

Ultrakalte Bose-Gase in optischen Gittern

Ein Zugang in Bloch Basis

DIPLOMARBEIT

Ilona Türschmann

Betreut von Professor Dr. Robert Roth



Technische Universität Darmstadt
Institut für Kernphysik

14. Dezember 2007

”Objektivität ist die Illusion, daß Beobachtungen ohne einen Beobachter gemacht werden können.”

Heinz von Foerster

Zusammenfassung

An ultrakalten Quantengasen in optischen Gittern lassen sich grundlegende quantenmechanische Phänomene experimentell studieren. In der Theorie werden sie seit einiger Zeit mit Hilfe des, aus der Festkörperphysik stammenden, Hubbard Modells beschrieben. Dieses hat sich, dank seiner vielseitigen Anwendbarkeit und gleichzeitigen relativen Einfachheit, schnell als adäquate Beschreibung für diese Systeme etabliert.

Auch wenn das ursprüngliche Hubbard Modell in der Wannierbasis formuliert wird, liegt es aufgrund der Periodizität des optischen Gitters nahe, das Hubbard Modell mit Blochfunktionen als Basis zu betrachten. Aus Symmetriegründen kommt nach der Transformation von der Wannier- in die Blochbasis eine große Anzahl Zustände nicht vor, so daß sich die Basisdimension erheblich reduzieren läßt. Mit dieser reduzierten, aber das System völlig exakt beschreibenden Basis werden zunächst einige Observablen berechnet.

Wegen des, mit der Systemgröße fakultativen Anwachsens der Basisdimension, ist selbst mit der reduzierten Basis eine exakte numerische Lösung der Schrödinger-gleichung nur für kleine Systeme möglich. Es wird daher ein Trunkierungsschema, das für die Wannierbasis entworfen wurde, in der Blochbasis angewendet. Die Ergebnisse werden mit den früheren Ergebnissen in der Wannierbasis verglichen und kombiniert. So können Systeme beschrieben werden, die aufgrund ihrer Größe mit der exakten Diagonalisierung nicht zugänglich sind.

Inhaltsverzeichnis

<i>Zusammenfassung</i>	v
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Bosegase in optischen Gittern	3
2 Theoretische Grundlagen	7
2.1 Formalismus der zweiten Quantisierung	7
2.1.1 Vielteilchenhilbertraum und Besetzungszahldarstellung	7
2.1.2 Operatoren in zweiter Quantisierung	9
2.2 Blochfunktionen	10
2.3 Besetzungszahldarstellung in der Blochbasis	13
2.4 Wannierbasis	14
3 Bose-Hubbard Modell	17
3.1 Hubbard Modell	17
3.2 Bose-Hubbard Hamiltonoperator	18
3.3 Bose-Hubbard Hamiltonoperator in der Bloch Basis	21
4 Reduzierte Basis	25
5 Observablen	31
5.1 Mittlere Besetzungszahl	31
5.2 Besetzungszahlfluktuationen	33
5.3 Maximaler Koeffizient	37
5.4 Energie	37
5.5 Kondensatanteil	42
5.6 Interferenzmuster	44

<i>6</i>	<i>Trunkierung der Blochbasis</i>	<i>49</i>
6.1	Trunkierung in der Blochbasis	50
6.2	Kombination der Trunkierung in der Bloch- und der Wannierbasis . .	61
<i>7</i>	<i>Ausblick</i>	<i>67</i>
	<i>Danksagung</i>	<i>73</i>
		<i>75</i>

Kapitel 1

Einleitung

In diesem Kapitel wird zunächst diese Arbeit motiviert. Dann wird ein kurzer historischer Überblick über die experimentellen Entwicklungen auf dem Gebiet der ultrakalten Quantengase in optischen Gittern gegeben.

1.1 Motivation

Um Systeme auf mikroskopischen Skalen zu beschreiben, wird die Quantenmechanik verwendet. Sei es bei der Beschreibung von Atomen, dem Spin oder dem Anregungsspektrum von Atomkernen. Quantenmechanische Effekte sind aber auch auf makroskopischer Ebene beobachtbar. Dies zeigt sich zum Beispiel beim Laser, der Selbstorganisation von Teilchen beim Kristallwachstum und der Leitfähigkeit von Festkörpern. Meist werden quantenmechanische Effekte von klassischen Effekten überlagert. Daher läßt sich das Verhalten eines makroskopischen Systems, wie zum Beispiel einem Festkörper, oft nicht auf triviale Weise nachvollziehen. Untersuchungen von ultrakalten Quantengasen auf optischen Gittern können helfen, das komplexe Zusammenspiel zu verstehen. Da diese im Idealfall auf dem absoluten Temperaturnullpunkt, im Experiment immerhin bei wenigen hundert pK, gehalten werden, sind alle kinetischen Freiheitsgrade eingefroren und man kann Quanteneffekte makroskopisch sichtbar machen, ohne den störenden Einfluß klassischer Phänomene. Dank ihrer vielfältigen physikalischen Eigenschaften bilden sie somit eine Möglichkeit, Grundlagenforschung im Bereich der Quantenphysik zu betreiben. Vom theoretischen Standpunkt aus betrachtet, sind diese Systeme eine perfekte Realisati-

on des, ursprünglich für die Festkörperphysik entwickelten, Hubbard Modells [1]. In der einfachsten Formulierung geht das Hubbard Modell davon aus, daß die Elektronen des Festkörpers an den Atomrümpfen lokalisiert sind, sich im Bloch Band der niedrigsten Energie befinden und die Wechselwirkung zwischen den Elektronen kurzreichweitig ist. Die sehr gute Anwendbarkeit des Hubbard Modells auf ultrakalte Quantengase auf optischen Gittern wird auch durch die Experimente bestätigt [2, 3].

Da in dieser Arbeit die ultrakalten Quantengase aus Bosonen bestehen, wird eine Modifizierung des Hubbard Modells, das Bose-Hubbard Modell verwendet. Um das Bose-Hubbard Modell für ultrakalte Quantengase auf optischen Gittern exakt zu lösen, wird die Hamiltonmatrix des Systems diagonalisiert. Da die Dimension des betrachteten Hilbertraums fakultativ mit der Teilchenzahl und der Gitterlänge wächst, ist die rechenbare Lösung auf kleine Systeme limitiert. Um größere Systeme betrachten zu können, müssen deswegen Näherungen verwendet werden. Eine Möglichkeit bietet die physikalisch motivierte Trunkierung der Basis. Hierbei werden nur Basiszustände, die einen großen Beitrag zum Gesamtzustand leisten, betrachtet. Die Basiszustände des ursprünglichen Hubbard Modells sind Wannierfunktionen welche an den Gitterplätzen lokalisiert sind. Bei stark lokalisierten Wellenfunktionen sind Trunkierungen des Hilbertraums in dieser Basis sehr erfolgreich anwendbar. Wenn die Wechselwirkung der Teilchen untereinander aber zu schwach wird, sind die Teilchen nicht mehr an einem Gitterplatz lokalisiert. Es müssen dann in der Wannier Basis viele Basisfunktionen überlagert werden, um den Zustand des Systems zu charakterisieren. Die Näherung der Trunkierung wird deshalb in der Wannier Basis bei schwächer werdender Wechselwirkung immer unpräziser, bis sie schließlich das exakte Ergebnis nicht mehr reproduziert [4]. Ziel ist es, eine Trunkierung für alle Wechselwirkungsstärken mit gutem Erfolg durchführen zu können. Da der Bereich starker Wechselwirkung bereits von der Wannier Basis abgedeckt wird, wird nun eine Basis gesucht, in der sich der Zustand des Systems bei kleinen Wechselwirkungen mit wenigen Basisfunktionen möglichst präzise darstellen lässt. Dieses Kriterium erfüllen die Blochfunktionen. Sie haben den weiteren Vorteil, Eigenfunktionen zu einem Hamiltonoperator von Teilchen ohne Wechselwirkung in einem periodischen Potential zu sein. Aus diesen Gründen, werden in der vorliegenden Arbeit Blochfunktionen als Basis verwendet.

Nach der Transformation des Bose-Hubbard Modells in die Bloch Basis, wird zunächst die reduzierte Basis eingeführt. Diese bildet keine vollständige Basis, beschreibt aber, aus Symmetriegründen, den Grundzustand exakt. Es werden in dieser Basis

die wesentlichen Eigenschaften von ultrakalten Quantengasen auf optischen Gittern, die schon aus Berechnungen mit der Wannier Basis bekannt sind [3, 5, 6, 7], reproduziert. Schließlich wird der Hilbertraum zusätzlich zu der Reduzierung der Basis trunkiert, um zu größeren Systemen übergehen zu können.

1.2 Bosegase in optischen Gittern

Im Jahre 1911 wurde von Kamerlingh Onnes das Verschwinden des elektrischen Widerstandes von Quecksilber bei Temperaturen unter 4.4K beobachtet [8]. Dies war die Entdeckung der Supraleitung. Ungefähr fünfundwanzig Jahre später wurde von Kapitza, Allen und Misener die Superfluidität von ^4He gefunden [9]. Dies sind makroskopisch beobachtbare, aber rein quantenmechanische Prozesse. Eine weitere Möglichkeit quantenmechanische Vorgänge auf makroskopischer Ebene zu beobachten, ist das Bose-Einstein Kondensat. Dabei werden schwach wechselwirkende Bosonen, also Teilchen die der Bose-Einstein Statistik unterliegen, soweit gekühlt, daß sie alle in denselben quantenmechanischen Einteilchenzustand kondensieren. Gut siebzig Jahre nach der theoretischen Vorhersage von Bose-Einstein Kondensaten durch Einstein [10] und Bose [11] im Jahre 1924, gelang 1995 die erste experimentelle Realisierung durch Cornell und Wieman et al. [12] und unabhängig davon auch Ketterle et al. [13]. 2001 wurde ihnen für diese Leistung der Nobelpreis für Physik verliehen. Zur Herstellung von Bose-Einstein Kondensaten werden Alkaliatome verwendet, weil diese aufgrund ihres Valenzelektrons ein magnetisches Moment besitzen und sich somit in einer magnetischen Falle einfangen lassen. Dort werden sie zunächst mit einem Laser gekühlt. Dann werden sie in einer magnetischen Falle durch Verdampfung weiter gekühlt. Hierbei werden nur die kältesten Atome in der Falle belassen, so daß die mittlere Temperatur des Gesamtsystems sinkt, bis ab einer bestimmten Temperatur das Kondensat entsteht. Nachdem es nun die Möglichkeit gab Bose-Einstein Kondensate zu erzeugen, wurden diese weitergehend erforscht. Das Kondensat wurde zum Beispiel mit Hilfe eines Lasers in Rotation versetzt und die Entstehung superfluider Wirbel ("vortices") beobachtet [14]. Man untersuchte auch Fermion-Boson Mischungen und sogar Fermion-Fermion Mischungen, außerdem stark korrelierte bosonische Systeme [15]. 1998 wurde von Jaksch et al. ein weiterer Phasenübergang für Bose-Gase im Gitter vorausgesagt [3] und 2001 von Greiner et al. realisiert [2]. Es wird dafür an das Bose-Gas ein äußeres Feld angelegt, welches in den Atomen einen elektrischen Dipol erzeugt. Dieser Dipol kann dann mit einem externen elektrischen Feld wechselwirken.

Im Allgemeinen wird hierfür Laserlicht verwendet, welches einerseits den Dipol in den Atomen induziert und andererseits mit diesem Dipol wechselwirkt. Dieses elektromagnetische Feld kann, je nach dem ob die Frequenz des Lasers größer oder kleiner als die Resonanzfrequenz der Atome ist, abstoßend oder anziehend sein [16]. Aus zwei gegenläufigen Laserstrahlen mit der Wellenlänge λ kann eine ste-

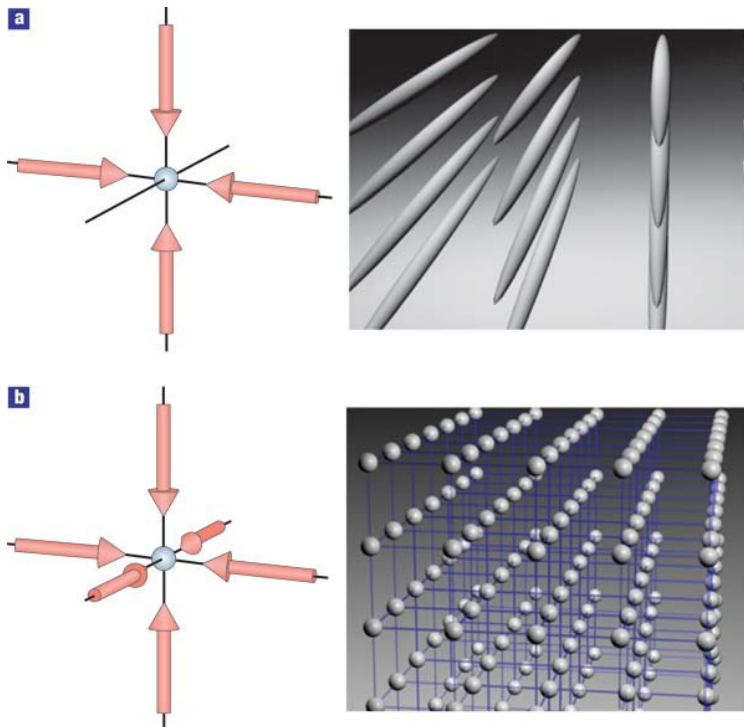


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der Erzeugung des optischen Gitters mit interferierenden, einander entgegenlaufenden Laserstrahlen a) zweidimensionales Gitter, b) dreidimensionales Gitter Quelle: <http://www.quantumphysik.uni-mainz.de/bec/gallery/index.html>

hende Welle erzeugt werden, welche dann ein periodisches Potential mit der Periodenlänge $\lambda/2$ bildet. Man nennt dieses Potential optisches Gitter. Wie in Abbildung 1.1 dargestellt, kann dasselbe Verfahren auch zur Erzeugung von zwei- und dreidimensionalen optischen Gittern angewendet werden. Diese Art der periodischen Potentiale hat den Vorteil, daß sich die Potentialtiefe problemlos über die Frequenz des Laserlichtes variieren läßt. Für Details zum experimentellen Aufbau siehe [16]. Durch variieren der Amplitude des Lasers wird implizit die Wechselwirkungsstärke der Teilchen untereinander und die Tunnelwahrscheinlichkeit verändert. Bei sehr kleiner Wechselwirkung überwiegt das Tunneln und das System befindet sich im superfluiden Zustand. Er ist durch eine völlige Delokalisierung der Teilchen und eine langreichweitige Phasenkorrelation zwischen den Gitterplätzen gekennzeichnet. Durch Erhöhen der Amplitude des Lasers wird die Wechselwirkung der Teilchen untereinander ebenfalls größer, ab einem bestimmten Wert dominiert sie über das

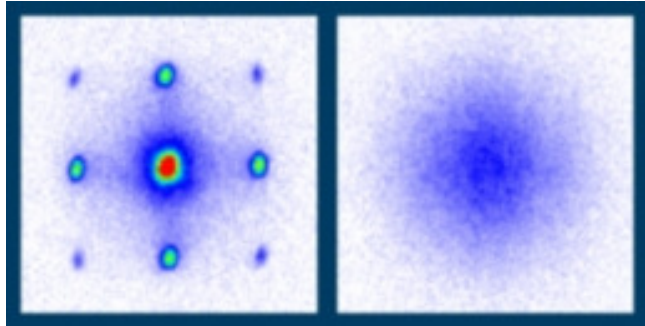


Abbildung 1.2: Interferenzmuster der Materiewelle eines Bose-Gases in einem dreidimensionalen Gitter mit ungefähr 100.000 besetzten Gitterplätzen. Links: Interferenzmuster im Superfluid; Rechts: Mott-Isolator ohne Phasenkorrelation *Quelle:* <http://www.quantum.physik.uni-mainz.de/bec/gallery/index.html>

Tunneln. Das System wechselt dann vom superfluiden in den Mott-Isolator Zustand. Die Phasenkorrelation der Gitterplätze untereinander geht dabei vollständig verloren. Die Teilchen können sich nicht mehr frei durch das Gitter bewegen. Es muß nämlich eine gewisse Energie aufgebracht werden, damit sich zwei Teilchen auf demselben Gitterplatz befinden können.

