

# Bose-Hubbard Modell

Simon Fernbach

24. Mai 2016

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
1.1	Diese Arbeit . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1	Modell-Hamilton-Operator . . . . .	4
2.2	Zeitentwicklung . . . . .	4
2.3	Zweite Quantisierung . . . . .	5
2.4	Fock-Raum . . . . .	5
2.5	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Bose-Hubbard-Modell</b>	<b>8</b>
3.1	Band-Limit ( $\frac{U}{J} \rightarrow 0$ ) . . . . .	8
3.2	atomares Limit ( $\frac{U}{J} \rightarrow \infty$ ) . . . . .	11
<b>4</b>	<b>numerische Behandlung</b>	<b>13</b>
4.1	Grundlagen . . . . .	13
4.2	Basiszustände . . . . .	13
4.3	Hamilton-Matrix . . . . .	14
<b>5</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>15</b>
5.1	Parameter und Einheiten . . . . .	15
5.2	Bandlücke . . . . .	15
5.3	Teilchen-Fluktuation . . . . .	18
5.4	Zeitentwicklung der Teilchendichte . . . . .	22
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>27</b>
<b>7</b>	<b>Quelltext</b>	<b>28</b>
7.1	Basis.m . . . . .	28
7.2	findrow.m . . . . .	29
7.3	BoseHubbard.m . . . . .	30
7.4	Gap.m . . . . .	32
7.5	Fluctuation.m . . . . .	34
7.6	TimeEvolution.m . . . . .	35

## 1 Einleitung

Das 1963 von J. Hubbard entwickelte Modell dient der approximativen Beschreibung von Viel-Teilchen-Systemen, in denen die Korrelation der Teilchen von großer Bedeutung ist und daher „Mean-Field“-Methoden wie z.B. „Hartree-Fock“ oder „Density-Functional-Theory“, nicht zielführend sind, da sie sämtliche Wechselwirkung der Teilchen nur gemittelt in Form von Ein-Teilchen-Ausdrücken berücksichtigen. Da das Hubbard-Modell selbst in seiner einfachsten Form noch Zwei-Teilchen-Ausdrücke in seinem Hamilton-Operator enthält kann es Phänomene erklären bei denen „Mean-Field“ Theorien versagen wie z.B. Mott-Isolatoren, bei denen herkömmliche Bandstruktur-Methoden prophezeiten, dass es leitend sein müsse. Der allgemeinste Hamilton-Operator aus dem das Hubbard-Modell unter Näherung hervorgeht [1] lautet

$$\hat{H} = \sum_{\alpha, i, j, \sigma} J_{ij}^{\alpha} c_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} c_{\alpha j, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta \\ i, j, k, l}} \sum_{\sigma \sigma'} U_{ijkl}^{\alpha \beta \gamma \delta} c_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} c_{\beta j, \sigma'}^{\dagger} c_{\gamma k, \sigma'} c_{\delta l, \sigma} \quad (1)$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta \dots$  Bandindices  
 $\sigma, \sigma' \dots$  Spinquantenzahl  
 $i, j, k, l \dots$  Gitterplätze

Wenn die intra-atomaren Wechselwirkungen gegenüber den inter-atomaren Wechselwirkungen dominieren und sich das System innerhalb eines Bandes befindet (Fermi-Fläche vollständig innerhalb eines Bandes) vereinfacht sich (1) zu

$$\hat{H} = \sum_{i, j} J_{ij} c_{i, \sigma}^{\dagger} c_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_i c_{i, \sigma}^{\dagger} c_{i, \sigma'}^{\dagger} c_{i, \sigma'} c_{i, \sigma} \quad (2)$$

Es ist das einfachst mögliche Modell für das Verhalten von korrelierten Teilchen. In seiner simpelsten Form enthält es einen Ein-Teilchen-Anteil, welcher kinetischer Teil genannt wird und das Hüpfen der Teilchen im Gitter beschreibt, sowie einen Zwei-Teilchen-Anteil, der die abgeschirmte Coulomb Wechselwirkung am jeweiligen Gitterplatz beschreibt und somit dem Hüpfprozess entgegenwirkt. Trotz der simplen Natur des Modells enthält es eine Vielzahl in der Natur zu beobachtender Phänomene von Viel-Teilchen-Systemen z.B. „magnetische Ordnung (u.a Ferro/Antiferromagnetismus), einen Metall-Isolator- bzw. Superfluid-Isolator-Übergang, Supraleitung und in einer Dimension ist es eine Tomonaga-Luttinger Flüssigkeit.“ Es wurde von mehreren Personen unabhängig zur Erklärung verschiedener physikalischer Situationen eingeführt: [1][2][3][4][5]

- J. Hubbard - die Erklärung der Übergangsmetalle
- J. Kanamori - itineranten Ferromagnetismus
- M. C. Gutzwiller - Metall-Isolator-Übergang
- Chemie: Pariser-Parr-Pople-Modell - erweiterte Pi-Elektronen Systeme (bereits zehn Jahre zuvor)

Das Bose-Hubbard-Modell fand Anfangs wenig Beachtung, da man keine Anwendungsmöglichkeiten kannte. Erst mit der BCS-Theorie der Supraleitung und dem damit einhergehenden Transport von Cooper-Paaren sowie der Entdeckung, dass man mit dem Bose-Hubbard-Modell ultra-kalte Atome in optischen Fallen beschreiben konnte gewann es an Bedeutung. Heutzutage wird es in einer Vielzahl von Situationen angewandt, unter anderem:[6]

- den Transport von „Cooper-Paaren“ in Supraleitern
- ultra-kalte Atome in optischen Fallen
- Untersuchung von Phasenübergängen z.B: „Superflüssig/Mott-Isolator“
- Verschränkung von ultra-kalten Atomen in der Quanteninformationstheorie

### 1.1 Diese Arbeit

In dieser Arbeit wird ausschließlich das 1D-Bose-Hubbard-Modell ohne Spin behandelt. Es wird der Phasenübergang Mott-Isolator/Superfluid untersucht, die Teilchenfluktuation im Grund und 1. angeregten Zustand, sowie die Zeitentwicklung der Besetzungszahlen der verschiedenen Gitterplätze.

Für die Eigenenergien und -zustände wurde in MATLAB ein Programm geschrieben, welches die Systemparameter  $J, U, \mu, M, N$  und  $N_{max}$  annimmt, die Hamilton-Matrix aufstellt und diese Diagonalisiert. Die Basiszustände wurden mittels [7] generiert.

## 2 Grundlagen

### 2.1 Modell-Hamilton-Operator

Im folgenden Text werden sich die Ausführungen auf das 1D-Bose-Hubbard-Modell ohne Spin beziehen, dessen Hamilton-Operator durch:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (3)$$

gegeben ist, wobei  $b_i^\dagger$  und  $b_i$  Erzeugungs/Vernichtungs-Operatoren am Gitterplatz  $i$  sind,  $J$  und  $U$  Parameter für die Hüpfwahrscheinlichkeit und Wechselwirkung sind,  $\mu$  das chemische Potential,  $\langle i,j \rangle$  die Summe über benachbarte Plätze bedeutet und  $\hat{n}_i$  der Teilchenzahl-Operator für den Gitterplatz  $i$  ist.

Das Hubbard-Modell (3) erhält man aus (2), indem man nur Hüpfprozesse zwischen nächsten Nachbarn zulässt. Es basiert auf der "Tight-Binding" Näherung und weist einige interessante quantenmechanische Phänomene auf wie z.B. „verschiedene Phasen und Phasenübergänge.“ Die Eigenschaften des Modells werden durch drei Parameter gesteuert: „ $J$  die Hüpfwahrscheinlichkeit,  $U$  die Wechselwirkung und  $\mu$  das chemische Potential.“

Der Vorteil des Modell-Hamilton-Operators gegenüber dem Ab-Initio-Hamilton-Operator liegt darin, dass man das System grob vereinfachen kann und oft dennoch relevante physikalische Phänomene zu beobachten sind. Dies macht zwar in den wenigsten Fällen eine exakte Behandlung möglich (Ausnahmen: 1D-Hubbard-Modell im  $U = 0$  bzw.  $J = 0$  Limit) aber die numerische Behandlung erheblich einfacher.

Durch die einfache Gestalt ist das Hubbard-Modell nicht in der Lage reale Materie adäquat zu beschreiben weshalb einige Erweiterungen des Modells vorgenommen werden können

- weitreichenderer Wechselwirkungsanteil
- Hüpfprozesse weiter als bis zu nächstem Nachbarn
- Parameter vom Gitterplatz abhängig

### 2.2 Zeitenwicklung

Die Zeitentwicklung eines Zustands wird durch Anwenden des Zeitentwicklungs-Operators auf den Ausgangszustand erreicht, welcher gegeben ist durch

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} |m\rangle \langle m| \quad (4)$$

mit

$$|m\rangle = \sum_j c_j^m |\vec{n}_j\rangle \quad (5)$$

den Eigenzuständen des Hamilton-Operators  $\hat{H}$ . Ein beliebiger Ausgangszustand in Besetzungszahl-Basis wird daher zeitentwickelt durch

$$\begin{aligned} |\vec{n}_a(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\vec{n}_a\rangle = \sum_m \sum_{l,j} e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} c_l^{m*} c_j^m |\vec{n}_l\rangle \langle \vec{n}_j | \vec{n}_a \rangle \\ &= \sum_m \sum_l e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} c_l^{m*} c_a^m |\vec{n}_l\rangle \end{aligned} \quad (6)$$

### 2.3 Zweite Quantisierung

In der Behandlung quantenmechanischer Viel-Teilchen-Systeme wird hauptsächlich der Formalismus der „zweiten Quantisierung“ verwendet, welcher sich von der gewöhnlichen Quantenmechanik („erste Quantisierung“) dadurch unterscheidet, dass nicht nur Observable quantisiert, d.h. durch Operatoren ersetzt werden, sondern auch Felder. Dies führt zu sogenannten Feldoperatoren für z.B. das elektrische Feld oder die Wellenfunktion.

Die „erste Quantisierung“ stellt die Ununterscheidbarkeit von Teilchen dadurch sicher, dass die Viel-Teilchen-Wellenfunktion passend symmetrisiert wird. Bosonen müssen eine unter Austausch zweier Teilchen symmetrische Wellenfunktion besitzen und Fermionen eine antisymmetrische, wodurch sie das Pauli-Prinzip befolgen. Die Symmetrisierung wird in der Regel durch Slater-Determinanten erreicht, welche unhandlich und rechenintensiv sind, weshalb man zur „zweiten Quantisierung“ übergeht. In der „zweiten Quantisierung“ wird ein Zustand nicht mehr dadurch beschrieben, dass man jedem Teilchen Eigenschaften wie Ort, Impuls oder Spin zuweist, sondern es wird nur noch die Anzahl der Teilchen in jedem möglichen Zustand angegeben. Dadurch umgeht man die Probleme die mit der Nummerierung der Teilchen in der „ersten Quantisierung“ entstehen und erst durch Symmetrisierung aufgehoben werden. Man verwendet Besetzungszahl-Zustände oder auch Fock-Zustände

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle \quad (7)$$

wobei die möglichen Ein-Teilchen-Zustände von 1 bis  $M$  nummeriert werden und  $n_i$  die Anzahl der Teilchen im Zustand  $i$  beschreibt.

