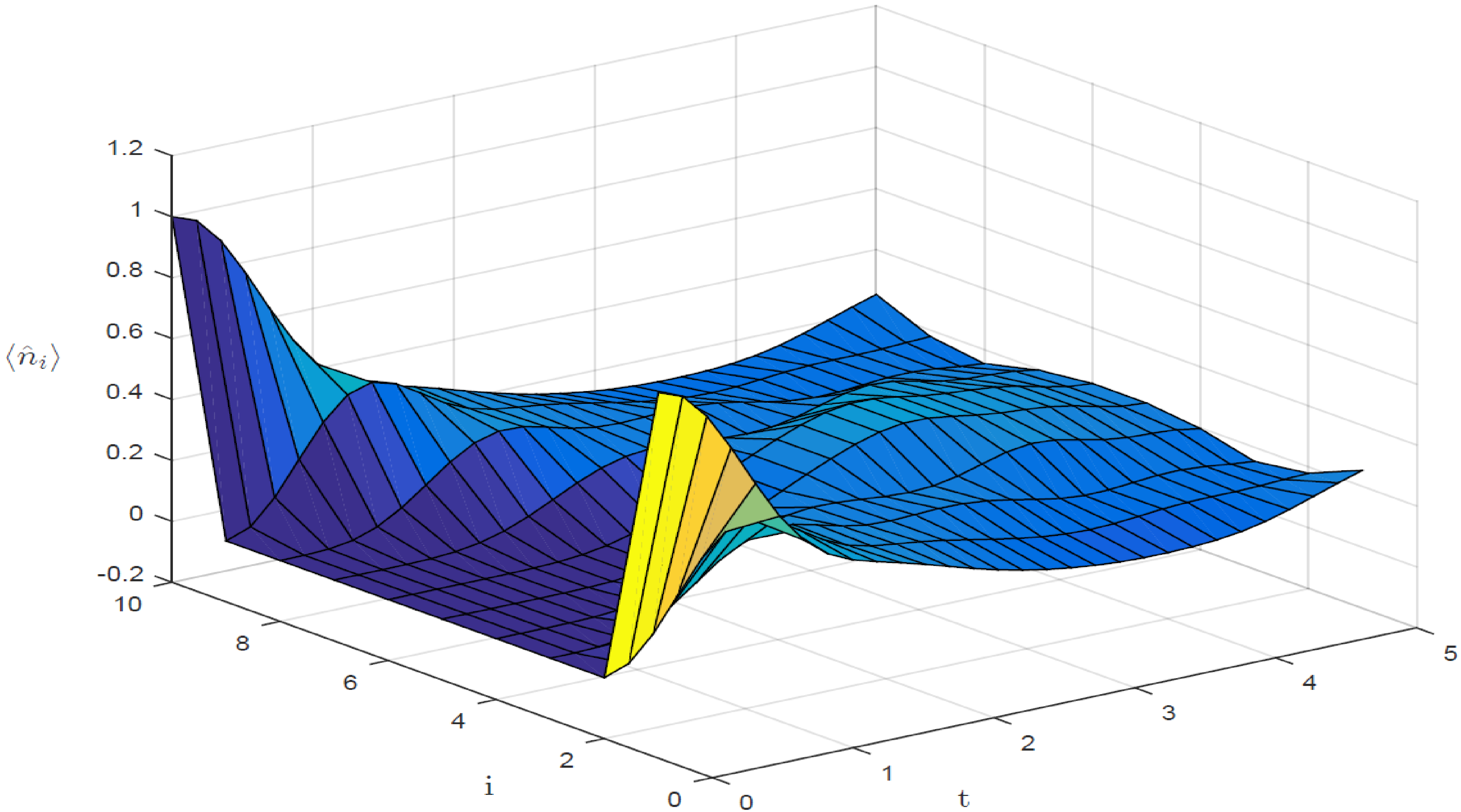


Abbildung 8: $\langle n_i(t) \rangle$ - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit $U = 2$ und Anfangszustand $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1,0,0,0,0,0,0,0,0,1\rangle$