In Abbildung 1.2 ist das Interferenzmuster der Materiewellen eines Bosegases in einem dreidimensionalen Gitter zu sehen. Es wurde mit der Methode des "time-of-flight-imagings" (TOF) aufgenommen. Dabei wird sowohl das Gitter als auch das Fallenpotential plötzlich abgeschaltet und die Teilchen können sich frei ausbreiten. Mit Hilfe von einer kurzen Bestrahlung mit Licht in der Resonanzfrequenz der Teilchen, kann eine Momentaufnahme der expandierenden Wolke gemacht werden. Diese gibt Aufschluß über die Impulsverteilung der Teilchen. In Abbildung 1.2 ist links der superfluide und rechts der Mott-Isolator Zustand gezeigt. Man sieht den Verlust der Phasenkorrelation und damit des Interferenzmusters beim Übergang in die Mott-Isolatorphase. Wird die Wechselwirkung wieder verringert, so stellt sich die Phasenkorrelation zwischen den Gitterplätzen vollständig wieder her.

Kapitel 1 · Einleitung

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen gelegt, um die Anwendung des Hubbard Modells auf bosonische Gase verstehen zu können.

2.1 Formalismus der zweiten Quantisierung

Der Formalismus der zweiten Quantisierung ermöglicht es, sehr effizient Rechnungen für Systeme aus vielen identischen Teilchen durchzuführen. Es wird zunächst die Besetzungszahldarstellung von Zuständen eingeführt. Weiterhin werden Operatoren im Formalismus der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt.

2.1.1 Vielteilchenhilbertraum und Besetzungszahldarstellung

Es wird ein System aus N Teilchen betrachtet. Wenn die Teilchen identisch sind, so kann man den Gesamthilbertraum \mathcal{H}_N als Kroneckerprodukt der Hilberträume der einzelnen Teilchen \mathcal{H}_1 darstellen:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1. \quad (2.1)$$

Wenn jeder der \mathcal{H}_1 durch eine vollständige Basis $|\varphi_i\rangle$ beschrieben wird, so wird eine Basis im Gesamthilbertraum \mathcal{H}_N durch die Produkte der Einteilchenbasen be-

schrieben

$$|\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \varphi_{\alpha_3} \dots \varphi_{\alpha_N}\rangle \equiv |\varphi_{\alpha_1}\rangle \otimes |\varphi_{\alpha_2}\rangle \otimes |\varphi_{\alpha_3}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{\alpha_N}\rangle. \quad (2.2)$$

Da das Kroneckerprodukt nicht kommutativ ist, muß auf die Reihenfolge der $|\varphi_{\alpha_i}\rangle$ geachtet werden. Die Produktzustände $|\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \varphi_{\alpha_3} \dots \varphi_{\alpha_N}\rangle$ bilden eine vollständige Basis im gesamten N -Teilchenhilbertraum \mathcal{H}_N . Man kann jeden allgemeinen N -Teilchenzustand $|\psi\rangle$ durch eine Linearkombination der Produktzustände darstellen

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_i} C(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_N) |\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \varphi_{\alpha_3} \dots \varphi_{\alpha_N}\rangle. \quad (2.3)$$

In der Quantenmechanik existieren aufgrund der Unschärferelation keine von vornherein festgelegten Teilchenbahnen. Deshalb überlappen die Wahrscheinlichkeitsdichten von miteinander wechselwirkenden, identischen Teilchen, so daß diese prinzipiell nicht unterscheidbar sind. In Gleichung (2.1) bis (2.3) darf es also keinen Unterschied machen, ob sich Teilchen 1 im Zustand $|\varphi_{\alpha_1}\rangle$ befindet und Teilchen 2 im Zustand $|\varphi_{\alpha_2}\rangle$ oder umgekehrt. Da das Kroneckerprodukt aber nicht kommutativ ist, sind zunächst alle Permutationen von Einteilchenzuständen in Gleichung (2.1) bis (2.3) verschieden. Man löst das Problem, indem man fordert, daß alle Erwartungswerte von Observablen unter Vertauschung zweier Teilchen invariant sind. Die einfachste Observable ist die Wahrscheinlichkeitsdichte. Es muß gelten:

$$\begin{aligned} & \left| \langle \varphi_{\alpha_1}, \dots, \varphi_{\alpha_i}, \dots, \varphi_{\alpha_j}, \dots, \varphi_{\alpha_N} | \psi \rangle \right|^2 \\ & \stackrel{!}{=} \left| \langle \varphi_{\alpha_1}, \dots, \varphi_{\alpha_j}, \dots, \varphi_{\alpha_i}, \dots, \varphi_{\alpha_N} | \hat{P}_{ij} | \psi \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Der Transpositionsoperator \hat{P}_{ij} vertauscht dabei die Teilchen i und j . Dies läßt sich formal ausdrücken durch:

$$\hat{P}_{ij} |\psi\rangle \stackrel{!}{=} \pm |\psi\rangle \quad \forall i, j. \quad (2.5)$$

Der Gesamthilbertraum zerfällt dadurch in drei Unterräume: erstens den Raum, der unphysikalischen Zustände, die keine Eigenzustände zum Transpositionsoperator \hat{P}_{ij} sind, zweitens den Raum der symmetrischen Eigenzustände des Transpositionsoperators \hat{P}_{ij} zum Eigenwert $+1$ und drittens den, der antisymmetrischen Eigenzustände des Transpositionsoperators \hat{P}_{ij} zum Eigenwert -1 . Das Spin-Statistik-Theorem [17] stellt einen Zusammenhang zwischen der Symmetrie der Vielteilchenzustände bezüglich des Austauschs zweier Teilchen und dem Verhalten dieser Teilchen im Vielteilchensystem her. So gehorchen Teilchen mit halbzahligem Spin

der Fermi-Dirac-Statistik, sind also Fermionen und werden durch antisymmetrische Zustände beschrieben, während Teilchen mit ganzzahligem Spin der Bose-Einstein-Statistik unterliegen, also Bosonen sind und symmetrische Zustände haben. In dieser Arbeit werden nur Bosonen betrachtet, daher beschränken wir uns auf den Unterraum der symmetrischen Zustände $|\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \dots, \varphi_{\alpha_N}\rangle_S$. Der Gesamtzustand läßt sich dann eindeutig durch Angabe der Besetzungszahlen n_i der Einteilchenzustände $|\varphi_i\rangle$ charakterisieren

$$|\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \dots, \varphi_{\alpha_N}\rangle_S = |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (2.6)$$

Man nennt dies die Besetzungszahldarstellung oder den Fockzustand.

2.1.2 Operatoren in zweiter Quantisierung

Wir definieren Erzeuger \hat{a}_i^\dagger und Vernichter \hat{a}_i eines Einteilchenzustandes $|\varphi_i\rangle$ in einer festgelegten Einteilchenbasis durch:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (2.7)$$

beziehungsweise

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \quad (2.8)$$

Für Bosonen gelten die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad (2.9)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (2.10)$$

Der Teilchenzahloperator \hat{n}_i gibt die Besetzungszahl in einem Einteilchenzustand $|\varphi_i\rangle$ an. Er ist durch die Erzeuger und Vernichter definiert

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (2.11)$$

Die Wirkung des Teilchenzahloperators auf den Vielteilchenzustand ist deshalb

$$\begin{aligned} \hat{n}_i |n_1, n_2, \dots\rangle &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots\rangle \\ &= \sqrt{n_i} \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots\rangle \\ &= n_i |n_1, n_2, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Der Vakuumzustand $|0\rangle$ ist definiert durch

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad \forall i. \quad (2.13)$$

Man kann jeden Fockzustand durch Erzeuger und den Vakuumzustand ausdrücken:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_N!}} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (2.14)$$

Für einen allgemeinen Einteilchenoperator \hat{B} auf dem Hilbertraum \mathcal{H}_N gilt:

$$\hat{B} = \sum_{i=1}^N \hat{b}_i \quad (2.15)$$

$$\hat{b}_i = \hat{1} \otimes \hat{1} \otimes \dots \otimes \hat{b} \otimes \dots \otimes \hat{1}. \quad (2.16)$$

Dabei wirkt der Operator \hat{b}_i auf den i -ten Einteilchenzustand. Der Operator ist in zweiter Quantisierung durch Erzeuger und Vernichter ausgedrückt

$$\hat{B} = \sum_{k,l} \langle k | \hat{b} | l \rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l. \quad (2.17)$$

Mit dieser Schreibweise läßt sich in der Besetzungszahldarstellung besonders leicht rechnen.

Für Zweiteilchenoperatoren \hat{D} , wie zum Beispiel dem Wechselwirkungsoperator, gilt analog:

$$\hat{D} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{d}_{i,j}. \quad (2.18)$$

Der Operator wirkt nun auf die beiden Unterräume i und j . Man erhält in zweiter Quantisierung

$$\hat{D} = \sum_{k<l} \sum_{m<n} s \langle k, l | \hat{d} | m, n \rangle_s \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m. \quad (2.19)$$

2.2 Blochfunktionen

Ursprünglich wurde die Blochtheorie 1928 von Felix Bloch zur Beschreibung von Festkörpern entwickelt [16]. Es wird dabei ein Kristallgitter betrachtet, das aus räumlich streng periodisch angeordneten und ruhenden Ionen besteht. Jedes Elektron

im Kristallgitter bewegt sich im Potential der Ionen und aller übrigen Elektronen. Es handelt sich dabei also um ein komplexes Vielteilchenproblem. In der Bloch'schen Theorie wird das Problem folgendermaßen auf ein Einteilchenproblem reduziert: Die Wirkung der Ionen und der übrigen Elektronen auf ein herausgegriffenes Elektron wird zusammengefasst und durch ein effektives Potential $U(r)$ beschrieben. Da in dieser Arbeit nur eindimensionale Potentiale betrachtet werden, wird $U(r)$ ebenfalls eindimensional angenommen. Da die Ionen streng periodisch angeordnet sind und die übrigen Elektronen in guter Näherung im Gitter gleichverteilt sind, muß das Potential die Gitterperiodizität besitzen:

$$U(r) = U(r + \delta), \quad (2.20)$$

dabei ist δ die Gitterperiode. Die stationäre Einteilchenschrodingergleichung ist durch

$$\hat{H} |\phi\rangle \equiv \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{r}) \right) |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (2.21)$$

gegeben. Aufgrund der Periodizität von $U(\hat{r})$ (Gl. (2.20)), lassen sich Aussagen über den Eigenzustand $|\phi\rangle$ des Hamiltonoperators treffen. Dafür wird der Translationsoperator \hat{T} definiert. Dieser verschiebt den Zustand im Ortsraum um die Gitterkonstante δ :

$$\langle r | \hat{T} |\phi\rangle = \langle r + \delta | \phi\rangle. \quad (2.22)$$

Wegen Gleichung (2.20) gilt

$$[U(\hat{r}), \hat{T}] = 0. \quad (2.23)$$

Da \hat{p}^2 invariant gegen Verschiebungen im Ort ist folgt damit

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0. \quad (2.24)$$

Der Hamiltonoperator vertauscht mit dem Translationsoperator und daher haben \hat{H} und \hat{T} eine gemeinsame Eigenbasis. Man kann also die $|\phi\rangle$ so wählen, daß sie nicht nur Eigenzustand zu \hat{H} sondern auch Eigenzustand zu \hat{T} sind:

$$\hat{T} |\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle. \quad (2.25)$$

Wendet man \hat{T} n -mal auf $|\phi\rangle$ an so erhält man

$$\hat{T}^n |\phi\rangle = \lambda^n |\phi\rangle. \quad (2.26)$$

Da $\langle r + \delta | \phi\rangle$ normierbar ist, folgt mit Gl. (2.22), daß $\lambda^n \langle r | \phi\rangle$ ebenfalls normierbar und damit beschränkt sein muß. Da $\langle r | \phi\rangle$ nicht für alle $\langle r |$ gleich null sein darf, muß

$$|\lambda| \leq 1 \quad (2.27)$$

sein. Andererseits muß die Normierung auch für Translationen in negativer Richtung erhalten bleiben ($n = -n$), also darf $|\lambda|$ auch nicht kleiner als 1 sein. Daraus folgt:

$$|\lambda| = 1. \quad (2.28)$$

Diese Bedingung ist erfüllt wenn

$$\lambda = e^{iq\delta} \quad (2.29)$$

ist.

Die Gleichungen (2.22), (2.25) und (2.29) liefern folgende Bedingung für die Eigenzustände von \hat{H} :

$$\langle r + \delta | \phi \rangle = e^{iq\delta} \langle r | \phi \rangle. \quad (2.30)$$

Die Gleichung (2.30) ist erfüllt, wenn $|\phi\rangle$ in der Form

$$\langle r | \phi_q \rangle = e^{iqr} u_q(r), \quad (2.31)$$

mit

$$u_q(r) = u_q(r + \delta) \quad (2.32)$$

geschrieben werden kann. Es gilt also:

Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators in einem unendlich ausgedehnten periodischen Potential haben die Form ebener Wellen, die mit der Periode des Potentials moduliert sind.

Man nennt dies, das Bloch'sche Theorem und Gl. (2.31) eine Blochfunktion. Das Bloch'sche Theorem findet zwar in erster Linie in der Festkörperphysik seine Anwendung, gilt aber allgemein für periodische Potentiale, also auch für optische Gitter. Die zu den Blochfunktionen, den Eigenfunktionen des Hamiltonoperators für periodische Potentiale, gehörenden Eigenwerte E_q sind abhängig vom Parameter q . Wir werden deshalb im Folgenden $|\phi\rangle$ mit einem Index q versehen, um zwischen Zuständen unterschiedlicher Parameter q unterscheiden zu können. Ist das System räumlich beschränkt, so gibt es diskrete

$$q_i = i \frac{2\pi}{L\delta}, \quad (2.33)$$

sowie ein diskretes Spektrum von Eigenzuständen $|\phi_{q_i}\rangle$ mit Eigenwerten E_{q_i} . Der Parameter q_i hat noch eine anschauliche Bedeutung. Bei Stößen zweier Teilchen innerhalb des periodischen Potentials ist der q_i bis auf ganzzahlige Verschiebungen um die reziproke Gitterkonstante δ erhalten. Wenn das periodische Potential

konstant null ist, wird $u_{q_i}(r)$ konstant und $\langle r | \phi_{q_i} \rangle$ damit zu einer ebenen Welle mit dem Impuls q_i . Man nennt q_i in der Blochtheorie daher den Quasiimpuls. Die Blochfunktionen stellen damit eine Verallgemeinerung der ebenen Wellen dar. Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators, also einer Observablen, bilden eine vollständige orthonormierte Basis. Der Hamiltonoperator ist eine Observable und daher erfüllen die Blochfunktionen die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelation:

$$\langle \phi_q | \phi_{q'} \rangle = \delta_{qq'} \quad (2.34)$$

$$\sum_q | \phi_q \rangle \langle \phi_{q'} | = \mathbb{1}. \quad (2.35)$$

Die aus den Blochfunktionen gebildete Basis wird Blochbasis genannt. Man kann, aufgrund der Vollständigkeit, mit der Blochbasis jeden beliebigen Einteilchenzustand $| \varphi_\alpha \rangle$ darstellen:

$$| \varphi_\alpha \rangle = \sum_{q_i} C_{q_i} | \phi_{q_i} \rangle \quad (2.36)$$

mit

$$C_{q_i} = \langle \phi_{q_i} | \varphi_\alpha \rangle \quad (2.37)$$

als Entwicklungskoeffizienten.