### 2.4 Fock-Raum

Der Fock-Raum ist ein Viel-Teilchen-Hilbert-Raum mit offener Teilchenzahl. Ein Viel-Teilchen-Hilbert-Raum ist durch das Tensorprodukt der einzelnen Ein-Teilchen-Räume gegeben

$$\mathcal{H}_{ges} = \bigotimes_i \mathcal{H}_i \quad (8)$$

Sind die Teilchen identisch vereinfacht sich das zu

$$\mathcal{H}_{ges} = \mathcal{H}^N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H} \quad (9)$$

Um in der „zweiten Quantisierung“ arbeiten zu können braucht man einen Raum der nicht nur Zustände mit  $N$  Teilchen erlaubt sondern auch solche mit jeder anderen Zahl an Teilchen, da sonst Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nicht mehr in diesen abbilden würden. Ein solcher Raum wird dadurch erzeugt, dass man die direkte Summe über Viel-Teilchen-Hilbert-Räume zu allen möglichen Teilchenzahlen bildet

$$\mathcal{H}_{ges} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \mathcal{H}^n \quad (10)$$

## 2.5 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Mit dem Fock-Raum lassen sich nun Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definieren, um jeden beliebigen Zustand aus dem Vakuum-Zustand aufzubauen, welcher den Zustand ohne Teilchen darstellt.

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle = \prod_{i=1}^M (\hat{b}_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle \quad (11)$$

Hier sind  $n_i$  die Besetzungszahlen der Zustände 1 bis  $M$ . Die Operatoren gehorchen Kommutations/Antikommutations-Regeln welche die richtige Symmetrie bei Vertauschung sicherstellen. Für Bosonen sind dies

$$\begin{aligned} [\hat{b}_i, \hat{b}_j] &= 0 \\ [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] &= 0 \\ [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] &= \delta_{ij} \end{aligned} \quad (12)$$

und für Fermionen

$$\begin{aligned}
\{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}\} &= 0 \\
\{\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} &= 0 \\
\{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}
\end{aligned} \tag{13}$$

Weiterhin sind die Operatoren durch ihre Wirkung auf Zustände definiert, wobei sowohl für Bosonen als auch Fermionen gilt

$$\begin{aligned}
\hat{b}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_M\rangle \\
\hat{b}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_M\rangle \\
\hat{b}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle &= 0 \quad \leftrightarrow \quad n_i = 0
\end{aligned} \tag{14}$$

und für Fermionen zusätzlich

$$\hat{b}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle = 0 \quad \leftrightarrow \quad n_i = 1 \tag{15}$$

### 3 Bose-Hubbard-Modell

Um Aussagen über das Verhalten dieses Modells machen zu können muss es für verschiedene Bereiche des  $J - U$  Raumes gelöst werden und aus den Eigenzuständen und Energien relevante physikalische Größen berechnet werden. Diese Größen verwendet man nun um z.B: herauszufinden ob es sich um einen Leiter oder Isolator handelt oder ob das System Phasenübergänge besitzt. Im Fall des 1D-Bose-Hubbard-Modells gibt es zwei Phasen die durch einen Übergang getrennt sind:

- Mott-Isolator bei  $U \gg J$
- Superfluid bei  $U \ll J$

Nachfolgend wird ein System mit  $M$  Gitterplätzen und  $N$  Teilchen betrachtet. Es wird sich zeigen, dass (1) in den zwei Grenzfällen  $U = 0$  bzw.  $J = 0$  exakt lösbar ist.

#### 3.1 Band-Limit ( $\frac{U}{J} \rightarrow 0$ )

Wenn  $J \gg U$  dominieren Hüpfprozesse, wodurch die Mobilität der Bosonen steigt und das System entwickelt eine Bandstruktur, wie im Modell unabhängiger Elektronen. Es handelt sich um einen superfluiden Zustand. Für den Fall das  $U = 0$  lautet (1)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j - \mu \sum_i \hat{n}_i$$

und da die Teilchenzahl fest ist führt das chemische Potential nur zu einer Verschiebung der Energie die vernachlässigt werden kann

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j - \mu N$$

Somit wird (1) zu

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j \tag{16}$$

Durch Fourier-Transformation

$$b_m = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k a_k \exp^{-ikm} \qquad b_m^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k a_k^\dagger \exp^{ikm} \tag{17}$$

kann (16) gelöst werden

$$\begin{aligned}
H &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j = -\frac{J}{M} \sum_{k,k'} \sum_{\langle l,j \rangle} e^{ikl} e^{-ik'j} a_k^\dagger a_{k'} \\
&= -\frac{J}{M} \sum_{k,k'} a_k^\dagger a_{k'} \sum_l (e^{ikl} e^{-ik'(l-1)} + e^{ikl} e^{-ik'(l+1)}) \\
&= -\frac{J}{M} \sum_{k,k'} a_k^\dagger a_{k'} \sum_l e^{i(k-k')l} e^{ik'} + e^{i(k-k')l} e^{-ik'} \\
&= -\frac{J}{M} \sum_{k,k'} a_k^\dagger a_{k'} (e^{ik'} + e^{-ik'}) \sum_l e^{i(k-k')l}
\end{aligned} \tag{18}$$

mit

$$e^{ik'} + e^{-ik'} = 2 \cos(k') \quad \sum_{l=1}^M e^{i(k-k')l} = M \delta_{kk'} \tag{19}$$

wird (18) zu

$$\hat{H} = -2J \sum_k \cos(k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = -2J \sum_k \cos(k) \hat{n}_k \tag{20}$$

was diagonal in der Basis des  $k$ -Raumes ist mit

$$k = \frac{2\pi}{M} m \quad \{m \in \mathbb{N} | m \leq M\} \tag{21}$$

Daher ist das Energieband gegeben durch die Dispersionsrelation

$$\epsilon(k) = -2J \cos(k) \tag{22}$$

Da die Besetzungszahlen des Grundzustands im  $k$ -Raum bekannt sind

$$|G\rangle = |k_0, k_1, \dots, k_i, \dots, k_{M-1}\rangle = |k_0, 0, \dots, 0, 0\rangle \quad \text{mit} \quad k_0 = N$$

ergibt sich die Grundzustandsenergie  $E_G$  zu

$$E_G = \langle G | \hat{H} | G \rangle = -2JN \quad (23)$$

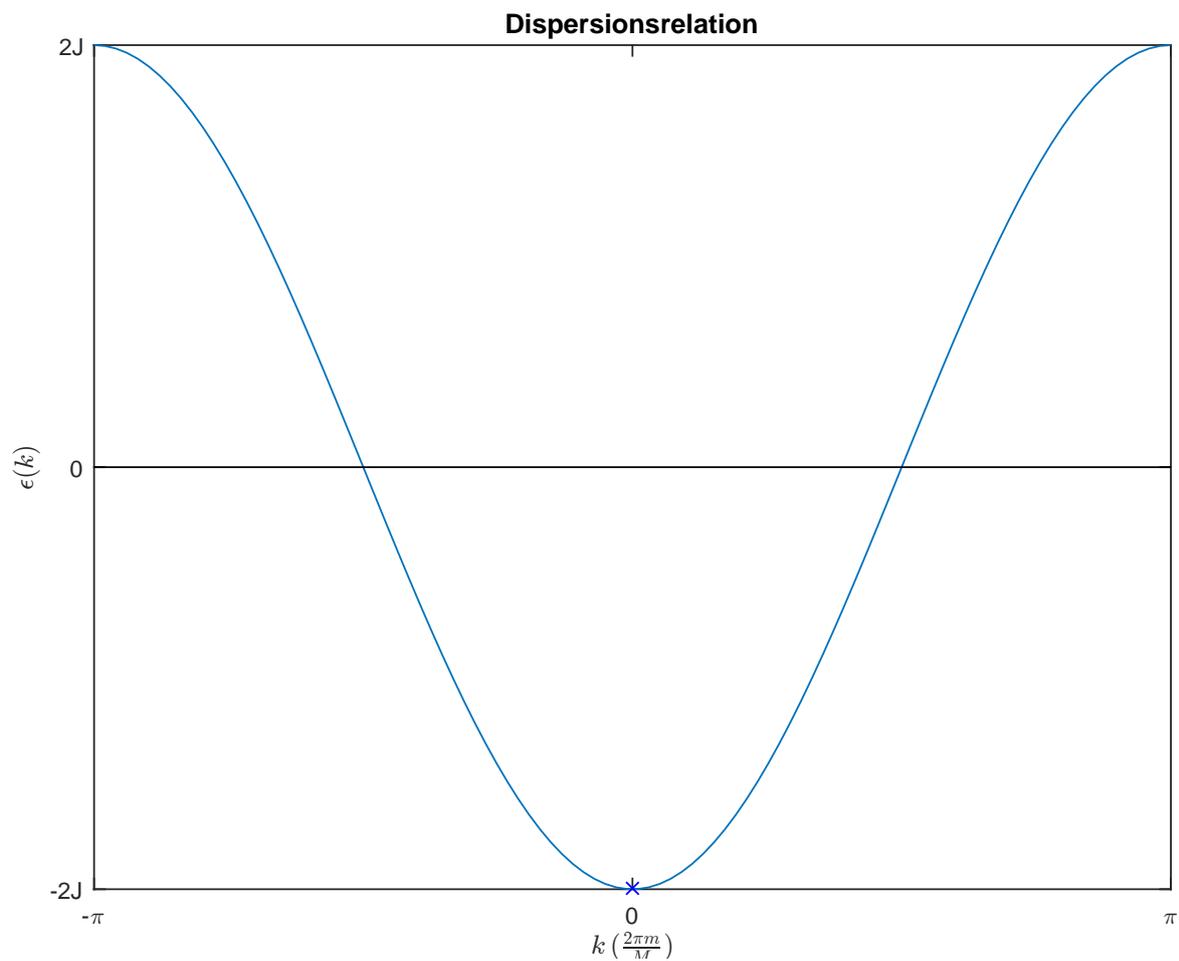


Abbildung 1: Eigenenergien für  $U = 0$  weisen eine Bandstruktur auf

### 3.2 atomares Limit ( $\frac{U}{J} \rightarrow \infty$ )

Für den Fall, dass  $U$  überwiegt, unterdrückt die Wechselwirkung die Hüpfprozesse und Teilchen bleiben an ihrem Ort. Das System wird zum Isolator. Dies kann man sich auch dadurch vorstellen, dass die Abstände der Gitterplätze immer weiter vergrößert werden, wodurch  $J$  gegen 0 strebt und man irgendwann nur noch eine Ansammlung einzelner, getrennter Atome betrachtet. Geht nun  $J \rightarrow 0$  so kann (1) gelöst werden, da der Hamilton-Operator in der Besetzungszahl-Basis diagonal ist, was bedeutet die Besetzungszahl-Zustände sind die Eigenzustände für  $J = 0$  und die Diagonalelemente der Hamilton-Matrix sind die Eigenenergien.