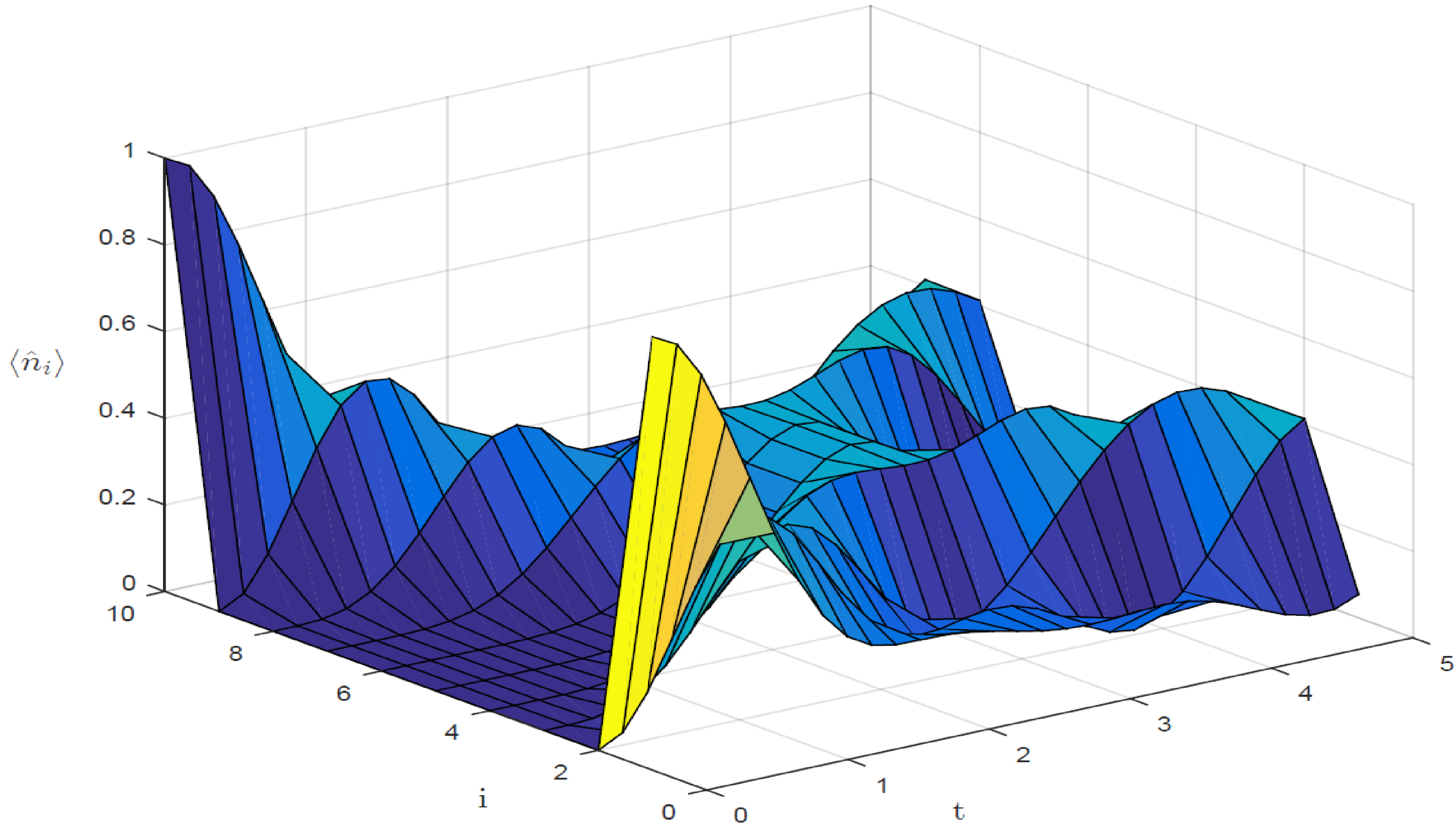


Abbildung 9: $\langle n_i(t) \rangle$ - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit $U = 30$ und Anfangszustand $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1,0,0,0,0,0,0,0,0,1\rangle$