2.3 Besetzungszahldarstellung in der Blochbasis

Zur Beschreibung von ultrakalten Quantengasen auf optischen Gittern, reicht die Kenntnis über das Verhalten eines einzelnen Bosons in einem optischen Gitter nicht aus, sondern man muß die Wechselwirkung zwischen den Teilchen mitberücksichtigen. Daher wird das System am einfachsten durch den Formalismus der zweiten Quantisierung beschrieben (siehe Kapitel 2.1). In Kapitel 2.1.1 wurde erläutert, daß man einen allgemeinen Vielteilchenzustand, eindeutig durch die Angabe der Besetzungszahlen der einzelnen Einteilchenzustände darstellen kann, wenn die Einteilchenbasis vollständig ist. In der Blochbasis werden die Einteilchenzustände $| \phi_{q_i} \rangle$ durch die Angabe der Quasiimpulse q_i charakterisiert und auch als Blochzustände oder Quasiimpulszustände bezeichnet. Der Gesamtzustand $| \psi \rangle$ ist durch die Angabe der Besetzungszahlen n_{q_i} der Quasiimpulszustände q_i als eine Überlagerung der Fockzustände $| n_{q_1}, n_{q_2}, \dots \rangle$ eindeutig bestimmt:

$$| \psi \rangle = \sum_j C_j | \{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots\}_j \rangle \quad (2.38)$$

Die Erzeuger $\hat{c}_{q_i}^\dagger$ und Vernichter \hat{c}_{q_i} von Quasiimpulszuständen sind definiert durch:

$$\hat{c}_{q_i}^\dagger | n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_i}, \dots \rangle = \sqrt{n_{q_i} + 1} | n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_i} + 1, \dots \rangle \quad (2.39)$$

und

$$\hat{c}_{q_i} | n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_i}, \dots \rangle = \sqrt{n_{q_i}} | n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_i} - 1, \dots \rangle. \quad (2.40)$$

Der Besetzungszahloperator \hat{n}_{q_i} von Quasiimpulszuständen ist

$$\hat{n}_{q_i} = \hat{c}_{q_i}^\dagger \hat{c}_{q_i}. \quad (2.41)$$

Es ergibt sich

$$\hat{n}_{q_i} | \psi \rangle = n_{q_i} | \psi \rangle. \quad (2.42)$$

2.4 Wannierbasis

Die Eigenschaften bosonischer Quantengase auf optischen Gittern werden im Hubbard Modell ursprünglich in der Wannierbasis beschrieben [3]. Um den zugehörigen Hamiltonoperator verstehen zu können, werden deshalb zunächst die Wannierfunktionen eingeführt.

In der Quantenmechanik sind Wellenpakete, die aus einer Überlagerung von ebenen Wellen bestehen, gut bekannt. Die Wellenfunktion eines Teilchens erscheint dadurch lokalisiert auf einen bestimmten räumlichen Bereich. Eine Basis aus solchen lokalisierten Wellenfunktionen ist, auch bei einem vorhandenen periodischen Potential, für viele Anwendungen nützlich. Da Blochfunktionen eine Verallgemeinerung von ebenen Wellen auf periodische Potentiale darstellen, liegt es Nahe, diese ebenfalls zu einem Wellenpaket, bestehend aus Blochwellen, zu überlagern. Tut man dies in folgender Weise:

$$\omega(r - R_l) = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_i^I e^{-iq_i R_l} \phi_{q_i}(r), \quad (2.43)$$

mit $\phi_{q_j}(r)$ als Blochfunktionen, nennt man das dadurch entstehende Wellenpaket $\omega(r - R_l)$, mit einem Maximum bei R_l , Wannierfunktion. Definiert man ein effektiven Quasiimpuls

$$q_j = j \frac{2\pi}{I} = q_i \delta, \quad (2.44)$$

der dem Quasiimpuls q_i multipliziert mit dem Gitterabstand δ entspricht, so kann man Gleichung (2.43) schreiben als

$$\omega(r - l) = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_j^I e^{-iq_j l} \phi_{q_j}(r). \quad (2.45)$$

Im Folgenden werden die Quasiimpulse in dem Sinne effektiver Quasiimpulse q_j verwendet. Wie in Abb. 2.1 schematisch gezeigt, haben die Wannierfunktionen ein ausgeprägtes Maximum und sind stark gedämpft. Gleichung (2.43) ist eine Form

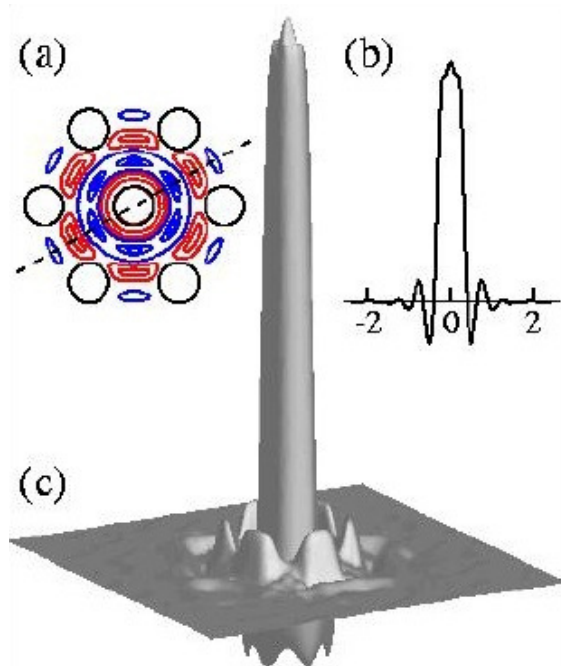


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung einer Wannierfunktion (a) Querschnitt durch eine zweidimensionale Darstellung, (b) eindimensionale Darstellung, (c) zweidimensionale Darstellung Quelle: <http://ldsd.group.shef.ac.uk/theory/wannier.php>

der Fouriertransformation und damit eine Basistransformation von der Blochbasis in die Wannierbasis. Da die Blochbasis vollständig ist, ist auch die, durch diese Transformation definierte Wannierbasis, vollständig. Man sagt, ein Teilchen, das sich mit der Wannierfunktion $\omega(r - R_l)$ beschreiben lässt, befindet sich im Wannierzustand $|R_l\rangle$. Wannierfunktionen die an verschiedenen Orten R_l ihr Maximum haben, stehen orthogonal aufeinander. (Zum Beweis siehe [18].)

Analog zu Gleichung (2.43) vermittelt die Fouriertransformation ebenfalls den Zu-

sammenhang zwischen Erzeugern

$$\hat{a}_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_{j=1}^I e^{-iq_j l} \hat{c}_{q_j}^\dagger, \quad (2.46)$$

beziehungsweise Vernichtern

$$\hat{a}_l = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_{j=1}^I e^{iq_j l} \hat{c}_{q_j} \quad (2.47)$$

von Blochzuständen und Wannierzuständen. Während \hat{a}_l^\dagger und \hat{a}_l Teilchen im Wannierzustand $|R_l\rangle$ erzeugen, beziehungsweise vernichten, erzeugen und vernichten $\hat{c}_{q_j}^\dagger$ und \hat{c}_{q_j} Teilchen im Quasiimpulszustand $|q_j\rangle$. Der Teilchenzahloperator \hat{n}_l in der Wannierbasis ergibt sich damit zu

$$\hat{n}_l = \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l = \frac{1}{I} \sum_{j=1}^I \sum_{j'=1}^I e^{-i(q_j - q_{j'})l} \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_{j'}}. \quad (2.48)$$

Kapitel 3

Bose-Hubbard Modell

In diesem Kapitel wird zunächst das Hubbard Modell erläutert. Dann wird die Anwendung des Hubbard Modells auf bosonische Teilchen beschrieben und der Bose-Hubbard Hamiltonoperator in der Wannierbasis eingeführt. Schließlich wird dieser in die, für diese Arbeit relevante, Blochbasis transformiert.

3.1 Hubbard Modell

Das Hubbard Modell wurde 1963 von J. Hubbard [1] entwickelt, um die Bewegung von Elektronen in dem als starr angenommenen Gitter von Atomrümpfen eines Festkörpers zu beschreiben. Es stellt die einfachste Möglichkeit dar, die Bandstruktur im Energiespektrum von Festkörpern, Isolator-Leiter-Phasenübergänge, ferromagnetische Phänomene und in neuerer Zeit auch Hochtemperatursupraleitung qualitativ zu beschreiben [19]. Das System wird hierbei durch einen Hamiltonoperator charakterisiert, der sich aus zwei Termen zusammensetzt. Dem Tunnelterm, der das Tunneln der Elektronen von einem Gitterplatz zum nächsten beschreibt und dem Wechselwirkungsterm, der die Wechselwirkung der Elektronen untereinander charakterisiert. Die abstoßenden Coloumbkräfte werden dabei als reine Kontaktwechselwirkung angenommen. Das Hubbard Modell wurde inzwischen vielfach weiterentwickelt. Beispiele hierfür sind die Annahme einer längerreichweitigen Wechselwirkung ("extended Hubbard model") oder die Anwendung auf bosonische Teilchen ("Bose-Hubbard Modell") [20]. 1998 wurde das Modell von Jaksch et al. [3] angewendet, um ultrakalte bosonische Quantengase in optischen Gittern zu be-

schreiben. Da für genügend niedrige Temperaturen nur das niedrigste energetische Band besetzt ist, liefert das Bose-Hubbard Modell dort sehr gute Ergebnisse. Durch die Einschränkung auf das niedrigste Energieband ist die Dimension des Einteilchenraumes endlich und zwar so groß wie die Anzahl I der Gitterplätze. Die Fockzustände $|n_1, n_2, \dots\rangle$ aus Kapitel 2.1.1 vereinfachen sich dann zu $|n_1, n_2, \dots, n_I\rangle$. Unter anderem wurde mit dem Bose-Hubbard Modell der Phasenübergang vom Superfluid zum Mott-Isolator vorhergesagt [3].

3.2 Bose-Hubbard Hamiltonoperator

Bei der Beschreibung von einem Bosegas auf einem optischen Gitter, kann man die Teilchen zum Beispiel durch Wannierfunktionen $\omega(r - R_l)$ beschreiben, welche stark auf einen Gitterplatz R_l lokalisiert sind. Hierbei ist die Besetzungszahldarstellung besonders anschaulich, da hier ein besetzter Einteilchenzustand $|R_l\rangle$, ein vorhandenes Teilchen am Gitterplatz R_l bedeutet.

Im Hubbard Modell können die Teilchen ausschließlich durch Tunneln ihre Position, das heißt den lokalisierten Wannierzustand, verändern. Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist höher, je niedriger die Potentialschwelle ist. Gleichzeitig bedeutet eine niedrige Potentialschwelle eine schwache Wechselwirkung der Teilchen untereinander. Die Wechselwirkung ist eine Van-der-Waals Wechselwirkung. Die Van-der-Waals Wechselwirkung ist kurzreichweitig, hat einen kleinen Bereich anziehenden Potentials und bei kleinen Abständen ist sie stark abstoßend. Die Wannierfunktionen sind sehr viel ausgedehnter sind als der Bereich der Wechselwirkung. Deswegen kann die Detailstruktur der Wechselwirkung nicht aufgelöst werden. In dieser Arbeit wird die Wechselwirkung immer als abstoßend angenommen.

Der stationäre Hamiltonoperator für miteinander wechselwirkende Teilchen in einem externen Potential $V(r)$ ist

$$\hat{H} = \int dr \hat{\psi}^\dagger(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \hat{\psi}(r) + \frac{1}{2} g \int dr \hat{\psi}^\dagger(r) \hat{\psi}^\dagger(r) \hat{\psi}(r) \hat{\psi}(r). \quad (3.1)$$

$\hat{\psi}(r)$ und $\hat{\psi}^\dagger(r)$ sind dabei die Feldoperatoren. $V(r)$ ist in unserem Fall das Potential, welches durch das optische Gitter erzeugt wird. Der erste Term beschreibt die Bewegung der Teilchen im Gitterpotential. Der zweite Term beschreibt die Wechselwirkung der Teilchen untereinander, wobei der Faktor g die Stärke dieser Wechselwirkung angibt.

Das Gitterpotential wird durch einen Laser der Wellenlänge λ erzeugt und hat daher die Form:

$$V(r) = V_0 \sin^2\left(\frac{2\pi}{\lambda}r\right). \quad (3.2)$$

Man kann die Feldoperatoren $\hat{\psi}(r)$ und $\hat{\psi}^\dagger(r)$ in der Wannier Basis (siehe Kapitel 2.4) schreiben als

$$\hat{\psi}(r) = \sum_{l=1}^I \omega_0(r - R_l) \hat{a}_l$$

und

$$\hat{\psi}^\dagger(r) = \sum_{l=1}^I \omega_0^*(r - R_l) \hat{a}_l^\dagger, \quad (3.3)$$

wobei I die Anzahl der Gitterplätze angibt. Da wir nur Bosonen betrachten, sind \hat{a}_l^\dagger und \hat{a}_l Erzeuger und Vernichter, die die Kommutatorrelationen (2.9) und (2.10) erfüllen. $\omega_0(r - R_l)$ sind Wannierfunktionen im Grundzustand, mit ihrem Maximum auf dem Gitterplatz R_l . Die Breite der Wannierfunktionen hängt von der Form des Gitterpotentials ab. Mit Gleichung (3.2), (3.3), on-site-Wechselwirkung und der Annahme, daß die Teilchen nur zu benachbarten Gitterplätzen tunneln können, kann man Gleichung (3.1) schreiben als

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{l=1}^I (\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1} + \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l) \int dr \omega_0^*(r - R_l) V(r) \omega_0(r - R_l - \delta) \\ &\quad + \sum_{l=1}^I \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l \frac{1}{2} g \int dr |\omega_0(r - R_l)|^4 \\ &= \sum_{l=1}^I (\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1} + \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l) \int dr \omega_0^*(r - R_l) V(r) \omega_0(r - R_l - \delta) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^I \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) g \int dr |\omega_0(r - R_l)|^4. \end{aligned} \quad (3.4)$$

δ ist hierbei der Abstand zwischen zwei Gitterplätzen. Da das Potential, das durch das optische Gitter erzeugt wird periodisch ist, sind alle Gitterplätze identisch und

die Integrale in Gleichung (3.4) sind unabhängig vom Index l . Wir definieren

$$\begin{aligned} J &\equiv \int dr \omega_0^*(r - R_l) V(r) \omega_0(r - R_l - \delta) \\ U &\equiv g \int dr |\omega_0(r - R_l)|^4. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Die Parameter U und J hängen beide von der Form der Wannierfunktionen ab. Diese wiederum hängt von dem optischen Gitter, erzeugt durch einen Laser, ab. Das bedeutet, durch Ändern der Amplitude des Lasers ändern sich sowohl U als auch J .

Der Hamiltonoperator für ein Bose-Gas im Hubbard Modell ergibt sich mit obigen Annahmen im Formalismus der zweiten Quantisierung in der Wannier Basis zu

$$\hat{H} = -J \sum_{l=1}^I (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}) + \frac{U}{2} \sum_{l=1}^I \hat{n}_l(\hat{n}_l - 1). \quad (3.6)$$

Er wird Bose-Hubbard Hamiltonoperator genannt.