$$\begin{aligned} H_{mn} &= \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \langle \vec{n}_m | \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) | \vec{n}_n \rangle = \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M (\langle \vec{n}_m | \hat{n}_i^2 | \vec{n}_n \rangle - \langle \vec{n}_m | \hat{n}_i | \vec{n}_n \rangle) \\ &= \frac{U}{2} (\sum_{i=1}^M n_n^{i,2} - N) \delta_{mn} \end{aligned}$$

mit  $n_n^i$  der Anzahl an Teilchen am Gitterplatz  $i$  im Zustand  $|\vec{n}_n\rangle$   
Die Eigenzustände und Energien sind also

$$|\vec{n}_m\rangle = |n_1^m, n_2^m, \dots, n_i^m, \dots, n_M^m\rangle \quad (24)$$

$$E_m = \frac{U}{2} (\sum_{i=1}^M n_m^{i,2} - N) \quad (25)$$

Der Grundzustand ist jener geringster Energie. Da die Teilchenzahl erhalten bleibt muss das dann der Fall sein wenn  $\sum_{i=1}^M n_n^{i,2}$  minimal ist. Dies führt zu dem Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M n_i &= N \\ \sum_{i=1}^M n_i^2 &= \min. \end{aligned} \quad (26)$$

welches mit der Methode der Lagrange-Multiplikatoren gelöst werden kann.

$$\mathcal{L}(\vec{n}) = \sum_{i=1}^M n_i^2 + \lambda \left( \sum_{i=1}^M n_i - N \right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_i} = 2n_i + \lambda = 0$$

$$n_i = -\frac{\lambda}{2}$$

$$n_i = N/M \quad \frac{N}{M} \in \mathcal{N}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = \sum_{i=1}^M n_i - N = 0$$

$$\lambda = -\frac{2N}{M}$$

Das heißt jeder Gitterplatz wird gleichmäßig von einem oder mehreren Teilchen besetzt und der Grundzustand ist

$$|G\rangle = |m, m, \dots, m\rangle \quad \text{mit} \quad E_G = \frac{UN}{2}(m-1) \quad m \in \mathcal{N} \quad (27)$$

$$m = \frac{N}{M} \quad (28)$$

## 4 numerische Behandlung

### 4.1 Grundlagen

Um mehr über das Modell und sein Verhalten herauszufinden muss es numerisch für verschiedene Werte von  $J - U$  gelöst werden. Der einfachste aber auf sehr kleine Systeme beschränkte Weg das zu erreichen ist indem man die Besetzungszahl-Zustände generiert und mittels dieser die Hamilton-Matrix berechnet und diagonalisiert. Die Anzahl der möglichen Zustände für  $M$  Gitterplätze und  $N$  Teilchen ist gegeben durch

$$n = \binom{N + M - 1}{M - 1} = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!} \quad (29)$$

Der Übersicht halber wurde für einige Werte von  $N$  mit  $\frac{M}{N} = 1$  eine Tabelle erstellt

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	$6.89 \cdot 10^{10}$	$4.75 \cdot 10^{21}$	$3.80 \cdot 10^{19}$

Wie man sieht ist der Anstieg enorm und ohne die Nutzung ausgefeilterer Techniken ist man auf Systeme mit bis zu 10 Teilchen beschränkt. Da die Matrix allerdings „dünn-besetzt“ ist sind unter passender programmtechnischer Umsetzung Simulationen mit etwas mehr Teilchen möglich. Das zeigt deutlich die Grenzen des naiven Lösungsweges über die direkte Diagonalisierung der Hamilton-Matrix.

### 4.2 Basiszustände

Die Basiszustände wurden mittels eines Programms von [7] generiert welches einen Algorithmus von [8] verwendet.

```
function Z=Basis(N,M,a,b)
```

$N$ ...Anzahl Teilchen  
 $M$ ...Gitterplätze  
 $a$ ...minimale Anzahl pro Gitterplatz  
 $b$ ...maximale Anzahl pro Gitterplatz

In den folgenden Berechnungen wurde  $N = M$ ,  $a = 0$  und  $b = 2$  verwendet. Der Quelltext ist in 7.1 zu finden.

### 4.3 Hamilton-Matrix

Sind die Basiszustände erzeugt muss die Hamilton-Matrix berechnet werden

$$\begin{aligned}
H_{mn} &= \langle \vec{n}_m | \hat{H} | \vec{n}_n \rangle = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \vec{n}_m | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j | \vec{n}_n \rangle + \frac{U}{2} \sum_i \langle \vec{n}_m | \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) | \vec{n}_n \rangle - \mu \sum_i \langle \vec{n}_m | \hat{n}_i | \vec{n}_n \rangle \\
&= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \vec{n}_m | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j | \vec{n}_n \rangle + \frac{U}{2} \delta_{mn} \sum_i n_n^i (n_n^i - 1) - \mu N \delta_{mn} \\
&= \dots + \left( \frac{U}{2} (\sum_i n_n^i{}^2 - N) - \mu N \right) \delta_{mn}
\end{aligned}$$

Wie man sieht sind der  $U$  und  $\mu$  Anteil ohne Schwierigkeiten zu berechnen, einzig der Hüpf-Term bereitet etwas mehr Aufwand.

$$\hat{H}_J = -J (\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_M + \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2 + \hat{b}_M^\dagger \hat{b}_{M-1} + \hat{b}_M^\dagger \hat{b}_1 + \sum_{i=2}^{M-1} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i-1} + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1})) \quad (30)$$

Es sind  $2M$  Operatoren die auf jeden der  $n$  Zustände angewandt werden und daraus einen neuen Zustand erzeugen, welcher in der Menge der Zustände gesucht werden muss und dessen Position als Spaltenindex der Hamilton-Matrix gespeichert werden muss. Dabei ist die Mehrheit der erzeugten Zustände 0 und kann vor dem Suchen aussortiert werden, da ein Vernichtungs-Operator auf einen Gitterplatz ohne Teilchen angewandt wird oder, wenn Hard-Core Beschränkungen angewandt werden, die Teilchenzahl an einem Gitterplatz diese überschreitet. Weil bei diesem Verfahren viel gesucht wird ist es von Vorteil einen Such-Algorithmus anzuwenden der speziell darauf ausgerichtet ist einen bestimmten Vektor in einer Menge Vektoren zu finden. Hat man so jeden Zeilen und Spaltenindex der Beiträge gefunden, kann die Sparse-Matrix aufgestellt und diagonalisiert werden.

## 5 Ergebnisse

### 5.1 Parameter und Einheiten

Im folgenden werden für sämtliche Auswertungen die Parameter:

- $\frac{N}{M} = 1$  (außer für 5.4)
- $J = 1$  - d.h: alle Energien sind in Einheiten von  $J$  und sämtliche Zeiten in  $\frac{\hbar}{J}$

In 5.2 und 5.3 wurde  $M = 10$  verwendet und in 5.4  $M = 10$  und  $N = 2$ .

### 5.2 Bandlücke

Die Bandlücke oder Gap gibt Auskunft über die Phase in der sich das System gerade befindet. Ist sie groß handelt es sich um einen Isolator, da die Teilchen um sich von einem Gitterplatz zu einem anderen zu bewegen eine Energie in der Größe der Bandlücke aufwenden müssen. Ist die Bandlücke Null handelt es sich um ein Metall bzw. im Fall von Bosonen um ein Superfluid. Der Wert von  $U$  bei dem die Bandlücke verschwindet zeichnet einen Phasenübergang Mott-Isolator/Superfluid aus. Die Bandlücke berechnet man mit

$$\Delta = E_{ox} + E_{ion} = (E_G(N + 1) - E_G(N)) + (E_G(N - 1) - E_G(N)) \quad (31)$$

wobei  $E_G(N)$  für die Energie des Grundzustands mit  $N$  Teilchen steht, der erste Ausdruck als Energie gesehen werden kann ein Teilchen dem System hinzuzufügen und der zweite es aus dem System zu entfernen. Beides geschieht wenn ein Teilchen von einem Gitterplatz zu einem anderen hüpf. Die Formel (31) gilt erst im „thermodynamischen Limes“, weshalb der Verlauf der Bandlücke als Funktion von  $\frac{1}{M}$  gegen Null hin extrapoliert werden muss, da  $\frac{1}{M} \rightarrow 0$  bedeutet die Anzahl der Gitterplätze geht gegen  $\infty$ .

Für die Auswertung wurde  $M = 10$  verwendet Man erkennt in Abb. 2, dass der Übergang ungefähr bei  $U \approx 3$  stattfinden muss, da die Gap innerhalb der Unsicherheit verschwindet