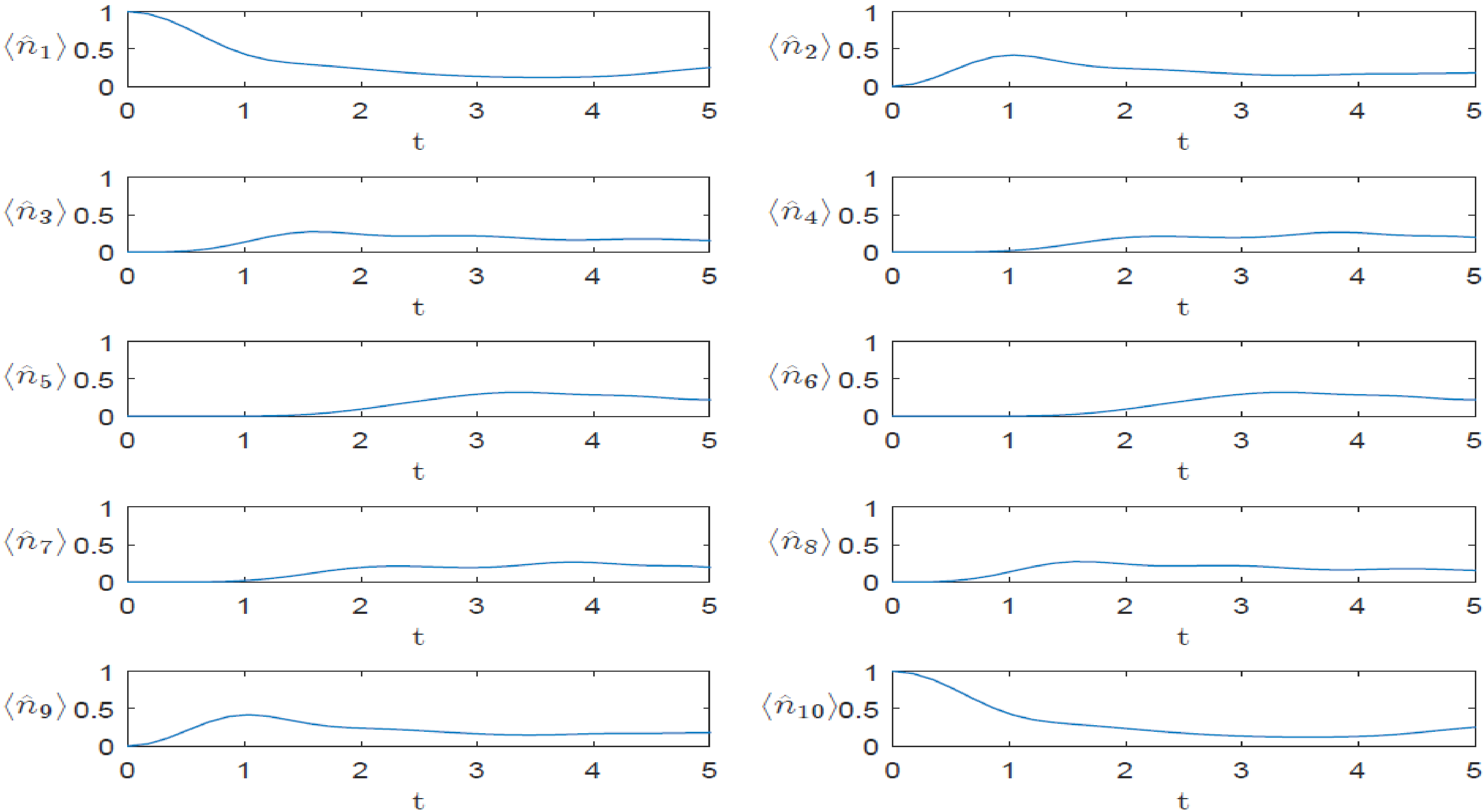


Abbildung 10: $\langle n_i(t) \rangle$ - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit $U = 2$ und Anfangszustand $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1,0,0,0,0,0,0,0,0,1\rangle$