Es kann nur zu benachbarten Plätzen getunnelt werden. Dazu erzeugt \hat{a}_{l+1}^\dagger ein Teilchen am Gitterplatz $l + 1$, das vorher am Platz l vom Operator \hat{a}_l vernichtet wurde. Diese beiden Operatoren müssen immer als Pärchen auftreten, da Teilchenzahlerhaltung gilt. Außerdem werden zyklische Randbedingungen angenommen, so daß ein Teilchen vom Gitterplatz I zum Gitterplatz 1 tunneln kann. Es kann natürlich in beide Richtungen getunnelt werden, deshalb gibt es den zweiten Term mit vertauschten Indizes.

Der zweite Term wird Wechselwirkungsterm genannt. Da die Wannierfunktionen sehr schmal gegenüber der Breite eines Gitterplatzes sind, wird in sehr guter Näherung on-site-Wechselwirkung angenommen. Der Wechselwirkungsterm wird daher nur verschieden von Null, wenn sich mehr als ein Teilchen auf einem Platz befindet. Bei einer verschwindenden Wechselwirkungsstärke $U/J = 0$, sind die Teilchen nicht an einem Gitterplatz lokalisiert. Die Tunnelwahrscheinlichkeit der Teilchen ist sehr groß, deshalb sind die Phasen der Wellenfunktionen über viele Gitterplätze hinweg korreliert. Alle Teilchen befinden sich in demselben Einteilchenzustand. Dies ist die superfluide Phase. Wenn die Wechselwirkung sehr groß ist, wird jedes Teilchen einen eigenen Platz besetzen. Dabei ist es, wegen der on-site-Wechselwirkung, unerheblich ob sie einen oder mehrere Plätze voneinander entfernt sind. Bei einem System mit genausovielen Potentialtöpfen wie Teilchen wird dann auf jedem Gitterplatz ein Teilchen sitzen. Die Fluktuation ist klein, da keines der Teilchen seinen

Platz verlassen wird, weil es dann die stark abstoßende Wechselwirkung mit seinem Nachbarn spüren würde. Man nennt dies die Mott-Isolatorphase.

Wenn es mehr Plätze als Teilchen gibt, bleibt in der Mott-Isolatorphase selbst bei unendlicher Wechselwirkung ein superfluider Anteil erhalten. Das liegt daran, daß es immer freie Gitterplätze gibt, auf die die Teilchen ungehindert tunneln können. Das Gleiche passiert, wenn es mehr Teilchen als Plätze im System gibt. Man kann dies fogendermaßen erklären: es gibt genausoviele lokalisierte Teilchen wie Gitterplätze. Alle übrigen Teilchen sind delokalisiert. Für die Teilchen die nicht auf einen Gitterplatz lokalisiert sind, macht es keinen Unterschied auf welchem Gitterplatz sie sich befinden, da sie auf jedem Gitterplatz mit den lokalisierten Teilchen gleichermaßen wechselwirken.

Für den Phasenübergang vom Superfluid zum Mott-Isolator ist ausschließlich der Quotient aus Wechselwirkung und Tunnelwahrscheinlichkeit entscheidend.

3.3 Bose-Hubbard Hamiltonoperator in der Bloch Basis

In Kapitel 3.2 wurde der Hamiltonoperator des Bose-Hubbard Modells

$$\hat{H} = -J \sum_{l=1}^I (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}) + \frac{U}{2} \sum_{l=1}^I \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \quad (3.7)$$

in der Wannier Basis eingeführt. Dieser wird im Folgenden in die Bloch Basis transformiert.

Mit

$$\hat{a}_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_{j=1}^I e^{-iq_j l} \hat{c}_{q_j}^\dagger \quad (3.8)$$

und

$$\hat{a}_l = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_{j=1}^I e^{iq_j l} \hat{c}_{q_j} \quad (3.9)$$

(siehe Kapitel 2.4) kann der Wechselwirkungsanteil

$$\hat{U} \equiv \frac{U}{2} \sum_{l=1}^I \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \quad (3.10)$$

des Bose-Hubbard-Hamiltonoperators geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
 \hat{U} &= \frac{U}{2} \sum_{l=1}^l \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{l=1}^l (\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l - \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{l=1}^l \sum_{j=1}^l \sum_{k=1}^l \left(\frac{1}{I} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l e^{-iq_k l} e^{iq_j l} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} - \frac{1}{I} e^{-iq_k l} e^{iq_j l} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} \right) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{l=1}^l \sum_{j=1}^l \sum_{k=1}^l \left(\sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I^2} e^{-iq_n l} e^{iq_m l} e^{-iq_k l} e^{iq_j l} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} - \frac{1}{I} e^{i(q_j - q_k)l} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} \right) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{l=1}^l \sum_{j=1}^l \sum_{k=1}^l \left(\sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I^2} e^{i(q_j + q_m - q_k - q_n)l} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} - \frac{1}{I} e^{i(q_j - q_k)l} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} \right). \quad (3.11)
 \end{aligned}$$

Mit

$$\frac{1}{I} \sum_{l=1}^l e^{i(m-n)l} = \delta_{mn} \quad (3.12)$$

vereinfacht sich (3.11) zu

$$\begin{aligned}
 \hat{U} &= \frac{U}{2} \sum_{l=1}^l \sum_{j=1}^l \sum_{k=1}^l \left(\sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I^2} e^{i(q_j + q_m - q_k - q_n)l} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} - \frac{1}{I} e^{i(q_j - q_k)l} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} \right) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{j=1}^l \sum_{k=1}^l \left(\sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I^2} I \delta_{q_j(q_m q_k q_n)} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} - \frac{1}{I} I \delta_{q_j q_k} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_j} \right) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{k=1}^l \left(\sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_k + q_n - q_m} - \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_k} \right) \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{k=1}^l \left(\sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_k + q_n - q_m} - \hat{n}_{q_k} \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^l \sum_{m=1}^l \sum_{n=1}^l \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_k + q_n - q_m} - I \right). \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Wendet man noch die Kommutatorrelationen

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad (3.14)$$

und

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (3.15)$$

3.3 · Bose-Hubbard Hamiltonoperator in der Bloch Basis

(siehe Kapitel 2.1.2) an, so ergibt sich der Wechselwirkungsterm zu

$$\begin{aligned}
 \hat{U} &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} - I \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger (\hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} + \delta_{q_k q_m}) \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} - I \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} + \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \delta_{q_k q_m} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} - I \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} + \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_n} - I \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} + \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{n}_{q_n} - I \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} + \sum_{m=1}^I \frac{1}{I} I - I \right) \\
 &= \frac{U}{2} \left(\sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \frac{1}{I} \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k+q_n-q_m} + \frac{1}{I} I^2 - I \right) \\
 &= \frac{U}{2I} \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \hat{c}_{q_n}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{q_k+q_n-q_m}. \tag{3.16}
 \end{aligned}$$

Für den kinetischen Anteil des Bose Hubbard Hamiltonoperators, in Wannierbasis

$$\hat{J} \equiv -J \sum_{l=1}^I (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}), \tag{3.17}$$

ist die Transformation analog:

$$\begin{aligned}
 \hat{J} &= -J \sum_{l=1}^I \frac{1}{I} \left(\sum_{j=1}^I \sum_{j'=1}^I e^{iq_j(l+1)} e^{-iq_{j'}l} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j'} + \sum_{k=1}^I \sum_{k'=1}^I e^{iq_k l} e^{-iq_{k'}(l+1)} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} \right) \\
 &= -J \sum_{l=1}^I \frac{1}{I} \left(\sum_{j=1}^I \sum_{j'=1}^I e^{i(q_j - q_{j'})l} e^{iq_j} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j'} + \sum_{k=1}^I \sum_{k'=1}^I e^{i(q_k - q_{k'})l} e^{-iq_{k'}} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} \right) \\
 &= -J \frac{1}{I} \left(\sum_{j=1}^I \sum_{j'=1}^I I \delta(q_j - q_{j'}) e^{iq_j} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j'} + \sum_{k=1}^I \sum_{k'=1}^I I \delta(q_k - q_{k'}) e^{-iq_{k'}} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} \right) \\
 &= -J \left(\sum_{j=1}^I e^{iq_j} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + \sum_{k=1}^I e^{-iq_k} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \right). \tag{3.18}
 \end{aligned}$$

Da der zweite Term das komplex konjugierte zum ersten Term sein muß, kann man die beiden Summen zusammenfassen:

$$\begin{aligned}
 \hat{J} &= -J \sum_{j=1}^I \left(e^{iq_j} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + e^{-iq_j} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right) \\
 &= -J \sum_{j=1}^I \left(e^{iq_j} + e^{-iq_j} \right) \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j. \tag{3.19}
 \end{aligned}$$

Mit

$$\cos(x) = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \tag{3.20}$$

ergibt sich der kinetische Anteil zu

$$\begin{aligned}
 \hat{J} &= -J \frac{1}{I} \sum_{j=1}^I 2 \cos(q_j - 1) \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \\
 &= -J \frac{1}{I} \sum_{j=1}^I 2 \cos(q_j - 1) \hat{n}_{q_j}. \tag{3.21}
 \end{aligned}$$

Der gesamte Bose-Hubbard Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{J} + \hat{U} \tag{3.22}$$

ergibt sich in Blochbasis aus Gleichung (3.16) und Gleichung (3.21) zu

$$\hat{H} = -J \sum_{j=1}^I 2 \cos(q_j - 1) \hat{n}_{q_j} + \frac{U}{2I} \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)}. \tag{3.23}$$

Kapitel 4

Reduzierte Basis

In diesem Kapitel wird die reduzierte Basis hergeleitet. Dafür wird verwendet, daß sich in der Bloch Basis der Grundzustand mit einem Unterraum des Hilbertraumes, nämlich der reduzierten Basis, korrekt beschreiben läßt. Der Gesamtzustand $|\psi\rangle$ des Bose-Gases wird hierbei durch eine Überlagerung aus Fockzuständen dargestellt:

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |\{n_{q_1}, \dots, n_{q_i}\}_i\rangle \quad (4.1)$$

(siehe Kapitel 2.1.1 und Kapitel 2.3). Die dafür verwendete Einteilchenbasis ist die Blochbasis. Durch die Angabe der Koeffizienten C_i der Fockzustände $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_i}\}_i\rangle$ ist der Zustand $|\psi\rangle$ bei jeder beliebigen Wechselwirkungsstärke zwischen den Teilchen eindeutig bestimmt. Die Koeffizienten erhält man durch Lösen des Eigenwertproblems

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (4.2)$$

Hierfür wird die Bose-Hubbard Hamiltonmatrix in der Blochbasis diagonalisiert. Bei der exakten Lösung stellt man fest, daß viele der Koeffizienten im Grundzustand für alle Wechselwirkungsstärken U/J gleich null sind. Diese Beobachtung läßt sich mit Hilfe der Störungstheorie erklären.

Der Grundzustand des Bose-Hubbard Modells wird, insbesondere für kleine Wechselwirkungsstärken U/J , stark von einem einzigen Fockzustand dominiert. (Siehe Abbildung 5.1 und 5.5.) Dieser Zustand, bei dem alle Teilchen den Einteilchenquasiimpuls $q = 0$ haben, wird als ungestörter Zustand betrachtet, $|\psi^{(0)}\rangle =$

$|N, 0, 0, \dots\rangle$. Es wird nun, ausgehend von diesem Zustand, eine störungstheoretische Entwicklung durchgeführt. Der kinetische Anteil,

$$\hat{J} = -J \sum_{j=1}^I 2 \cos(q_j - 1) \hat{n}_{q_j}, \quad (4.3)$$

des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \hat{J} + \hat{U} \quad (4.4)$$

wird als ungestörter Anteil, der Wechselwirkungsanteil,

$$\hat{U} = \frac{U}{2I} \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)}, \quad (4.5)$$

wird als Störung betrachtet. Man erhält dann für die Störungsreihe mit λ als Ordnungparameter

$$(\hat{J} + \lambda \hat{U})(|\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots) \quad (4.6)$$

$$= (E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots)(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle + \dots). \quad (4.7)$$

Es gilt, mit $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_\mu\rangle$ und $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_n\rangle$ als Fockzustände mit Blochfunktionen als Einteilchenbasis, die rekursive Formel:

$$|\psi_0^{(k)}\rangle = \sum_{\mu \neq 0} c_{0\mu}^{(k)} |\{n_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_\mu\rangle, \quad (4.8)$$

mit

$$c_{0\mu}^{(k)} = \sum_{n \neq 0} c_{0n}^{(k-1)} \frac{\langle \{n_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_\mu | \hat{U} | \{N_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_n \rangle}{E_0^{(0)} - E_\mu^{(0)}} + \sum_{i=1}^k c_{0\mu}^{(k-i)} \frac{E_0^{(i)}}{E_0^{(0)} - E_\mu^{(0)}}, \quad (4.9)$$

wobei die $c_{0n}^{(1)}$ und $E_0^{(i)}$ gegeben sind durch

$$c_{0\mu}^{(1)} = \frac{\langle \{n_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_\mu | \hat{U} | \psi^{(0)} \rangle}{E_0^{(0)} - E_\mu^{(0)}} \quad (4.10)$$

und

$$E_\nu^{(i)} = \sum_{\mu \neq \nu} c_{\nu\mu}^{(i-1)} \langle \{n_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_\nu | \hat{U} | \{N_{q_1}, \dots, n_{q_I}\}_\mu \rangle. \quad (4.11)$$

Die Fockzustände bilden eine orthonormierte Basis, das heißt Skalarprodukte zwischen verschiedenen Fockzuständen sind immer null. In Gleichung (4.9) bis (4.11)

sind daher die Matrixelemente nur dann verschieden von null, wenn der Operator \hat{U} den Ket-Zustand mit dem Bra-Zustand verknüpft.

Man kann nun zeigen, daß der Störanteil \hat{U} des Hamiltonoperators mit dem Gesamtimpulsoperator eines Fockzustandes \hat{Q} kommutiert. Dies bedeutet, daß bei Anwendung von \hat{U} auf einen Fockzustand dessen Gesamtimpuls erhalten bleibt. \hat{Q} ist definiert als die Summe der Impulse mal deren Besetzungszahl:

$$\hat{Q} = \sum_{i=1}^I q_i \hat{n}_{q_i}. \quad (4.12)$$

Für den Kommutator

$$[\hat{U}, \hat{Q}] = \hat{U}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{U} \quad (4.13)$$

ergibt sich:

$$\hat{U}\hat{Q} = \frac{U}{2I} \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \sum_{i=1}^I q_i \hat{n}_{q_i} \quad (4.14)$$

$$= \frac{U}{2I} \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I q_{q_i} \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \hat{n}_{q_i}. \quad (4.15)$$

Um zu beweisen, daß der Kommutator $[\hat{U}, \hat{Q}]$ null ist, muß man zeigen, daß \hat{n}_{q_i} mit $\hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)}$ für beliebige Indizes i, j, k, m vertauscht.