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

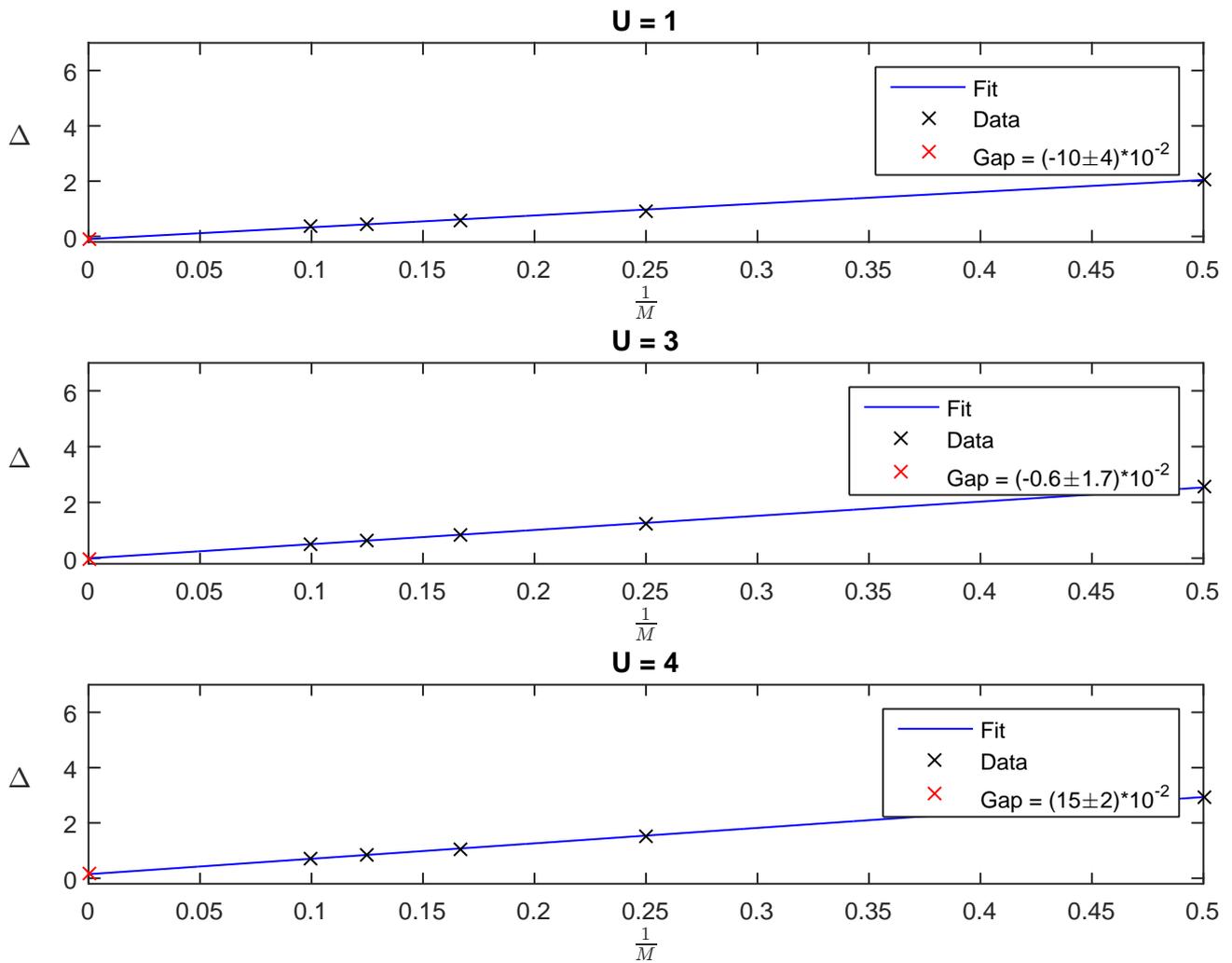
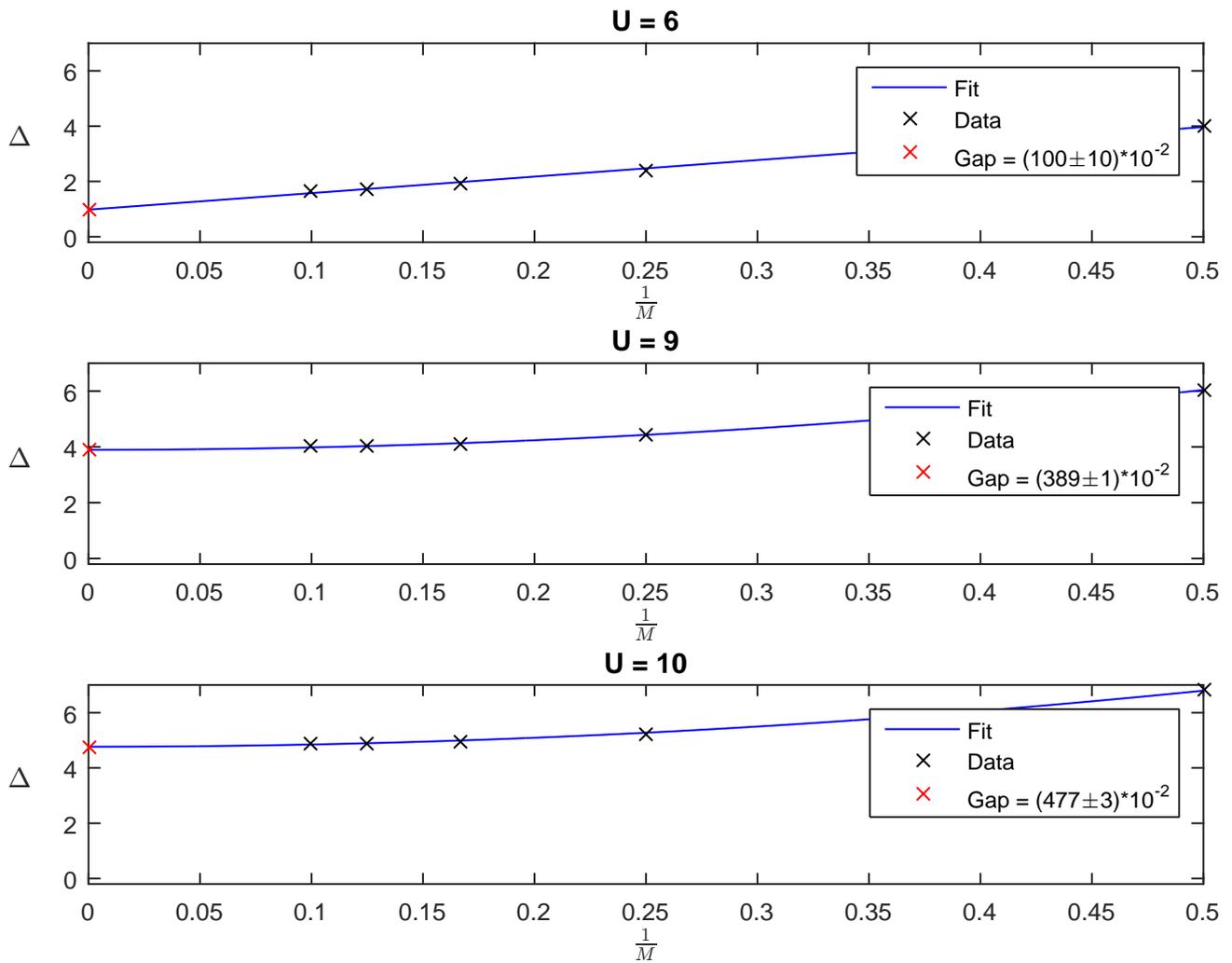


Abbildung 2: Gap  $\Delta$  für verschiedene  $U$  mit  $\frac{N}{M} = 1$ . Man sieht die Gap verschwindet im Rahmen der Unsicherheit für  $U \approx 3$

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

### 5.3 Teilchen-Fluktuation

Die Fluktuation der Teilchenzahl am Gitterplatz  $i$  ist durch die Varianz des Besetzungszahl-Operators des jeweiligen Gitterplatzes gegeben

$$\text{var}(\hat{n}_i) = \langle \hat{n}_i^2 \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle^2 \quad (32)$$

Die Teilchen-Fluktuation gibt Auskunft über die Mobilität der Teilchen, da die Teilchenzahl an einem Gitterplatz nur schwanken kann, wenn ein Teilchen zu oder von einem Gitterplatz hüpft. In Abb. 4 sieht man gut, dass die Fluktuation mit steigendem  $U$  abnimmt da den Hüpfprozessen höhere Potentialbarrieren entgegenwirken, was zu einer Abnahme der Mobilität führt.

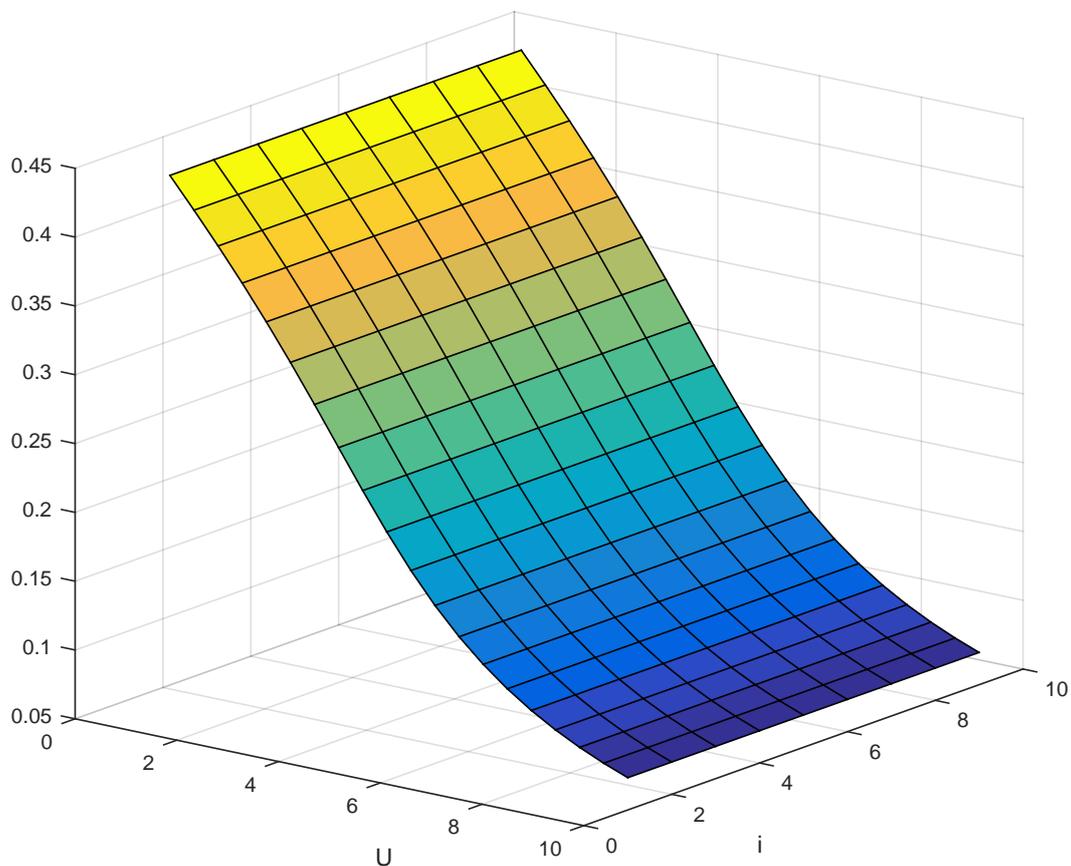


Abbildung 4: Teilchen-Fluktuation im Grundzustand als Funktion von  $U$  und Gitterplatz  $i$  für  $\frac{N}{M}$