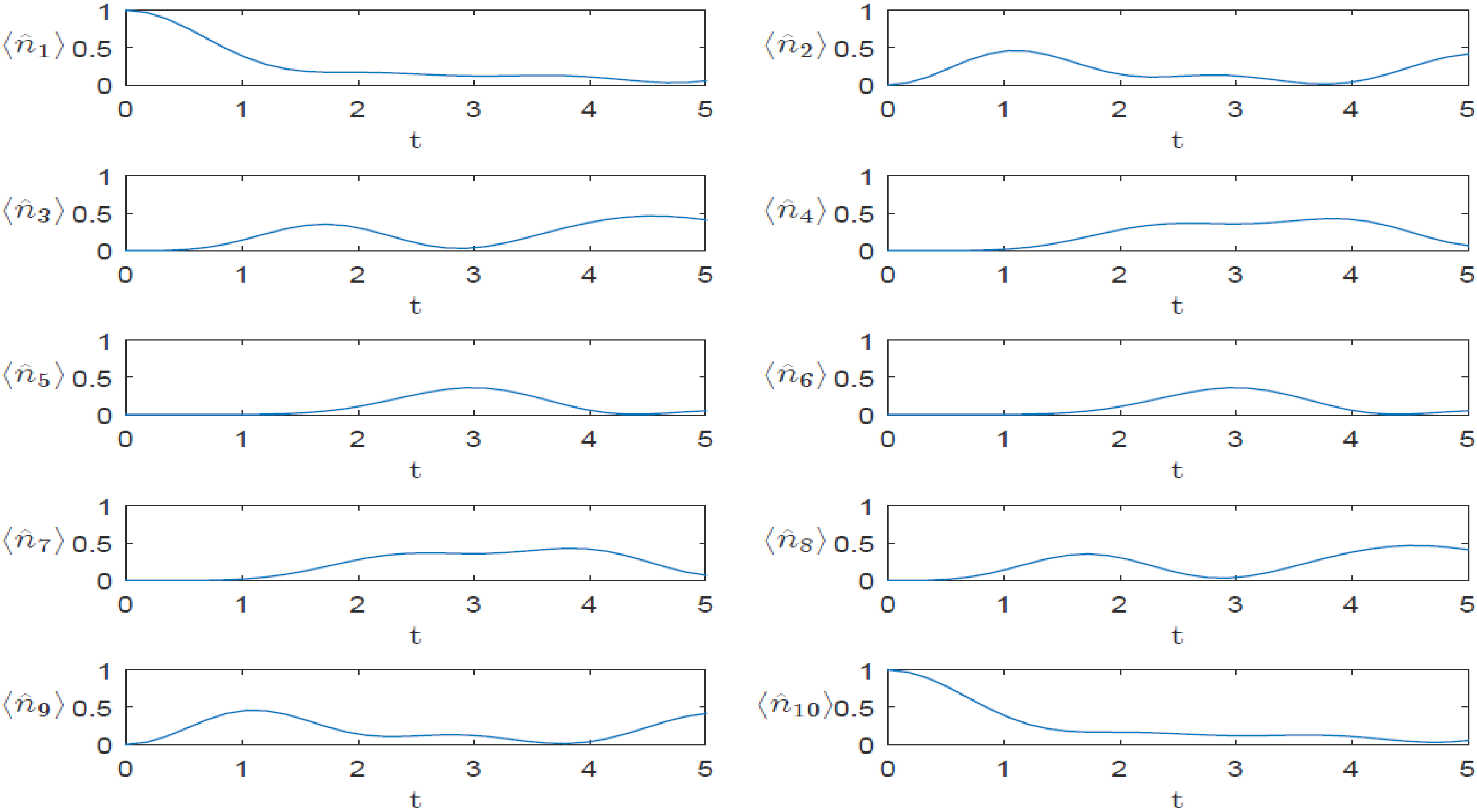


Abbildung 11: $\langle n_i(t)\rangle$ - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit $U = 30$ und Anfangszustand $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1,0,0,0,0,0,0,0,0,1\rangle$

Zusammenfassung

- In 3 wurde exakte Lösung für U=0 und J=0 bestimmt
  - U = 0 Bandstruktur → Superfluid
  - J = 0 einzelne Atome → Mott-Isolator
- Bandlücke:
  - Phasenübergang bei U~3
- Zeitentwicklung der Teilchendichte:
  - Teilchendichte breitet sich wellenartig in beide Richtungen des Gitters aus bis gleichmäßig verteilt
- Teilchen-Fluktuation:
  - nimmt ab bei steigendem U

Literaturverzeichnis: (1)

[1] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, „*The One-Dimensional Hubbard Model*." Cambridge University Press, 2005. Cambridge Books Online.

[2] H. Asakawa, „*The local tomonaga - luttinger liquid in the one-dimensional hubbard model with a boundary field*", Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 9, oct 1997.

[3] J. Hubbard, „*Electron correlations in narrow energy bands*", Proc. R. Soc. London, vol. 276, p. 238, 1963.

[4] M. C. Gutzwiller, „*Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals*", Phys. Rev. Lett., vol. 10, pp. 159162, Mar 1963.

[5] J. Kanamori, „*Electron correlation and ferromagnetism of transition metals*", Progress of Theoretical Physics, vol. 30, no. 3, pp. 275289, 1963.

[6] D. Jaksch and P. Zoller, „*The cold atom Hubbard toolbox*", Annals of Physics, vol. 315, pp. 5279, Jan. 2005.

[7] S. Eger, „*Restricted integer compositions with fixed number of parts*". http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/44186-restricted-integer-compositions-with-fixed-number-of-parts/content/colex.m ,feb 2013.

[8] V. Vajnovszki, „*Generating permutations with a given major index*", ArXiv e-prints, Feb. 2013.

Literaturverzeichnis: (2)

[10] W. Nolting, „*Grundkurs Theoretische Physik 7 Viel-Teilchen-Theorie*“, vol. 7. Springer, aug 2009.

[11] W. Nolting, „*Grundkurs Theoretische Physik 5/1 Quantenphysik - Grundlagen*“. Springer, 7 ed., jul 2001.

[12] W. Nolting, „*Grundkurs Theoretische Physik 5/2 Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen.*“ Springer, 7 ed., jul 2001.

[13] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahunger, „*Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems*“. Oxford - University Press, 2012.

[14] V. Celebonovic, The Hubbard model: basic notions and selected applications, ArXiv e-prints, Feb. 2010.