Unter Verwendung der allgemeinen Kommutatorrelation:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (4.16)$$

und der Eigenschaft für Bosonen

$$[\hat{c}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}^\dagger] = \delta_{ij}, \quad (4.17)$$

erhält man

$$\begin{aligned} [\hat{n}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}] &= [\hat{c}_{q_i}^\dagger \hat{c}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}] \\ &= \hat{c}_{q_i}^\dagger [\hat{c}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}] + [\hat{c}_{q_i}^\dagger, \hat{c}_{q_j}] \hat{c}_{q_i} \\ &= -\delta_{ij} \hat{c}_{q_i} \end{aligned} \quad (4.18)$$

und

$$\begin{aligned} [\hat{n}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}^\dagger] &= [\hat{c}_{q_i}^\dagger \hat{c}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}^\dagger] \\ &= \hat{c}_{q_i}^\dagger [\hat{c}_{q_i}, \hat{c}_{q_j}^\dagger] + [\hat{c}_{q_i}^\dagger, \hat{c}_{q_j}^\dagger] \hat{c}_{q_i} \\ &= \delta_{ij} \hat{c}_{q_i}^\dagger. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Wendet man Gleichung (4.18) und (4.19) auf die Summe

$$\sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \hat{n}_{q_i} \quad (4.20)$$

an, so erhält man

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \hat{n}_{q_i} \\ = & \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \left(\hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} (\hat{n}_{q_i} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} + \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)}) \right) \\ = & \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \left(\hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger (\hat{n}_{q_i} \hat{c}_{q_m} + \hat{c}_{q_m}) \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} + \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \right) \\ = & \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \left(\hat{c}_{q_j}^\dagger (\hat{n}_{q_i} \hat{c}_{q_k}^\dagger - \hat{c}_{q_k}^\dagger) \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} + 2 \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \right) \\ = & \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \left((\hat{n}_{q_i} \hat{c}_{q_j}^\dagger - \hat{c}_{q_j}^\dagger) \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} + \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \right) \\ = & \sum_{j=1}^I \sum_{k=1}^I \sum_{m=1}^I \sum_{i=1}^I \left(\hat{n}_{q_i} \hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)} \right) \end{aligned} \quad (4.21)$$

woraus sich direkt

$$[\hat{c}_{q_j}^\dagger \hat{c}_{q_k}^\dagger \hat{c}_{q_m} \hat{c}_{(q_j+q_k-q_m)}, \hat{n}_{q_i}] = 0 \quad (4.22)$$

ergibt.

Da der Störanteil \hat{U} des Hamiltonoperators mit dem Gesamtimpulsoperator \hat{Q} eines Fockzustandes, der ja Eigenzustand zu \hat{Q} ist, vertauscht, ändert sich durch Anwenden von \hat{U} auf einen Fockzustand dessen Gesamtimpuls nicht.

In Gleichung (4.9) bis (4.11) sind nur Matrixelemente zwischen Zuständen, die sich durch Anwenden des Störanteils des Hamiltonoperators \hat{U} auf den ungestörten Zustand $|\psi^{(0)}\rangle$ erzeugen lassen, ungleich null. Dies bedeutet für die Störreihe, daß alle Fockzustände, die einen nichtverschwindenden Beitrag liefern, identische Gesamtquasiimpulse haben. Entwickelt man die Störung in unendlicher Ordnung, so ist diese identisch mit der Diagonalisierung. Das heißt, daß alle Eigenzustände zum Hamiltonoperator aus Fockzuständen zusammengesetzt sind, die identische Gesamtquasiimpulse haben. Der ungestörte Zustand $|N, 0, 0, \dots\rangle$ hat, wie sich leicht überprüfen lässt, einen Gesamtquasiimpuls von null:

$$\begin{aligned} \hat{Q} |N, 0, 0, \dots\rangle &= \sum_{i=1}^I q_i \cdot \hat{n}_{q_i} |N, 0, 0, \dots\rangle \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Da der Störanteil des Hamiltonoperators den Gesamtquasiimpuls der Fockzustände nicht verändert, müssen im Grundzustand also alle beitragenden Fockzustände

einen verschwindenden Gesamtquasiimpuls haben. Alle übrigen Fockzustände leisten keinen Beitrag zum Grundzustand. Dies gilt für beliebige Wechselwirkungsstärken U/J .

In Abbildung 4.1 ist links ein Beispiel für einen Fockzustand zu sehen, dessen Gesamtimpuls gleich null ist, sein Beitrag zum Grundzustand verschwindet also nicht für alle Wechselwirkungsstärken U/J :

$$Q = -2 \cdot 1 + -1 \cdot 0 + 0 \cdot 2 + 1 \cdot 2 + 2 \cdot 0 = 0 \quad \Rightarrow \text{Koeffizient} \neq 0.$$

Rechts in Abbildung 4.1 ist ein Beispiel für einen Basiszustand zu sehen, dessen Koeffizient im Grundzustand verschwindet, da der Gesamtimpuls verschieden von null ist:

$$Q = -2 \cdot 2 + -1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 2 + 2 \cdot 0 = -2 \neq 0 \quad \Rightarrow \text{Koeffizient} = 0.$$

Da man direkt an den Basiszuständen erkennt, welche einen verschwindenden Beitrag zum Grundzustand leisten, kann man diese für alle Berechnungen, bei denen nur der Grundzustand benötigt wird, ausschliessen. Durch die so erhaltene, ungefähr eine Grössenordnung kleinere Basis, läßt sich der numerische Aufwand für Berechnungen von Grundzustandseigenschaften deutlich reduzieren.

Für alle Rechnungen, bei denen angeregte Zustände betrachtet werden, ist diese Reduzierung nicht anwendbar (siehe Kapitel 5.4). Zwar können mit der reduzierten Basis auch höher angeregte Zustände betrachtet werden, jedoch nur solange die beitragenden Fockzustände alle einen Gesamtquasiimpuls von null haben. In Abbildung 5.6 sind die Energieeigenzustände mit einem Kreuz markiert, die mit der reduzierten Basis erzeugt werden können.

In der reduzierten Basis hat jeder der Fockzustände einen Gesamtquasiimpuls von null und der damit erzeugte Eigenzustand zum Hamiltonoperator hat ebenfalls einen

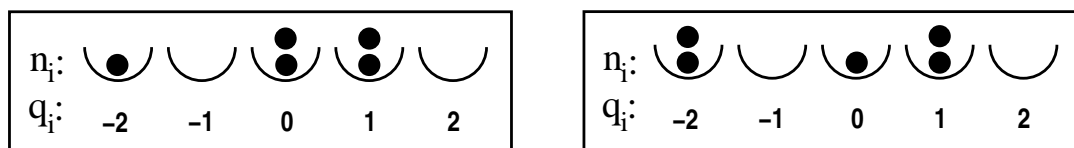


Abbildung 4.1: Links: Beispiel für einen Basiszustand mit Gesamtimpuls gleich null, also Koeffizient im Grundzustand ungleich null, wenn die Wechselwirkung größer null ist, rechts: Basiszustand dessen Gesamtimpuls ungleich null ist, dessen Koeffizient also für alle Wechselwirkungsstärken verschwindet.

Kapitel 4 · Reduzierte Basis

Gesamtquasiimpuls von null. Dies trifft insbesondere auf den Grundzustand zu. Alle folgenden Rechnungen werden, soweit dies möglich ist, mit der reduzierten Basis durchgeführt.

Kapitel 5

Observablen

In diesem Kapitel werden Observablen eingeführt, mit deren Hilfe sich das Verhalten des Bose-Hubbard Modells bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken beschreiben lässt.

5.1 Mittlere Besetzungszahl

Der Eigenzustand $|\psi\rangle$ des Bose-Hubbard-Hamiltonoperators für eine bestimmte Wechselwirkung setzt sich, wie in Kapitel 2.3 beschrieben, aus einer Überlagerung von Fockzuständen zusammen. Die mittlere Besetzungszahl

$$\bar{n}_{q_i} = \langle \psi | \hat{n}_{q_i} | \psi \rangle \quad (5.1)$$

gibt für den Eigenzustand $|\psi\rangle$ des Bose-Hubbard-Hamiltonoperators an, wie stark der Quasiimpuls q_i im Mittel besetzt ist. Die maximale mittlere Besetzungszahl ist dabei gleich der Gesamtteilchenzahl. Mit den Gleichungen (2.3) und (2.6) lässt sich \bar{n}_{q_i} umschreiben zu:

$$\bar{n}_{q_i} = \sum_k^D \sum_l^D C_k^* C_l \langle_k \{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_k}, \dots, n_{q_l}\} | \hat{n}_{q_i} | \{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_l}, \dots, n_{q_l}\}_l \rangle, \quad (5.2)$$

wobei die Summe über alle Fockzustände bis zur Dimension D des Vielteilchenhilbertraums läuft. Da die Fock-Zustände eine orthogonale Basis bilden, vereinfacht

sich Gl (5.2) zu

$$\bar{n}_{q_i} = \sum_k^D |C_k|^2 n_{q_i}^{(k)}. \quad (5.3)$$

Dabei gibt $n_{q_i}^{(k)}$ die Besetzungszahl des Quasiimpulses q_i im Fockzustand $|\{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_i}\}_k\rangle$ an. Bei einer verschwindenden Wechselwirkung gilt für den Grundzustand, daß die mittlere Besetzungszahl n_{q_1} des niedrigsten Quasiimpulses gegen N geht. Da die Teilchen nicht miteinander wechselwirken und das Modell am absoluten Temperaturnullpunkt betrachtet wird, befinden sich alle Bosonen in demselben Einteilchenzustand mit dem niedrigsten Quasiimpuls. Das heißt die Impulsverteilung der Teilchen ist sehr scharf, im Rahmen dieses Modells, ein Peak. Die Transformation in eine Basis mit Ortsraumquantenzahlen, zum Beispiel der Wannier Basis ist eine Fouriertransformation (siehe Kapitel 3.3). Deshalb ist der scharfe Peak der Quasiimpulsverteilung gleichbedeutend mit einer völligen Delokalisierung der Teilchen im Ortsraum. Sie können also ungehindert von einem Gitterplatz zum nächsten tunneln. Diesen Zustand des Systems nennt man superfluiden Zustand. Bei großer Wechselwirkungsstärke sind die Teilchen stark an einzelne Gitterplätze gebunden. Man nennt dies den Mott-Isolator Zustand. In der Bloch Basis bedeutet das, daß bei großer Wechselwirkungsstärke Fockzustände mit höheren Impulsen verstärkt zum Grundzustand beitragen. In Abbildung 5.1 ist die mittlere Besetzungszahl über der Wechselwirkungsstärke U/J aufgetragen. Eine Möglichkeit den Phasenübergang zu bestimmen, ist ihn an der Stelle der größten Steigung von \bar{n}_{q_1} anzunehmen.

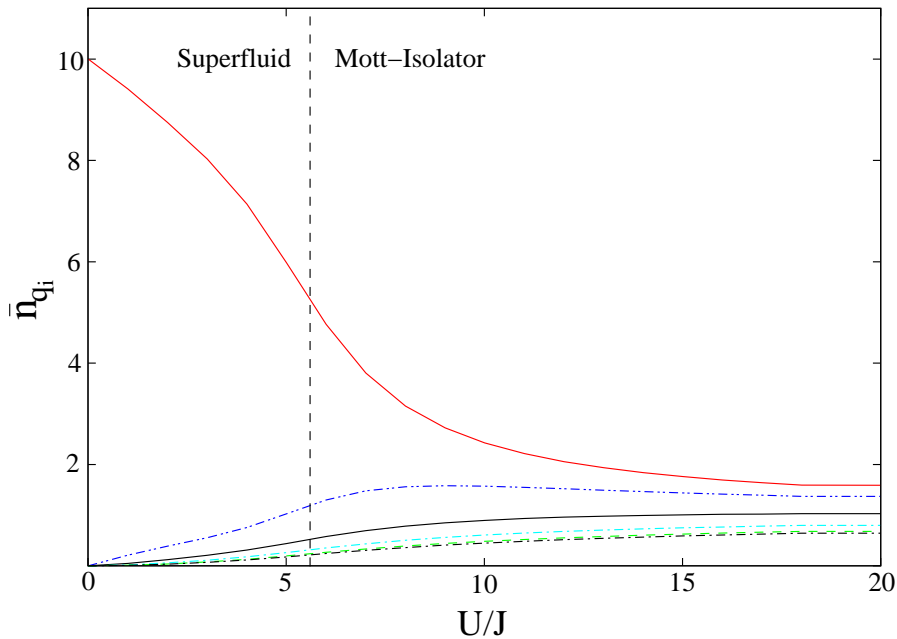


Abbildung 5.1: Mittlere Besetzungszahlen \bar{n}_{q_i} der Quasiimpulse q_i über U/J in einem System aus 10 Teilchen auf 10 Gitterplätzen. Von oben nach unten: $q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6$. Besetzungszahlen der q_{10} bis q_7 verhalten sich wie die der q_1 bis q_4 . Die gestrichelte Linie deutet den Phasenübergang an der Stelle der größten Steigung von \bar{n}_{q_1} an.

5.2 Besetzungszahlfuktuationen

Eine weitere Observable ist die Varianz der mittleren Besetzungszahl n_{q_i} des Quasiimpulses q_i , die Fluktuation σ_i . Sie ist definiert durch:

$$\sigma_i = \left(\langle \psi | \hat{n}_{q_i}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{n}_{q_i} | \psi \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.4)$$

Die Fluktuation des niedrigsten Quasiimpulses σ_0 , hat für 10 Teilchen auf 10 Gitterplätzen bei $U/J \approx 6$ ein globales Maximum σ_{max} (siehe Abbildung 5.2). Dieses Maximum verschiebt sich für größere Systeme zu kleineren Wechselwirkungsstärken. In Abbildung 5.3 ist die Position des Maximums in Abhängigkeit von der Systemgröße N aufgetragen. Diese Abhängigkeit lässt sich mit der Funktion

$$f(N) = a \cdot \exp(b N^c) \quad (5.5)$$

beschreiben. Um den Fehler der durch die Beschränkung auf kleine Systemgrößen entsteht abzuschätzen, werden die Parameter a, b und c zunächst für 3 Teilchen auf

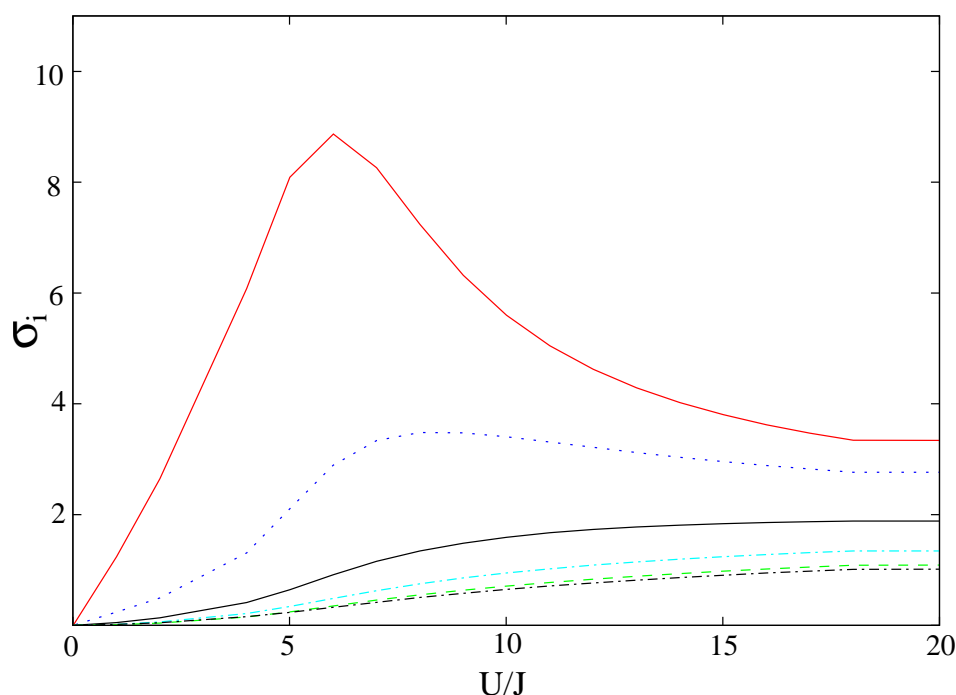


Abbildung 5.2: Fluktuation der Besetzungszahlen der Quasiimpulse σ_i in einem System aus 10 Teilchen auf 10 Gitterplätzen. Von oben nach unten: $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5$. σ_{10} bis σ_6 verhalten sich wie σ_1 bis σ_4 .