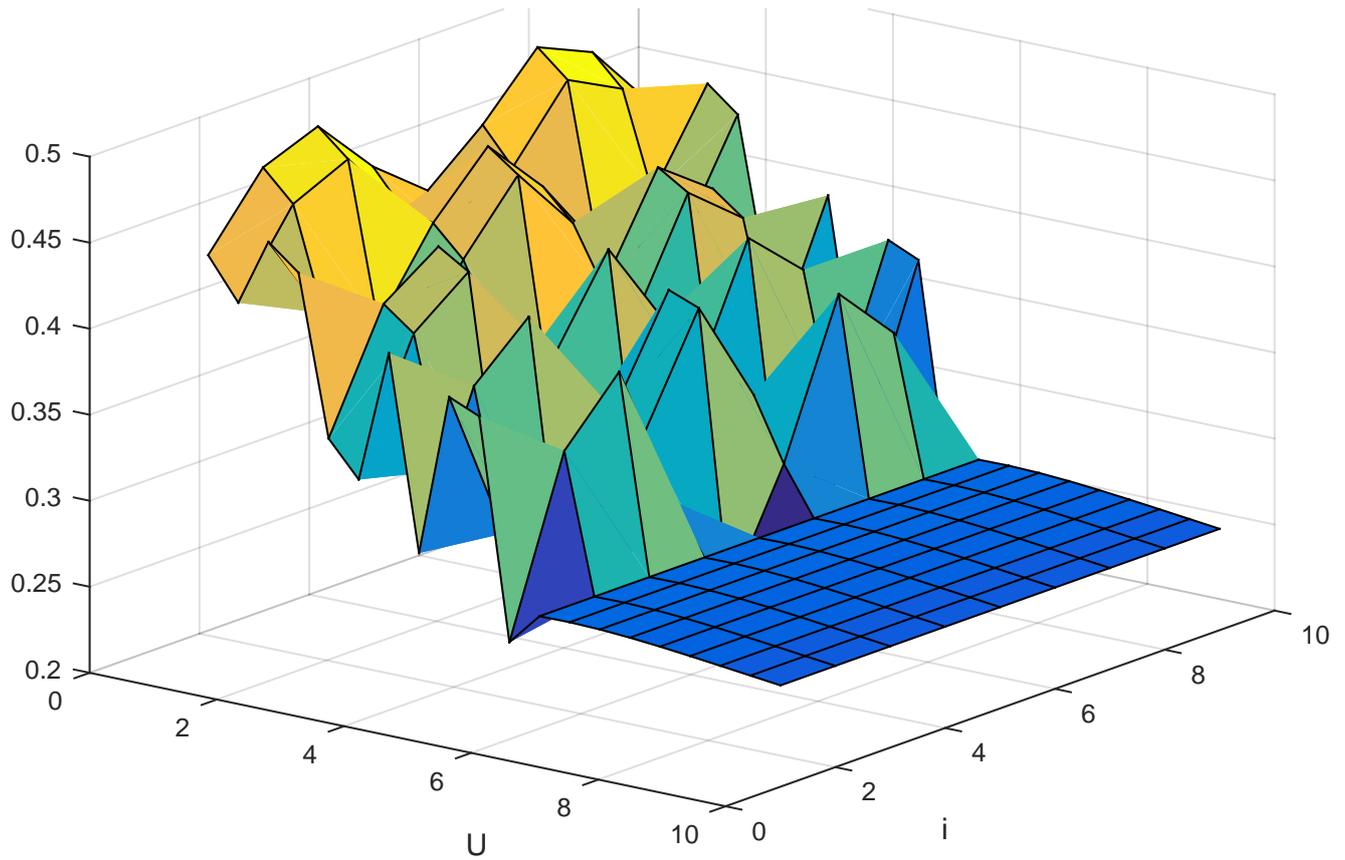


Abbildung 5: Teilchen-Fluktuation im 1. angeregten Zustand als Funktion von  $U$  und Gitterplatz  $i$  für  $\frac{N}{M}$

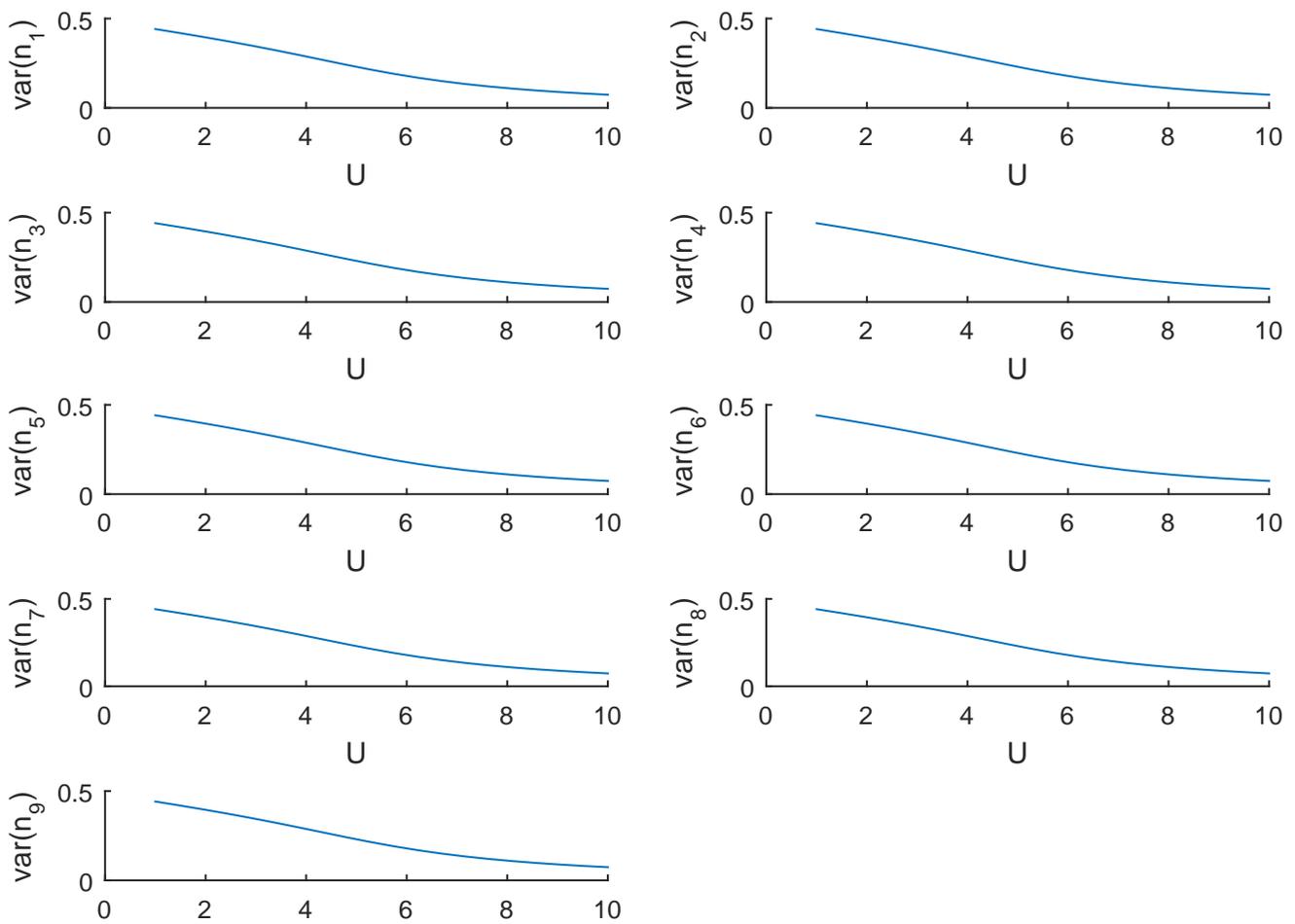


Abbildung 6: Teilchen-Fluktuation im Grundzustand am Gitterplatz  $i$  als Funktion von  $U$  für  $\frac{N}{M}$

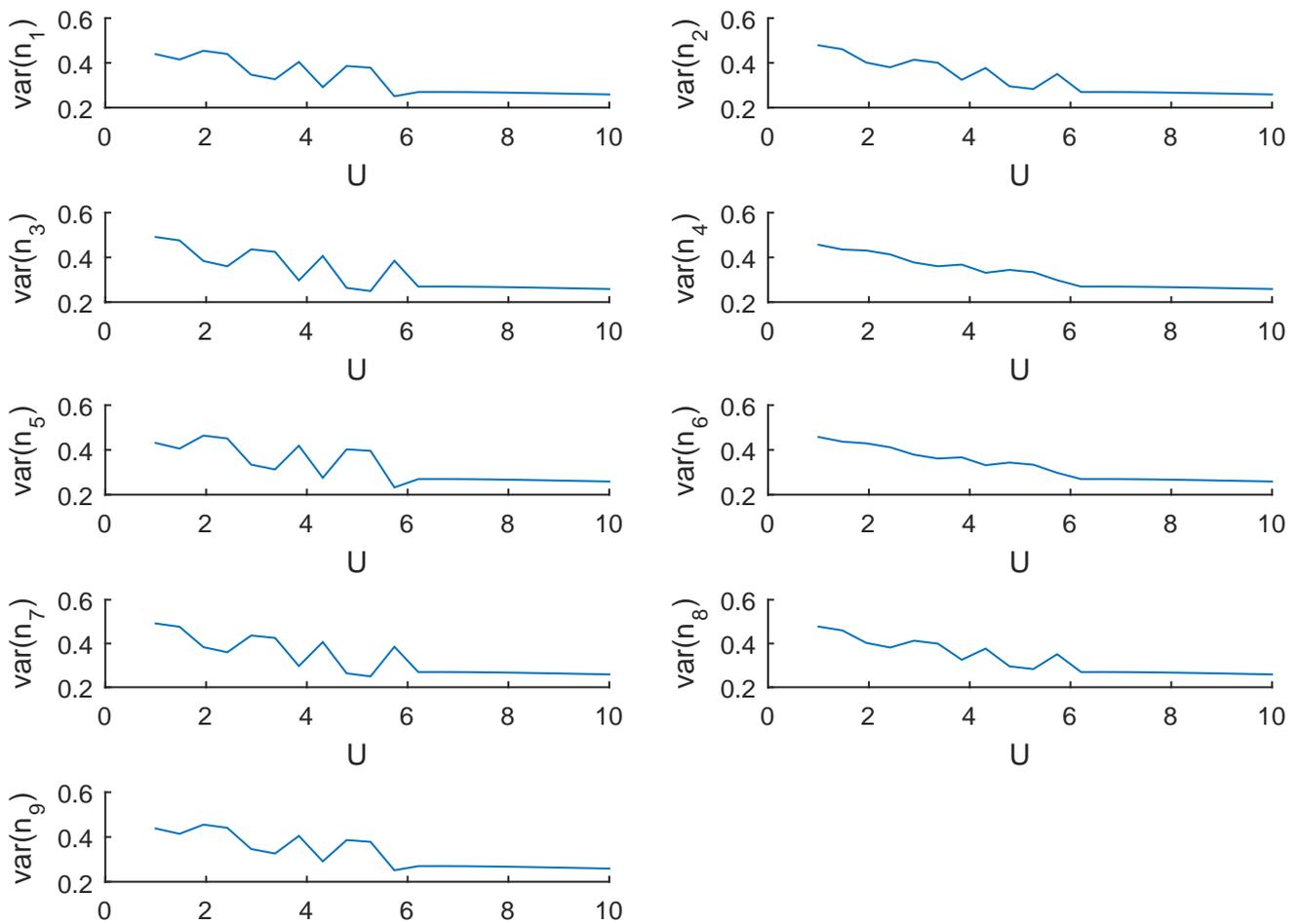


Abbildung 7: Teilchen-Fluktuation im 1. angeregten Zustand am Gitterplatz  $i$  als Funktion von  $U$  für  $\frac{N}{M}$

## 5.4 Zeitentwicklung der Teilchendichte

Zum Auswerten der Zeitabhängigkeit der Teilchendichte an Gitterplatz  $i$  wird der Erwartungswert des jeweiligen Teilchenzahl-Operators mit zeitabhängigem Ausgangszustand gebildet

$$\langle \hat{n}_i(t) \rangle = \langle \vec{n}_a(t) | \hat{n}_i | \vec{n}_a(t) \rangle = \sum_{n,m} \sum_l e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} c_l^n c_a^{n*} c_l^{m*} c_a^m n_l^i \quad (33)$$

Der Anfangszustand  $|\vec{n}_a(t=0)\rangle$  für die Auswertung war jeweils ein Teilchen am ersten und letzten Gitterplatz bei  $M = 10$  Gitterplätzen

$$|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle \quad (34)$$

Man erkennt in Abb. 8 und 9, dass sich der Anfangszustand  $|\vec{n}_a(t=0)\rangle$  mit der Zeit wellenartig nach außen ausbreitet und sich die Teilchendichte über alle Gitterplätze gleichmäßig verteilt. Bei kleinem  $U$  geschieht dies schneller, da sich die Teilchen leichter von Gitterplatz zu Gitterplatz bewegen können. Anhand des Maximums der Teilchendichte kann man nun die Ausbreitungsgeschwindigkeit schätzen

$$\langle v \rangle = \sum_{i=1}^{T-1} \frac{\max. \langle n(t_{i+1}) \rangle - \max. \langle n(t_i) \rangle}{t_{i+1} - t_i} = 1.4 \text{ Gitterplätze} \cdot \frac{J}{\hbar} \quad (35)$$

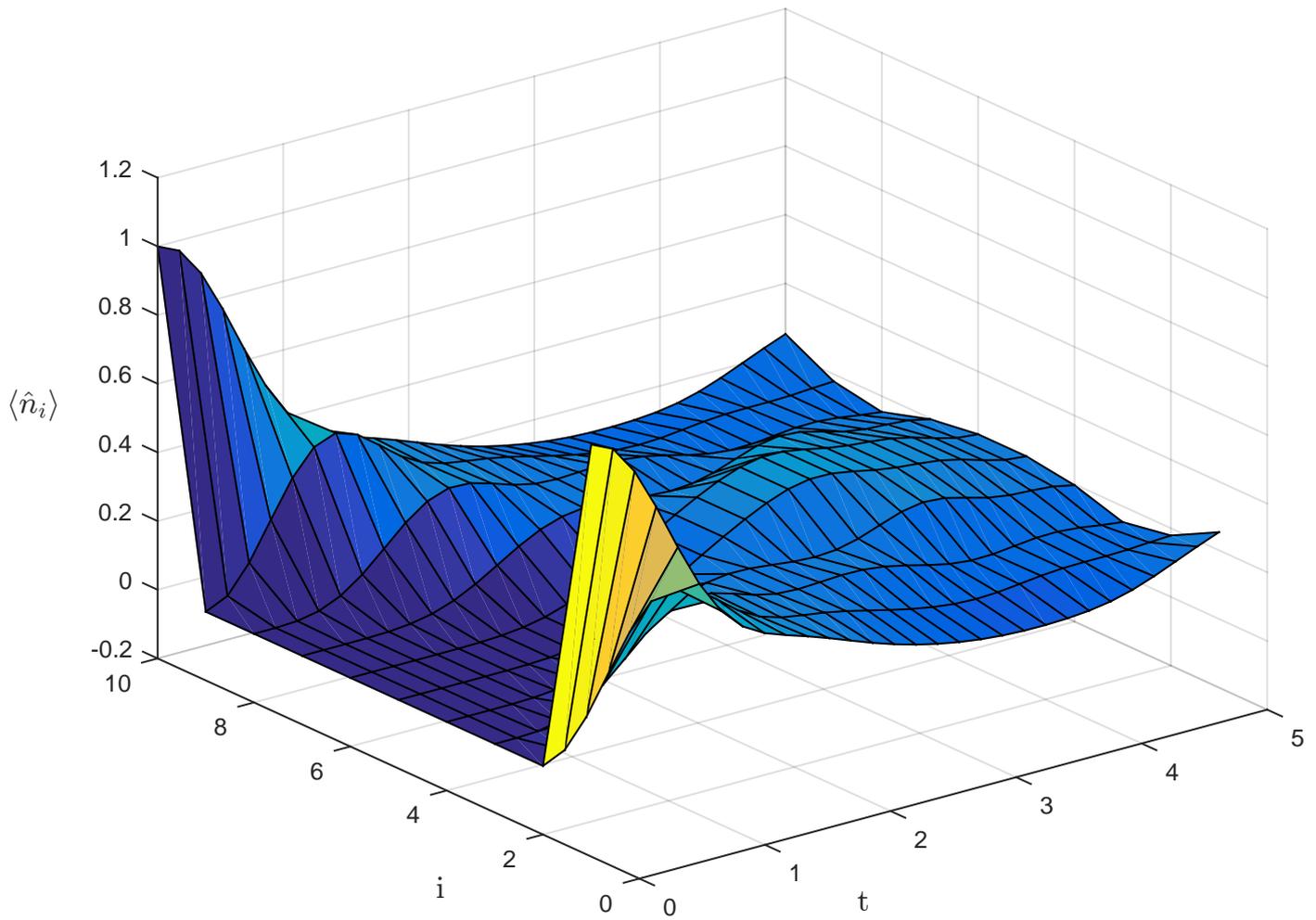


Abbildung 8:  $\langle n_i(t) \rangle$  - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit  $U = 2$  und Anfangszustand  $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle$

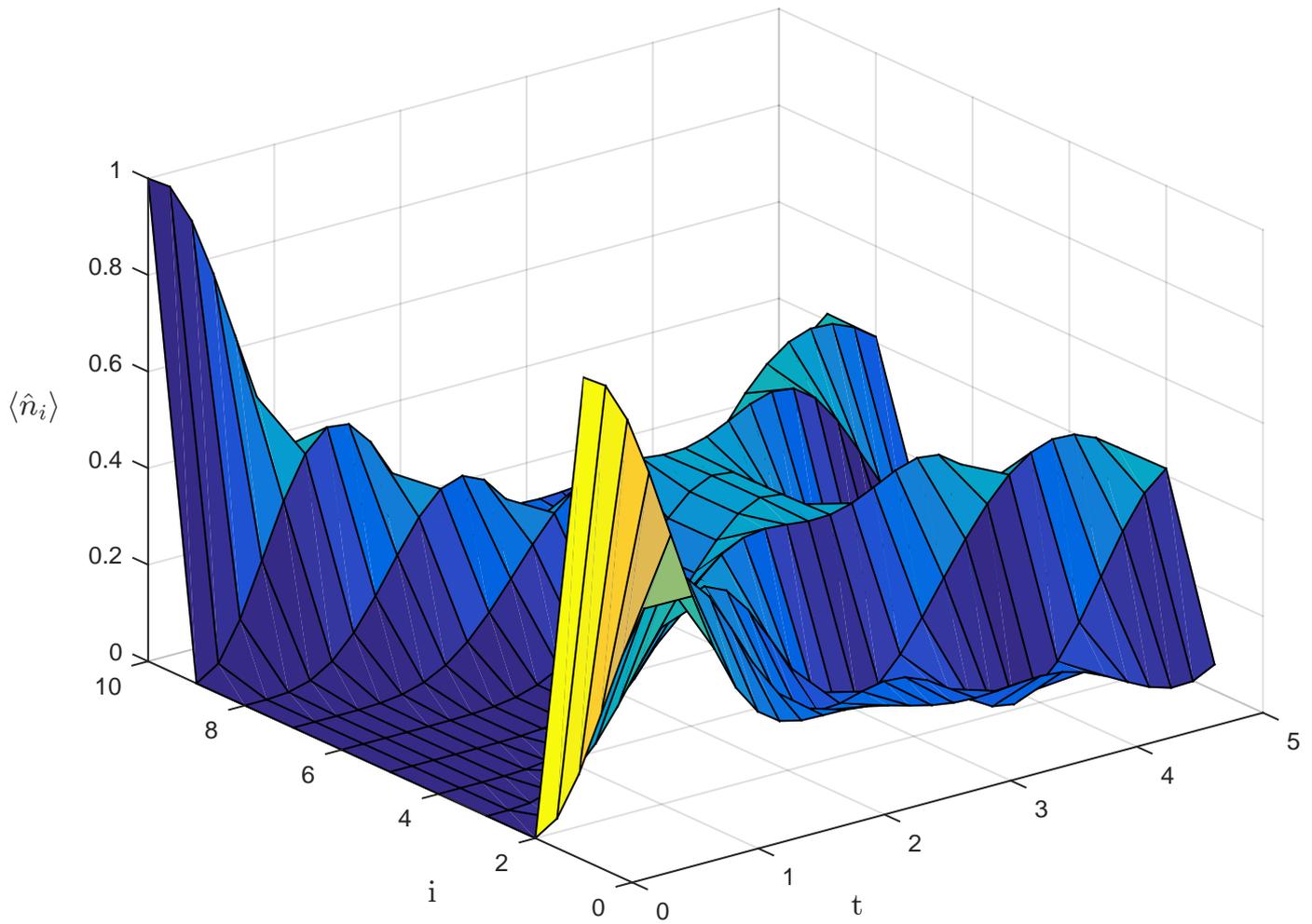


Abbildung 9:  $\langle n_i(t) \rangle$  - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit  $U = 30$  und Anfangszustand  $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle$

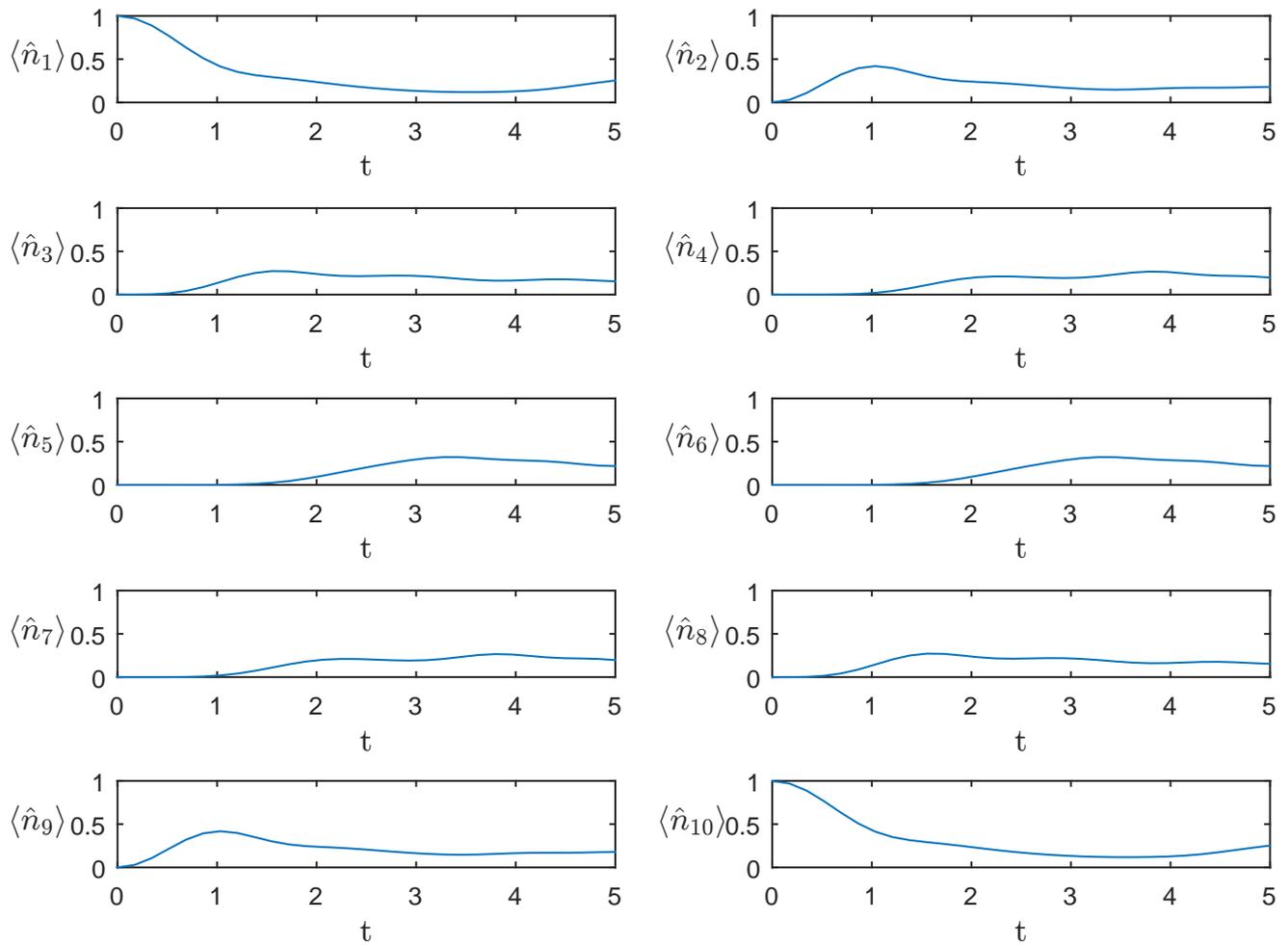


Abbildung 10:  $\langle n_i(t) \rangle$  - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit  $U = 2$  und Anfangszustand  $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle$