3 Gitterplätzen bis 11 Teilchen auf 11 Gitterplätzen bestimmt (siehe auch Abbildung 5.4(a)) und dann die kleinen Systemgrößen nach und nach weggelassen (siehe Abbildung 5.4(b) bis 5.4(d)). Es ergeben sich folgende Parameter:

Fitpunkte/ Gitterlänge	3-11	4-11	5-11	6-11	7-11	8-11	9-11
a	5,00	4,61	4,45	4,34	4,24	4,43	3,19
b	6,60	4,89	4,31	3,92	3,62	4,38	2,25
c	-1,56	-1,28	-1,17	-1,09	-1,02	-1,17	-0,56

Nimmt man also alle exakt berechenbaren Systemgrößen mit, so wird der Wert für σ_{max} für unendlich große Systeme zu $U/J \approx 5$ approximiert. Man erkennt aber auch, daß sich, wenn man nur die größeren Systeme mitberücksichtigt, die approximierte Position von σ_{max} für unendlich große Systeme zu deutlich kleineren Werten verschiebt. Nimmt man nur die größten drei Systeme mit, so hat man genauso vie-

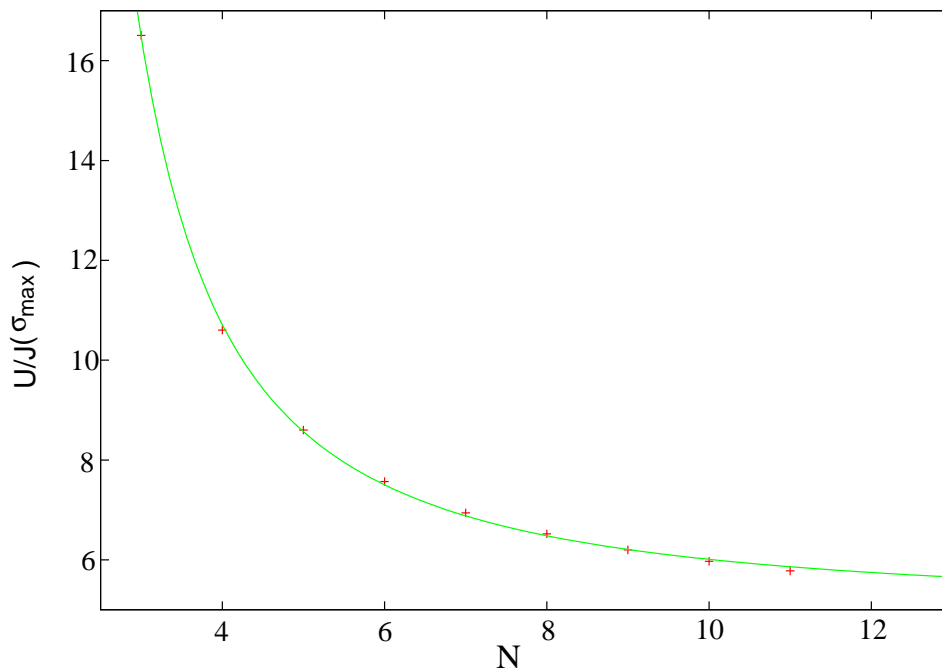
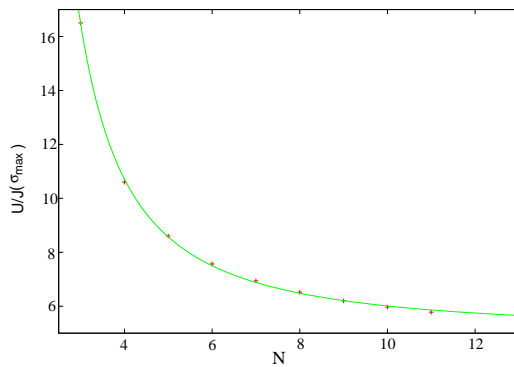
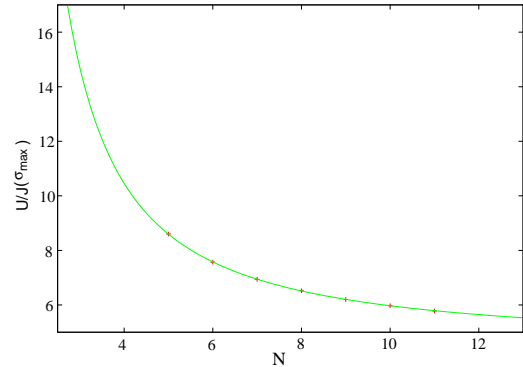


Abbildung 5.3: (+) Position des des Maximums von σ_0 in Abhängigkeit von der Systemgröße N . (—) angefittete Exponentialfunktion.

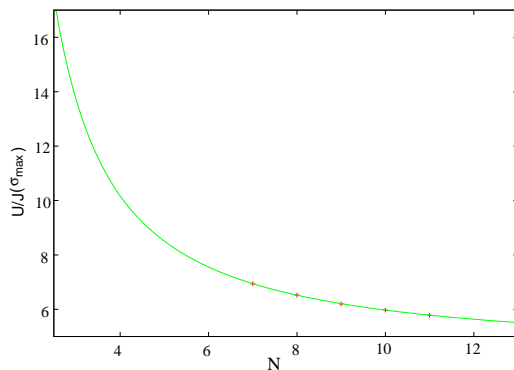
le Parameter wie Datenpunkte. Das bedeutet natürlich, daß die Parameter die nur durch die drei oder auch vier größten Systeme bestimmt wurden nicht sehr verlässlich sind. Trotzdem wird deutlich, daß sich die approximierte Position von σ_{max} für unendlich große Systeme zu niedrigeren Werten U/J verschoben wird, je größer die zugrundegelegten Systemen sind. Das Bosegas im optischen Gitter kann in zwei Phasen vorliegen, in der superfluiden Phase und der Mott-Isolator Phase. Der Phasenübergang tritt nach Berechnungen mit einem Monte-Carlo Verfahren für unendlich große Systeme bei $(U/J)_{trans} \equiv U/J \approx 4.65$ auf [21]. Mean Field Berechnungen ergeben für den Übergang wesentlich höhere Werte im Bereich von $(U/J)_{trans} \approx 7$ [3]. Der Wert für $(U/J)_{trans}$ ist für kleinere Systeme zu höheren Werten verschoben [6, 7], siehe Abbildung 5.12. Daher ist eine weitere Möglichkeit die Position des Phasenübergangs zu bestimmen, das Maximum von σ_{max} als Phasenübergang anzunehmen.



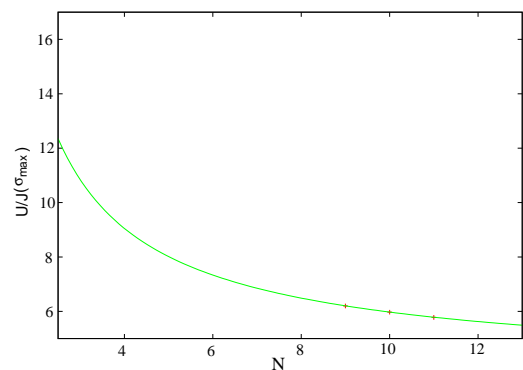
(a) Fit für 3 Teilchen auf 3 Gitterplätzen bis 11 Teilchen auf 11 Gitterplätzen



(b) Fit für 5 Teilchen auf 5 Gitterplätzen bis 11 Teilchen auf 11 Gitterplätzen



(c) Fit für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen bis 11 Teilchen auf 11 Gitterplätzen



(d) Fit für 9 Teilchen auf 9 Gitterplätzen bis 11 Teilchen auf 11 Gitterplätzen

Abbildung 5.4: Vergleich des Fits an das Maximum der Besetzungszahlfluktuation für verschieden viele Systemgrößen. (+) Position des Maximums von σ_0 in Abhängigkeit von der Systemgröße N . (—) angefittete Exponentialfunktion.

5.3 Maximaler Koeffizient

Der maximale Koeffizient C_{max} eines Grundzustandes des Bose-Hubbard Modells

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i | \{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_l}\}_i \rangle \quad (5.6)$$

ist definiert durch

$$C_{max} = \max(|C_i|). \quad (5.7)$$

Wenn $C_{max} = 1$ ist, bedeutet dies, daß der Grundzustand nur aus einem Fockzustand $| \{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_{q_l}\}_i \rangle$ besteht. Je kleiner C_{max} wird, desto mehr Fockzustände tragen zum Grundzustand bei. In Abbildung 5.5 ist der maximale Koeffizient C_{max} des Grundzustandes über der Wechselwirkungsstärke aufgetragen.

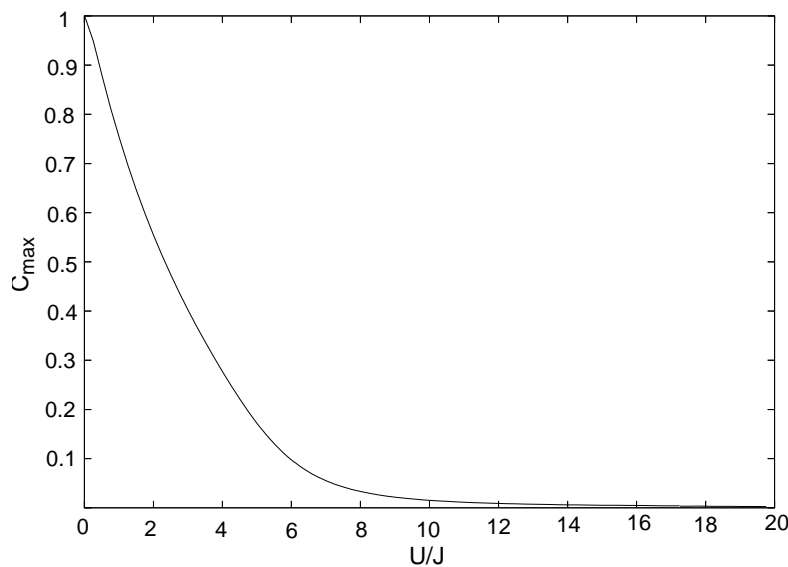


Abbildung 5.5: Maximaler Koeffizient C_{max} des Grundzustandes für ein System aus 10 Teilchen auf 10 Gitterplätzen, aufgetragen über der Wechselwirkungsstärke U/J .

5.4 Energie

Eine weitere Observable ist die Energie. Die Energieeigenwerte sind in Abbildung 5.6 für zwei verschiedene Wechselwirkungsstärken $U/J = 2$ und $U/J = 10$ für 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen aufgetragen.

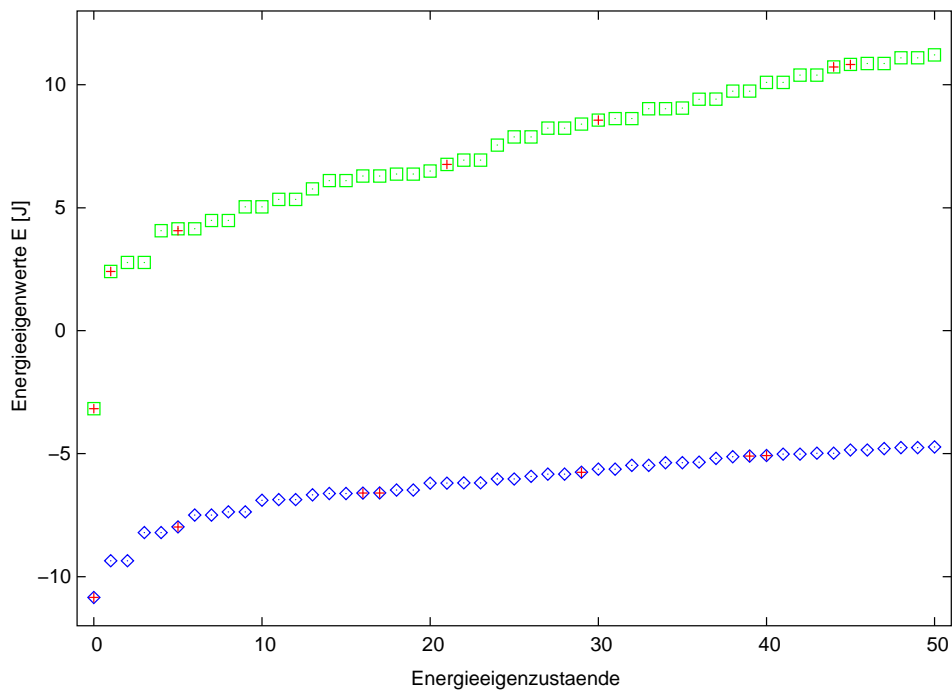


Abbildung 5.6: Die niedrigsten 50 Energieeigenwerte des Bose-Hubbard Hamiltonoperators aufgetragen über den Energieeigenzuständen für ein System aus 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen. \diamond : Wechselwirkungsstärke $U = 2J$, \square Wechselwirkungsstärke $U = 10J$. Die mit + gekennzeichneten Zustände sind die Energieeigenzustände des Hamiltonoperators, die auch mit der reduzierten Basis errechnet werden können.

Zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand des Bose-Hubbard Modells gibt es eine sogenannte Energielücke

$$E_{gap} = E_1 - E_0. \quad (5.8)$$

Beim Übergang von der superfluiden Phase in den Mott-Isolatorzustand wird die Lücke im Anregungsspektrum erheblich größer. Auch für höher angeregte Energiezustände ist die Vergrößerung der Energielücke ab einer bestimmten Wechselwirkungsstärke erkennbar (Abbildung 5.6).

Die Energielücke ist zwar gut geeignet, um eine Änderung im Verhalten des Systems bei steigender Wechselwirkungsstärke U/J beobachten zu können, für das Definieren eines scharfen Phasenübergangs ist sie jedoch ungeeignet. Die Energielücke existiert bereits bei kleinen Wechselwirkungen und tritt nicht sprunghaft ab einem bestimmten Verhältnis U/J auf. Man kann allerdings in Abb. 5.7 gut erken-

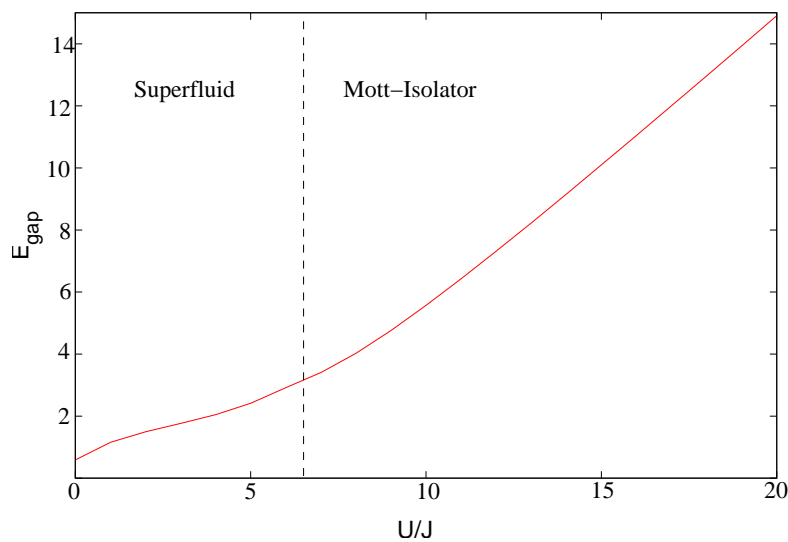


Abbildung 5.7: Lücke im Anregungsspektrum E_{gap} bei 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen in Abhängigkeit von U/J , (---) Phasenübergang.