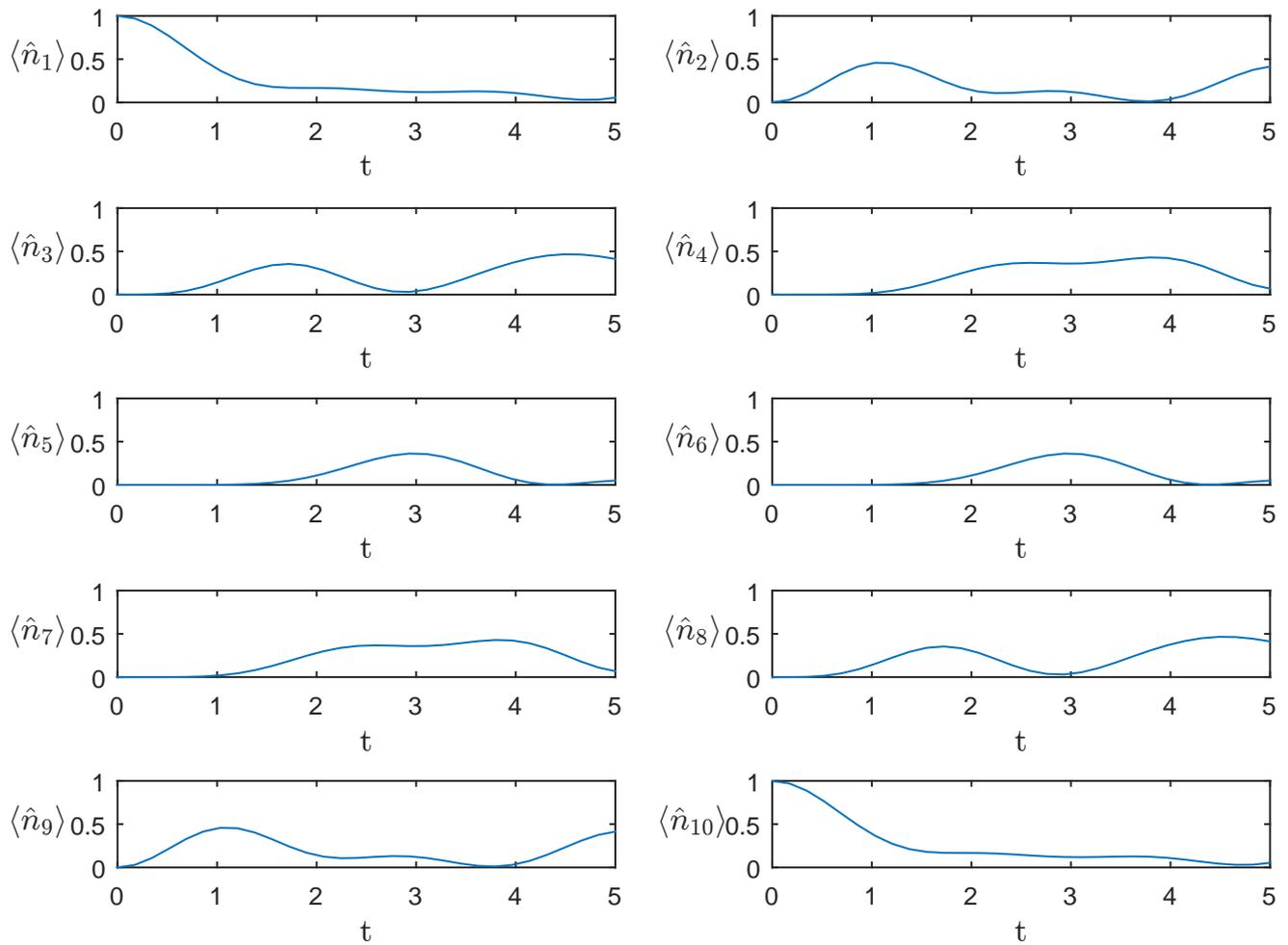


Abbildung 11:  $\langle n_i(t) \rangle$  - Teilchendichte an den Gitterplätzen in Abhängigkeit von der Zeit mit  $U = 30$  und Anfangszustand  $|\vec{n}_a(t=0)\rangle = |1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle$

## 6 Zusammenfassung

In Abs. 3 wurde die exakte Lösung für die zwei Grenzfälle  $U = 0$  (Abs. 3.1) und  $t = 0$  (Abs. 3.2) des 1D-Bose-Hubbard Modells abgeleitet und gezeigt, dass im Fall von  $U = 0$ , eine Bandstruktur entsteht was auf einen superfluiden Zustand schließen lässt und im Fall von  $t = 0$  ein Isolator vorliegt, da die Teilchen stark an ihre einzelnen Gitterplätze gebunden sind.

Für den Phasenübergang Mott-Isolator/Superfluid wurde in Abs. 5.2 jener Wert der Wechselwirkung  $U$  gesucht, ab welchem die Bandlücke verschwindet, was bei  $U \approx 3$  der Fall war.

Die Teilchen-Fluktuation bei  $M = N = 10$  wurde in Abs. 5.3 behandelt und man erkennt in Abb. 4 gut, dass mit zunehmendem  $U$  die Teilchen-Fluktuationen abnehmen, was damit erklärt werden kann, dass Teilchen bei kleinen Werten von  $U$  leichter von Gitterplatz zu Gitterplatz hüpfen können, da  $U$  eine Potential-Barriere für die Hüpfwahrscheinlichkeit der Teilchen darstellt.

In Abs. 5.4 wurde die Zeitenwicklung der Teilchenzahl an den Gitterplätzen von  $N = 2$  Teilchen in einem Gitter mit  $M = 10$  Plätzen betrachtet. Es stellt sich eine wellen-artige Ausbreitung der Teilchendichte ein, welche für kleine Werte von  $U$  schnell abnimmt und sich gleichmäßig auf alle Gitterplätze verteilt wie in Abb. 8 zu sehen ist. Für große  $U$  bleiben die Peaks welche die Teilchen darstellen länger ausgeprägt wie in Abb. 9 zu sehen ist, was man sich als lokalisierte Teilchen vorstellen kann, im Gegensatz zu de-lokalisierten Teilchen bei kleinen  $U$ .

## 7 Quelltext

### 7.1 Basis.m

```

1  function X=Basis(n,k,a,b)
2  %
3  % Generate all integer compositions of n with k parts, each between 0 and b
4  %
5  % n: integer whose compositions are to be generated
6  % k: number of parts
7  % a: minimum value of parts
8  % b: maximum value of parts
9  %
10 % The algorithm is directly taken from
11 % Vincent Vajnovszki, Generating permutations with a given major index, http://arxiv.org/abs/1302.6558
12 %
13 % Matlab implementation:
14 % Steffen Eger, steffen.eger@yahoo.com, 11/5/2013
15 %
16 %
17 X=[];
18 if k*a>n || k*b<n || n<0 || k<0
19     return
20 end
21 [minimum,im] = generateMin(n-k*a,k,b-a);
22 c = zeros(k,1);
23 % not impossible
24 if im==0
25     % first, compute all compositions with parts p such that 0<=p<=b-a
26     X=genColex(n-k*a,k,k,b-a,c,minimum,[]);
27     % then add a such that a<=p<=b
28     X = X+a;
29 end
30 end
31
32 % this implements Algorithm 2 in the paper
33 % b is the upper bound
34 function X=genColex(n,r,k,b,c,minimum,X)
35 if n==0
36     % leave this if you just want to have it printed out (might be memory-saving)
37     % disp(c')
38     % leave this if want to store results in matrix X
39     X(end+1,:)=c;
40 else
41     if c(r)==b
42         r = r-1;
43     end
44     l = minimum(n);
45     for i=1:r
46         if i==1
47             e = n-(l-1)*b;
48         else
49             e = 1;
50         end
51         c(i) = c(i)+e;
52         X=genColex(n-e,i,k,b,c,minimum,X);
53         c(i) = c(i)-e;
54     end
55 end
56 end
57
58 function [m,impossible]=generateMin(n,k,b)
59 m=zeros(n,1);
60 impossible=0;
61 for i=1:n
62     q = find(i,k,b);
63     if q==1
64         impossible=1;
65     end

```

```
        break
67     end
        m(i) = q;
69 end
end
71
function t=find(n,k,b)
73 t=-1;
for s=1:k
75     if s*b>=n
77         t=s;
            break;
        end
79 end
end
```

## 7.2 findrow.m

```
function Pos_i = findrow(M,v)
2
Pos_i = find((M(:,1) == v(1))');
4
for j = 2:size(M,2)
6 Pos_i = Pos_i(M(Pos_i,j) == v(j));
end
```

### 7.3 BoseHubbard.m

```

function [V,E,Z,rho] = BoseHubbard(N,M,Nmax,U,t,mu)
2
3 % N... Anzahl Bosonen
4 % M... Anzahl Gitterplaetze
5 % U... on-site Energie
6 % t... Huepfwahrscheinlichkeit
7 % mu... chemisches Potential
8 % Nmax... maximale Anzahl an Teilchen pro Gitterplatz
9 % p... Anzahl der Lanczos Vektoren
10 % it... max. Anzahl der Iterationen von eigs()
11 % V... Eigenvektoren (Koeffizienten)
12 % E... Eigenwerte (Energien)
13 % Z... Besetzungszahl-Zustaende
14 % Z_v... Besetzungszahlen als Integer dargestellt
15 % Z_n... Zustaende die von den Huepf-Termen erzeugt werden
16 % ind_i, ind_j... Indices der Beitrage von H zum erstellen der Sparse-Matrix
17 % H... Hamiltonmatrix
18 % rho... Besetzungsdichte von H

20 p = 12;
21 it = 300;

22 % generieren der Basiszustaende bzw. laden falls schon vorhanden:
23 if exist(['Basis States\N_',num2str(N),'M_',num2str(M),'Nmax_',num2str(Nmax)'.mat'],'file')~=0
24 Z = load(['Basis States\N_',num2str(N),'M_',num2str(M),'Nmax_',num2str(Nmax)'.mat'],'Z');
25 Z = Z.Z;
26 else
27 Z = Basis(N,M,0,Nmax);
28 save(['Basis States\N_',num2str(N),'M_',num2str(M),'Nmax_',num2str(Nmax)'.mat'],'Z');
29 end

31 Z_v = zeros(size(Z,1),1);

33 % Umwandeln von Vektoren zu ganzen Zahlen:
34 for i = 1:size(Z,1)
35 Z_v(i) = sum(Z(i,:).*10.^((M-1):-1:0));
36 end

37 % erzeugen der Hopping Zustaende und Matrixelemente:
38 Z_n = repmat(cat(2,[1-10^(M-1),1-10,10^(M-1)-10^(M-2),10^(M-1)-1],10.^(1:(M-2))-10.^(0:(M-3)),10.^(1:(M-2))-1),1,2*M);
39 H = cat(2,sqrt(Z(:,end)+1).*sqrt(Z(:,1)),sqrt(Z(:,end)+1).*sqrt(Z(:,end-1)),sqrt(Z(:,1)+1).*sqrt(Z(:,2)),sqrt(Z(:,2)+1)));

41 Z_n = repmat(Z_v,1,2*M) + Z_n;
42 n = zeros(size(Z_n));
43 S = Z_n;

44 % Aussortieren der verschwindenden Hopping Terme:
45 Z_n(Z_n<0) = nan;

46 for i = 0:M-1
47 if i > 0
48 S = S-n*10^(M-i);
49 end
50 n = floor(S./10^(M-1-i));
51 Z_n(n>2) = nan;
52 end

53 L = ~isnan(Z_n);
54 ind_j = repmat(reshape(1:size(Z,1),1,2*M),size(L),1);
55 ind_j = ind_j(L);
56 ind_i = zeros(size(ind_j));
57 H = H(L);
58 Z_n = Z_n(~isnan(Z_n));
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68