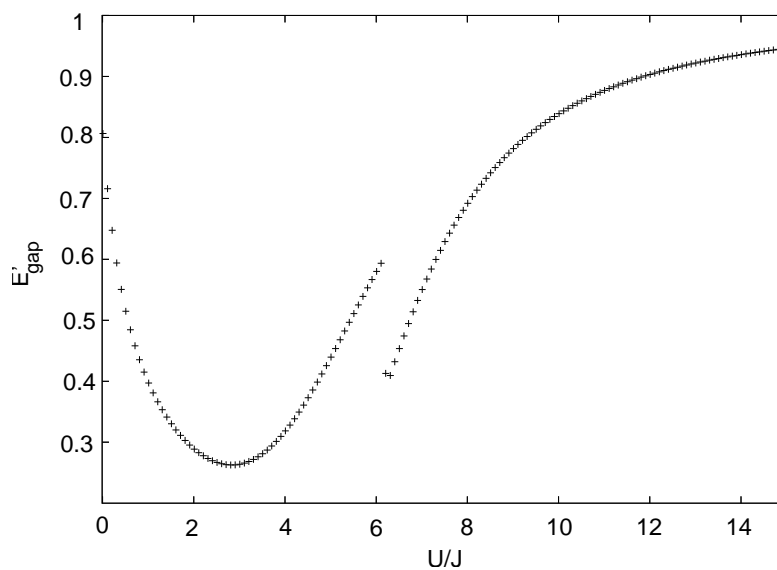


Abbildung 5.8: Ableitung der Energielücke, $(E_{gap})'$ für 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen in Abhängigkeit von U/J

nen, daß im Mottisolatorbereich die Energielücke wie das Verhältnis von U/J mit der Steigung eins wächst, während im superfluiden Regime das Wachstum deutlich schwächer ist. Daher liegt es nahe sich die Ableitung der Energielücke nach der Wechselwirkungsstärke U/J anzuschauen. Diese ist in Abbildung 5.8 für 8 Teilchen

auf 8 Gitterplätzen über der Wechselwirkungsstärke U/J aufgetragen. Man erkennt deutlich einen Sprung in der Ableitung bei $U/J \approx 6$. Um zu erklären woher dieser Sprung kommt, wurden in Abbildung 5.9 die zur Berechnung der Energielücke notwendigen Größen und deren Ableitungen über U/J aufgetragen. Man sieht, daß auch bei der Ableitung des Energieeigenwertes des ersten angeregten Zustandes dieser Sprung auftritt. Ein Sprung kommt auch bei den Ableitungen nach U/J von manchen höher angeregten Energien vor. Diese Berechnungen wurden zusätzlich mit einem anderem Diagonalisierungsprogramm überprüft um numerische Ursachen ausschließen zu können. In Abbildung 5.10 ist die Ableitung der Energielücke E_{gap} nach U/J für verschieden Teilchenzahlen N aufgetragen. Man erkennt, daß sich der Sprung in der Ableitung für größere N zu kleineren Wechselwirkungsstärken verschiebt. Dieser Zusammenhang wurde in Abbildung 5.11 aufgetragen. Analog zu dem Maximum der Besetzungszahlfluktuation, siehe Kapitel 5.2, wurde auch hier eine exponentielle Funktion an die Daten angepaßt. Die Sprünge in der Energielückenableitung liegen bei gleicher Teilchenzahl bei höheren U/J als bei dem Maximum der Besetzungszahlfluktuation. Mit der extrapolierten Exponentialfunktion ergibt sich für unendlich große Teilchenzahlen die Stelle des Sprungs in der Ableitung der Energielücke zu $U/J = 5.2$. Auch hierin liegt eine mögliche Definition des Phasenübergangs. Legt man hier die Exponentialfunktion nur an die größten Werte an, so erhält man größere Werte für die Stelle des Sprungs in der Ableitung. Für jeden weggelassenen Datenpunkt erhöht sich die extrapolierte Stelle des Sprungs der Ableitung um ungefähr $0.2 U/J$. Die Ableitung der Energielücke kann nur für relativ kleine Teilchenzahlen berechnet werden, da man zur Berechnung der Energielücke den ersten angeregten Zustand benötigt und dadurch die reduzierte Basis nicht verwendbar ist (vergleiche Kapitel 4). Hierdurch ergibt sich eine Unsicherheit.

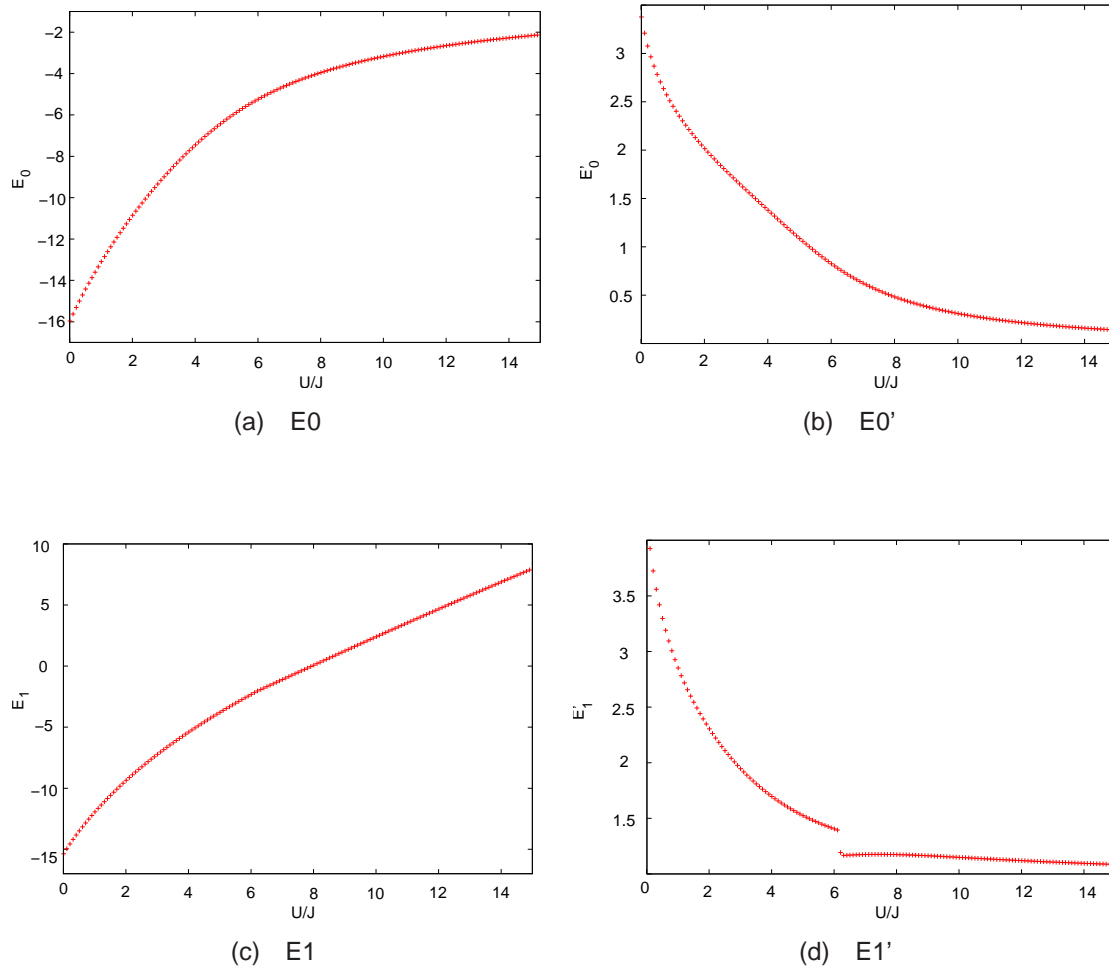


Abbildung 5.9: Die niedrigsten zwei Energieeigenwerte und deren Ableitungen aufgetragen über der Wechselwirkungsstärke U/J für 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen.

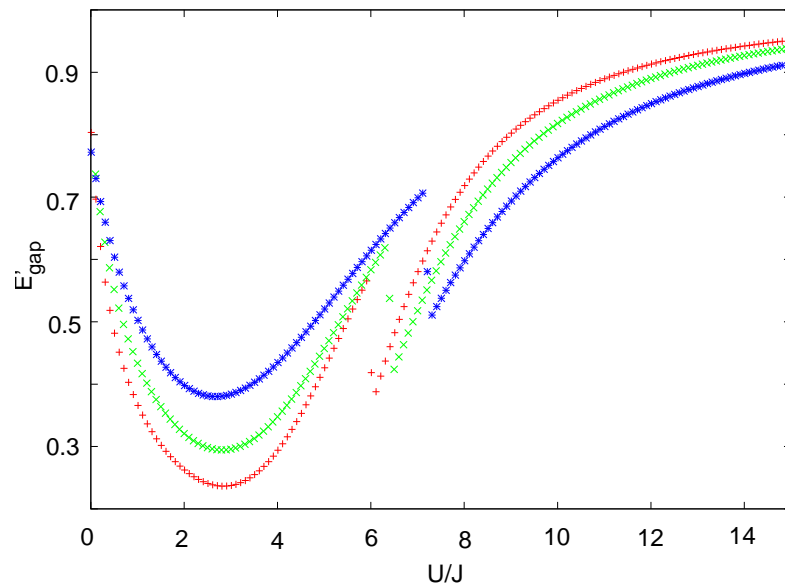


Abbildung 5.10: Ableitung von E_{gap} nach U/J für N Teilchen auf N Gitterplätzen in Abhängigkeit von U/J . $N = 5$: links oben, $N = 7$: Mitte, $N = 9$: links unten

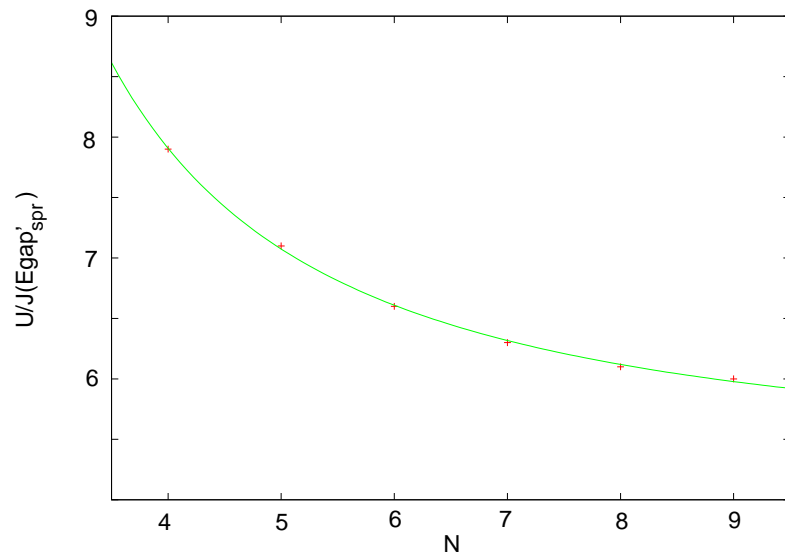


Abbildung 5.11: Position des Sprungs der Ableitung der Energielücke $U/J(E'_{gap_{spr}})$ für 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen in Abhängigkeit von U/J

5.5 Kondensatanteil

Nach Penrose und Onsager [22] befindet sich ein System im Bose-Einstein Kondensat, wenn die "Natural Orbitals" makroskopisch besetzt sind. Diese sind definiert, als

die Eigenvektoren der Einkörperdichtematrix ρ . Deren Besetzungszahlen sind also gerade durch die Eigenwerte λ der Einkörperdichtematrix gegeben. Die Matrixelemente von ρ berechnen sich durch

$$\rho_{ij} = \langle \psi | \hat{c}_{q_i}^\dagger \hat{c}_{q_j} | \psi \rangle \quad (5.9)$$

mit $| \psi \rangle$ als Eigenzuständen des Bose-Hubbard Hamiltonoperators und \hat{c}^\dagger und \hat{c}_{q_j} den Erzeugern und Vernichtern von Einteilchenblochzuständen (siehe Kapitel 2.3). Von einer makroskopischen Besetzung in einem System der Größenordnung von 10 Teilchen zu sprechen ist allerdings problematisch. Man kann aber trotzdem die Besetzungszahlen der Natural Orbitals berechnen, deren größter Wert λ_{max} identisch ist mit der Anzahl der, im Zustand $| \psi \rangle$ des Systems, kondensierten Teilchen. Der Kondensatanteil f_c ergibt sich dann direkt durch Division durch die Teilchenzahl:

$$f_c = \lambda_{max}/N. \quad (5.10)$$

Da die Dichtematrix immer eine Spur von N hat,

$$Tr(\rho^{(1)}) = N, \quad (5.11)$$

liegt der größte Eigenwert der Dichtematrix immer zwischen eins geteilt durch die Gitterlänge I und der Teilchenzahl geteilt durch die Gitterlänge

$$1/I \leq \lambda_{max} \leq N/I. \quad (5.12)$$

In Abbildung 5.12 sieht man, daß der Kondensatanteil bei Systemen mit genauso vielen Teilchen wie Gitterplätzen sich immer zwischen $1/N$ und 1 befindet und auch für große Wechselwirkungen nicht null wird. Mit Blochfunktionen als Basis ist diese Observable besonders einfach zu berechnen, da die Eigenfunktionen der Einkörperdichtematrix für Systeme mit periodischen Potentialen immer Blochfunktionen sind. Die Einkörperdichtematrix ist daher in dieser Basis immer diagonal und gibt die mittleren Besetzungszahlen der Quasiimpulse (Kapitel 5.1) an:

$$\rho_{ij} = \langle \psi | \hat{c}_{q_i}^\dagger \hat{c}_j | \psi \rangle = \delta_{ij} \bar{n}_{q_i}. \quad (5.13)$$

Der Kondensatanteil ist daher identisch mit der größten mittleren Besetzungszahl \bar{n}_{q_i} der Quasiimpulse dividiert durch die Teilchenzahl N . In der Wannierbasis ist die Einkörperdichtematrix $\rho_{ll'}^{wannier}$ nicht diagonal. Mit der Transformation (2.43) ist

$$\rho_{ll'}^{wannier} = \langle x | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} | x \rangle = \frac{1}{I} \sum_{j=1}^I n_{q_j} e^{iq_j(l-l')}. \quad (5.14)$$

Liegt kein Kondensat vor, so liegen die mittleren Besetzungszahlen \bar{n}_{q_j} der Quasiimpulse alle in derselben Größenordnung. Es folgt dann mit Gleichung (5.13):

$$\rho_{ll'}^{\text{wannier}} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad |l - l'| \rightarrow \infty. \quad (5.15)$$

Im Gegensatz dazu gilt im Bose-Einstein Kondensat:

$$\bar{n}_{q_0} = N\alpha, \quad (5.16)$$

wobei α einen Bruchteil der Teilchenzahl bezeichnet, der in der Größenordnung von N liegt. Für die Einkörperdichtematrix im Ortsraum gilt dann:

$$\rho_{ll'}^{(\text{wannier})} \rightarrow \frac{N\alpha}{l} \quad \text{für} \quad |l - l'| \rightarrow \infty. \quad (5.17)$$

Die Existenz eines Kondensates ist gekennzeichnet durch einen makroskopisch besetzten Natural Orbital, das heißt, daß die mittlere Besetzungszahl des niedrigsten Quasiimpulses in der Größenordnung der Gesamtteilchenzahl N liegt. Äquivalent dazu befindet sich das System im Kondensatzustand, wenn die Außerdiagonalen der Einkörperdichtematrix im Ortsraum nicht verschwinden [23].

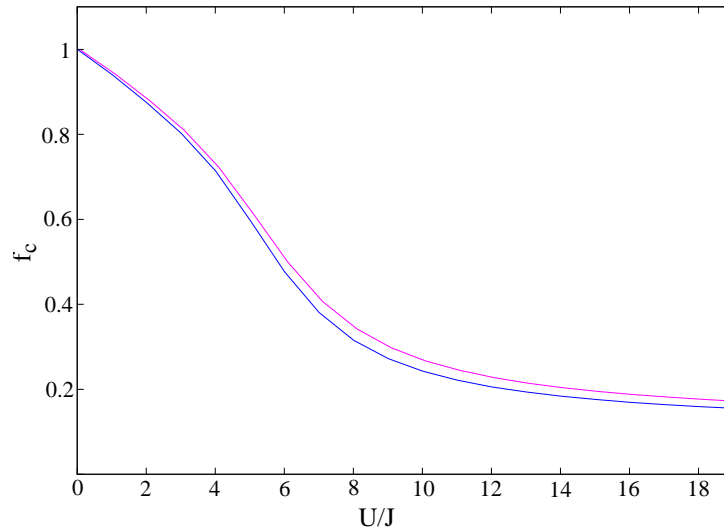


Abbildung 5.12: Kondensatanteil f_c eines Systems aus 9 Teilchen auf 9 Gitterplätzen (obere Kurve) und eines mit 10 Teilchen auf 10 Gitterplätzen (untere Kurve).