```

```

% Suchen der Indices von non-zero Hopping Termen:
70 for j = 1: numel(Z_n)
72   ind_i(j) = find(Z_n(j)==Z_v);
74 end
76 H = cat(1,-t*H,U/2*sum(Z.*(Z-1),2)-mu*N); % on-site interaction
ind_i = cat(1,ind_i,(1:size(Z,1))');
78 ind_j = cat(1,ind_j,(1:size(Z,1))');
80 rho = numel(H)/size(Z,1)^2; % Sparsity von H
H = sparse(ind_i,ind_j,H); % erzeugen der Sparse Matrix H
82
84
86 if size(H,1) <= 3200
[V,E] = eig(full(H));
88
else
90   opts.issym = 1; % sagt eigs() H ist symmetrisch
92   opts.tol = 10^-2;
% opts.p = 4;
94   % opts.maxit = 400;
96
[V,E,flag] = eigs(H,6,'lm',opts);
98
while flag ~= 0
100   p = p + 4;
it = it + 100;
102   opts.p = p; % die Anzahl der Lanczos Vektoren (Anzahl Eigenvektoren < p < dim(H))
opts.maxit = it; % max. Anzahl an Iterationen (300 default)
104   [V,E,flag] = eigs(H,6,'lm',opts);
end
106
108 end
110 end

```

## 7.4 Gap.m

```

clear all
2  clc
  close all
4
% M... Anzahl Gitterplaetze
6 % N... Anzahl Bosonen
% U... Parameter Wechselwirkung
8 % Nmax... max. Anzahl an Teilchen pro Gitterplatz
% t... Parameter Huepfwahrscheinlichkeit
10 % mu... Parameter chemisches Potential
% E... Array fuer alle zum berechnen der Gap benoetigten Energien
12 % f... cell-array fuer die Fit-Funktionen der Gaps zu verschiedenen U
% E_Gap... Array fuer Energie-Gap bei verschiedenen U und M
14
M = [2,4,6,8,10];
16 N = [1,3,5,7,9;2,4,6,8,10;3,5,7,9,11];
U = [1,3,4,6,9,10];
18 Nmax = 2;
t = 1;
20 mu = 10;
E = zeros([size(N),size(U,2)]);
22 f = cell(2,numel(U));
erg = [-10,4;-0.6,1.7;15,2;100,10;389,1;477,3];
24
% berechnen der Gap:
26 for s = 1:size(U,2)
    for i = 1:3
28         for j = 1:size(M,2)
30             [~,E_0,~,~] = BoseHubbard(N(i,j),M(j),Nmax,U(s),t,mu);
32             E(i,j,s) = min(diag(E_0));
34         end
    end
end
36
E_Gap = E(3, :, :) - 2*E(2, :, :) + E(1, :, :);
38
% plotten der Ergebnisse:
40 ind = [1, size(U,2)/2; size(U,2)/2+1, size(U,2)];
42 for k = 1:2
h = figure;
44 for l = ind(k,1):ind(k,2)
46     if U(1)<8
[f{1,l},f{2,l}] = fit((1./M)', reshape(E_Gap(1, :, l), numel(M), 1), 'poly1');
48     else
type = fittypen(@(p1,p2,x) p1*x.^2+p2, 'independent', 'x');
50     [f{1,l},f{2,l}] = fit((1./M)', reshape(E_Gap(1, :, l), numel(M), 1), type);
end
52
if k == 1
54 subplot(ceil(numel(U)/2),1,1)
else
56 subplot(ceil(numel(U)/2),1,1-ceil(numel(U)/2))
end
58 plot(f{1,l}, 'b')
hold on
60 plot(1./M, E_Gap(1, :, l), 'kx')
errorbar(0, f{1,l}.p2, 2*f{2,l}.rmse, 'rx')
62 xlim([0,0.5])
if l<=4
64 legend('Fit', 'Data', ['Gap = (', num2str(erg(1,1)), '\pm', num2str(erg(1,2)), ') * 10^{-2}'])
else
66 legend('Fit', 'Data', ['Gap = (', num2str(erg(1,1)), '\pm', num2str(erg(1,2)), ') * 10^{-2}'])
end
68 title(['Gap U = ', num2str(U(1))])

```

```
    xlabel('$\frac{1}{M}$', 'Interpreter', 'latex')
70 ylabel('\Delta', 'rot', 0)
    ylim([-0.2 7])
72 set(get(gca, 'YLabel'), 'Position', [-0.03, 3.0, 0])
    hold off
74 end

76 saveas(h, ['Gap_', num2str(k)], 'pdf')
78 end
```

## 7.5 Fluctuation.m

```

clear all
2 close all
clc
4
N = 9;
6 M = 9;
Nmax = 2;
8 U = linspace(1,10,20);
t = 1;
10 mu = 1;
C_i = zeros(numel(U),M);
12
14
for k = 1:2
16 for i = 1:numel(U)
18 [V,~,Z,~] = BoseHubbard(N,M,Nmax,U(i),t,mu);
c_G = repmat(V(:,k),1,size(Z,2));
20 C_i(i,:) = sum(c_G.^2.*Z.^2,1) - sum(c_G.^2.*Z,1).^2;
22 end
24 p1 = figure;
for j = 1:M
26
subplot(5,2,j)
28 hold on
plot(U,C_i(:,j))
30 hold off
xlabel('U')
32 ylabel(['var(n_{',num2str(j),'})'])
end
34
36 [n_i,U_n] = meshgrid(1:M,U);
[~,p2] = Fluc_surf_1_prop(U_n,n_i,C_i);
38
% p2 = figure;
40 % h1 = surf(U_n,n_i,C_i);
% xlabel('U')
42 % ylabel('i')
% title('Correlation:')
44
46 saveas(p1,['Fluctuation_sub_',num2str(k)], 'pdf')
saveas(p2,['Fluctuation_3D_',num2str(k)], 'pdf')
48 end

```

## 7.6 TimeEvolution.m

```

clear all
close all

4 % M... Anzahl Gitterplaetze
% N... Anzahl Teilchen
6 % n_start... Gitterplaetze an denen die 2 Teilchen starten
% Nmax... max. Anzahl von Teilchen an einem Gitterplatz
8 % U... Parameter Wechselwirkung
% t... Parameter Huepfwahrscheinlichkeit
10 % mu... Parameter chemisches Potential
% n... Matrix fuer Teilchendichte
12 % T... Vektor fuer Zeit
% time... mesh von T fuer surf()
14 % I... mesh von Gitterplaetzen fuer surf()
% V... Koeffizienten (Eigenvektoren)
16 % E... Eigenenergien
% Z... Besetzungszahl-Zustaende
18 % Z_0... Anfangszustand
% ind_0... Index des Anfangszustands in Z
20

22 M = 10;
N = 2;
24 n_start = [1,10];
Nmax = 2;
26 U = 2;
t = 1;
28 mu = 0;
n = 0;
30 T = linspace(0,5,30)';
[I,time] = meshgrid(1:M,T);
32
% Loesen des Eigenwertproblems:
34 [V,E,Z,~] = BoseHubbard(N,M,Nmax,U,t,mu);

36 Axes_subplot = cell(1,M);
38
Z_0 = zeros(1,M);
40 Z_0(1,n_start) = [1,1];
ind_0 = findrow(Z,Z_0);
42
% bestimmen der zeitabhaengigen Teilchendichte der Gitterplaetze:
44 for m = 1:size(Z,1)
    for a = 1:size(Z,1)
46         for b = 1:size(Z,1)

48             n = n + V(m,a)*V(m,b)*V(ind_0,a)*V(ind_0,b)*repmat(Z(m,:), numel(T),1) .* repmat(exp(1i*(E(a,a)-E(b,b))

50
52         end
    end
54 end
n = real(n);
56
% plotten der Ergebnisse:
58 h1 = figure;
surf(time,I,n)
60 xlabel('t','interpreter','latex','FontSize',13)
ylabel('i','interpreter','latex','FontSize',13)
62 zlabel('$$\langle \hat{n}_{i} \rangle$$','interpreter','latex','FontSize',13,'rot',0,'Position',get(gca,'Z

64 h2 = figure;
for l = 1:M
66 subplot(5,2,1)
plot(T,n(:,l))
68 xlabel('t','interpreter','latex','FontSize',13)

```

```
ylabel(['\langle \hat{n}_{',num2str(1),'}\rangle'],'interpreter','latex','FontSize',13,'rot',0)
70 ylim([0,1])
  Axes_subplot{1} = get(gca,'YLabel');
72 end

74 for l = 1:M
  Pos = get(Axes_subplot{1},'Position');
76 Pos(1) = -0.8;
  Pos(2) = 0.3;
78 set(Axes_subplot{1},'Position',Pos)
  end

80 p = zeros(size(T));
82 for l = 1:numel(T)
84 [~,p(l)] = max(n(l,:));
86 end

88
90 saveas(h1,['Time_Evolution_surf_',num2str(U)], 'pdf')
  saveas(h2,['Time_Evolution_',num2str(U)], 'pdf')
```

## Literatur

- [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. 159–162, Mar 1963.
- [5] J. Kanamori, “Electron correlation and ferromagnetism of transition metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, no. 3, pp. 275–289, 1963.
- [6] D. Jaksch and P. Zoller, “The cold atom Hubbard toolbox,” *Annals of Physics*, vol. 315, pp. 52–79, 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.
- [9] S. Bieri, “Some introductory notes on the hubbard model.” [http://www.huebeli.net/samuel/files/notes\\_on\\_hubbard.pdf](http://www.huebeli.net/samuel/files/notes_on_hubbard.pdf), may 2016.
- [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. Ahufinger, *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.
- [15] M. Greiner, *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials*. PhD thesis, Ludwig-Maximilians-Universität München, jan 2003.