5.6 Interferenzmuster

Das Interferenzmuster ist eine besonders wichtige und interessante Observable, da sie direkt experimentell beobachtbar ist. In dem, durch die Laser erzeugten, opti-

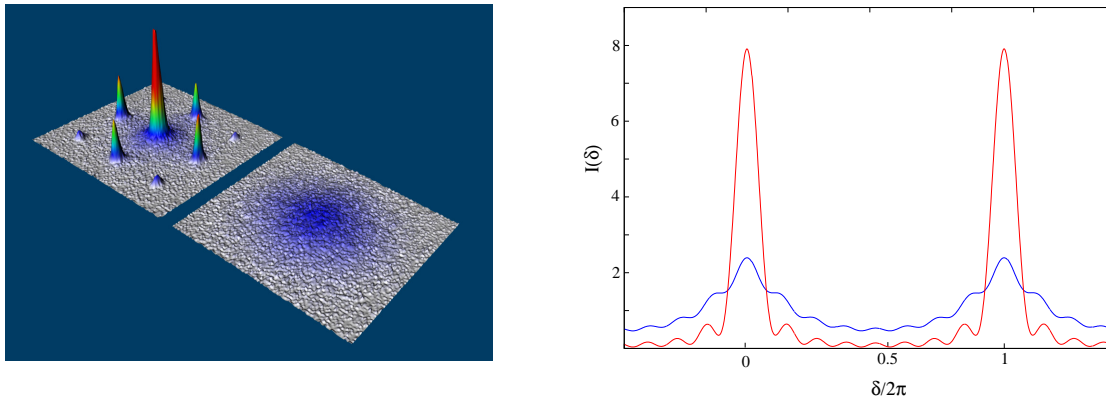


Abbildung 5.13: Links: Experimentelles Interferenzmusters von mehr als 100 000 besetzten Gitterplätzen eines 3D Gitters, aufgenommen mit der Methode des time-of-flight-imagings. Hinten: Superfluide Phase mit starker Phasenkorrelation zwischen den Gitterplätzen. Vorne: Mott-Isolator ohne Phasenkorrelation. Rechts: Errechnetes Inteferenzmuster für 9 Teilchen auf 9 Gitterplätzen bei einer Wechselwirkung von $U/J = 2$ (obere Kurve) und $U/J = 10$ (untere Kurve).

schen Gitter befinden sich die Bosonen, im Experiment im einfachsten Fall ^{87}Rb Atome. Da der Abstand zweier Gitterplätze gleich der halben Wellenlänge des Lasers ist, kann man die Materiewellen der Bosonen an zwei benachbarten Gitterplätzen nicht mit herkömmlichen Absorptionaufnahmen sichtbar machen. Deshalb wendet man die Methode des "time-of-flight imagings" an. Hierfür wird das Potential, also der Laser, plötzlich abgeschaltet, so daß die Quasiimpulse der Atome erhalten bleiben. Die Quasiimpulse werden dann auf Impulse freier Teilchen abgebildet. Während die Materiewellen sich frei ausbreiten, interferieren sie miteinander. Sie werden dann mit Licht bestrahlt, dessen Frequenz identisch mit der Anregungsfrequenz der Atome ist. Dort wo das Licht auf ein Atom trifft wird es absorbiert. In dem dadurch entstehenden Schattenbild ist die Impulsverteilung der Teilchen erkennbar (Abb. 5.13, links). Im superfluiden Regime beweisen die diskreten Peaks in der Impulsverteilung die Phasenkorrelation der Materiewellen über viele Gitterplätze hinweg. Im Mott-Isolator Bereich sind keinerlei Peaks in der Impulsverteilung mehr zu erkennen. Mathematisch kann die Intensitätsverteilung am Ort x geschrieben werden als

$$I(x) = \langle \psi | \hat{A}^\dagger(x) \hat{A}(x) | \psi \rangle . \quad (5.18)$$

Dabei ist der Amplitudenoperator $\hat{A}(x)$, in Abhängigkeit der Phasendifferenz $\xi_k(x)$ vom Gitterplatz k zum Ort x , definiert als

$$\hat{A}(x) = \frac{1}{\sqrt{I}} \sum_{k=1}^I e^{i\xi_k(x)} \hat{a}_k \quad . \quad (5.19)$$

In Abbildung 5.14 kann man erkennen, daß man bei großem Abstand vom Beob-

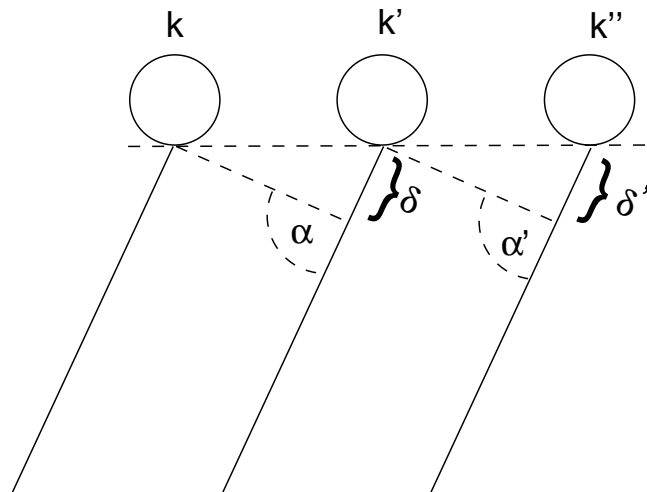


Abbildung 5.14: Ist der Abstand vom Potential zum Beobachter sehr groß, so kann man $\alpha = \alpha'$ setzen und damit $\delta = \delta'$. Das heißt der Phasenunterschied zwischen zwei benachbarten Gitterplätzen ist immer gleich groß, nämlich gerade δ .

achter zum optischen Gitter, die genaue Geometrie die zur Interferenz führt vernachlässigen kann. Der Winkel α geht bei sehr großem Abstand vom Beobachter zum optischen Gitter gegen den Winkel α' und damit geht δ gegen δ' . Die Phasenverschiebung der Materiewelle an zwei verschiedenen Gitterplätzen, hängt bei großem Abstand des Beobachtungspunktes zum Gitter also nur von dem Abstand zwischen den Gitterplätzen ab. Die Phasenverschiebung zwischen Gitterplatz k und Gitterplatz k' ist dann genausogroß wie die Phasenverschiebung zwischen Gitterplatz k' und k'' . Für benachbarte Gitterplätze kann man also im Rahmen dieser Näherung für die Phasenverschiebung einen konstanten Wert δ annehmen. Damit erhält man für die Intensitätsverteilung:

$$I(\delta) = \frac{1}{I} \sum_{k,k'} e^{i(k-k')\delta} \rho_{kk'}^{(\text{wannier})} \quad . \quad (5.20)$$

$I(\delta)$ entspricht für alle δ , die ganzzahlige Vielfache von $2\pi/I$ sind, gerade der Besetzungszahl der Quasiimpulse (vgl. Kapitel 5.1). Im Gegensatz dazu ist das Interfe-

renzmuster allerdings kontinuierlich in der Phasendifferenz δ . Um diese Kontinuität zu erreichen, wurde die Einkörperdichtematrix zunächst in die Wannierbasis transformiert und dann Gl. (5.20) angewandt.

Kapitel 6

Trunkierung der Blochbasis

Um den numerischen Aufwand gering zu halten, bietet es sich an, die Rechenbasis nur aus wenigen relevanten Zuständen aufzuspannen. Eine solche physikalisch motivierte Beschneidung der Basis, Trunkierung genannt, ermöglicht somit auch die Beschreibung größerer Gittersysteme. Diese Methode wurde zunächst für die Beschreibung des stark korrelierten Regimes in der Wannierbasis angewandt [4]. Das System wird hierbei mit einer kleineren Basis, die nur die Fockzustände mit den größten Koeffizienten enthält, beschrieben. Um diese zu erhalten, muß die Hamiltonmatrix erst diagonalisiert werden. Das möchte man aufgrund der langen Rechenzeit aber gerade vermeiden. Es wird daher eine Möglichkeit gesucht, ohne die Diagonalisierung der Hamiltonmatrix, auf die Koeffizienten der Fockzustände zu schließen. Daher wird für die Beschneidung das Matrixelement des Hamiltonoperators als Kriterium verwendet

$$\langle {}_{\alpha}\{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\} | \hat{H} | \{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_{\alpha} \rangle \equiv \langle \hat{H} \rangle_{\alpha}. \quad (6.1)$$

Dieses Diagonalmatrixelement stünde in einer Störungsrechnung für die Koeffizienten als Energie im Nenner (vergleiche auch Kapitel 5.4). Der zugehörige Koeffizient ist also dann groß, wenn das Matrixelement klein ist. Deshalb wird der Fockzustand $| \{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_{\alpha} \rangle$ der trunkierten Basis hinzugefügt, wenn der Wert des Matrixelements kleiner ist, als eine zuvor gewählte Trunkierungsenergie E_{trunk} :

$$\langle \hat{H} \rangle_{\alpha} \stackrel{!}{\leq} E_{trunk}. \quad (6.2)$$

Liegt der Wert des Matrixelements $\langle \hat{H} \rangle_{\alpha}$ über der gewählten Trunkierungsenergie E_{trunk} , so wird der Fockzustand $| \{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_{\alpha} \rangle$ verworfen. Ist die Trunkierungs-

energie größer als das größte Matrixelement, so ist der trunkierte Hilbertraum identisch mit dem vollen Hilbertraum.

Die Trunkierung ist besonders gut anwendbar, wenn der betrachtete Zustand von nur wenigen Fockzuständen dominiert wird, also nur wenige Fockzustände einen großen Koeffizienten besitzen. Dies ist mit einem großen maximalen Koeffizienten C_{max} verbunden. In der Wannierbasis, in der die Trunkierung bisher angewandt wurde, ist diese Voraussetzung für den Mott-Isolator Zustand gegeben. Je kleiner die Wechselwirkungsstärke ist, desto mehr Fockzustände tragen in der Wannierbasis zum Gesamtzustand bei und umso größere Fehler liefert die Trunkierung. Um den superfluiden Zustand ebenfalls effektiv beschreiben zu können, wird im nächsten Abschnitt die Trunkierung in der Blochbasis eingeführt.

6.1 Trunkierung in der Blochbasis

Die Trunkierung in der Blochbasis wird nach demselben Prinzip wie in der Wannierbasis durchgeführt. Die Basiszustände $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_\alpha\rangle$ werden auch in der Blochbasis nach der Größe der zugehörigen Diagonaleinträge der Hamiltonmatrix sortiert. Wenn das Matrixelement $\langle \hat{H} \rangle_\alpha$ kleiner ist als eine vorher gewählte maximale Energie, wird der Zustand $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_\alpha\rangle$ in die trunkierte Basis aufgenommen. Entsprechend sollten nur wenige Fockzustände $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_\alpha\rangle$ mit großen Koeffizienten zum untersuchten Zustand beitragen. Voraussetzung dafür, daß das Kriterium aus Gleichung (6.2) eine gute Möglichkeit ist, nur die Fockzustände mit großen Koeffizienten in die trunkierte Basis aufzunehmen, ist ein eindeutiger Zusammenhang zwischen dem Matrixelement und dem Koeffizienten C_α . Es wird daher zunächst der Bereich der Wechselwirkungsstärke U/J bestimmt, in dem das System in der Blochbasis von wenigen Fockzuständen dominiert wird. Das Matrixelement $\langle \hat{H} \rangle_\alpha$ des Hamiltonoperators im Fockzustand $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_\alpha\rangle$ wird dann in der Blochbasis berechnet und versucht ein eindeutiger Zusammenhang mit dem zugehörigen Koeffizienten C_α herzustellen. Anschließend werden einige Observablen mit verschiedenen stark trunkierten Basen berechnet und mit den exakt berechneten Observablen verglichen.

In der Wannierbasis setzt sich im superfluiden Bereich der Zustand des Systems aus sehr vielen gleichgewichteten Basiszuständen zusammen. Da man aber als Voraussetzung für eine erfolgreiche Trunkierung die Dominanz einiger weniger Ba-

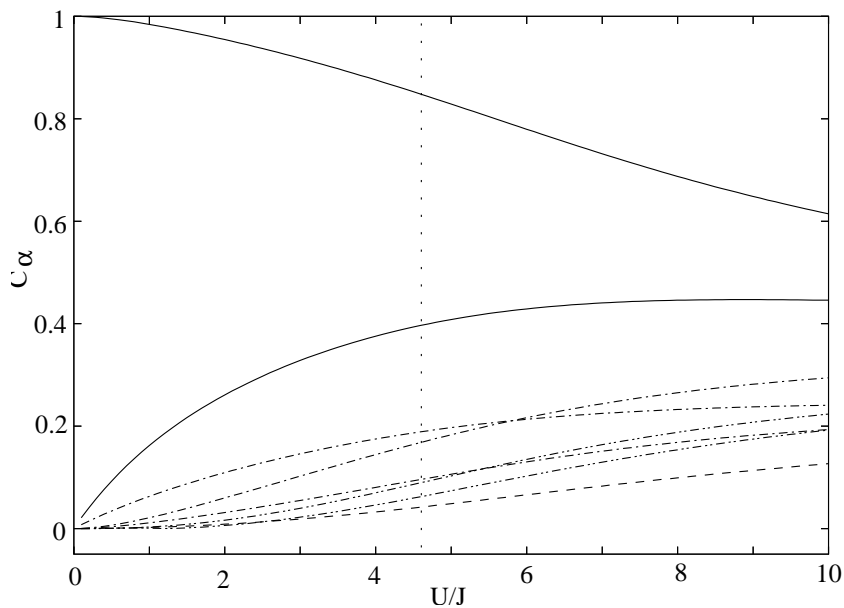


Abbildung 6.1: Die Koeffizienten der Basiszustände der reduzierten Basis in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . $I = N = 4$ Die Position des, mit einem Monte-Carlo Verfahren berechneten, Phasenübergangs vom Superfluid zum Mott-Isolator [21] ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

siszustände braucht, ist die Trunkierung in der Wannierbasis für den superfluiden Bereich nicht geeignet und sie muß in der Blochbasis durchgeführt werden.

In Kapitel 5.3 und 5.5 sieht man anhand des maximalen Koeffizienten C_{max} und des Kondensatanteils f_c , daß im superfluiden Bereich der Grundzustand des Systems in der Blochbasis von einem einzigen Fockzustand dominiert wird. Der Beitrag der anderen Basiszustände muß aber noch untersucht werden. In Abbildung 6.1 und 6.2 sind deshalb die Beträge aller Koeffizienten der Basiszustände in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke U/J für ein System mit 4 Teilchen auf 4 Gitterplätzen und ein System aus 5 Teilchen auf 5 Gitterplätzen aufgetragen. Die Systemgröße ist hierbei so klein gewählt, weil die Dimension der Basis fakultativ mit der Teilchenzahl anwächst und bei größeren Systemen eine entsprechende graphische Darstellung unübersichtlich wäre. Es wird deutlich, daß der Grundzustand des Systems, bis weit in den Mott-Isolator Bereich hinein von einem einzigen Basiszustand dominiert wird. Normalerweise bestimmt man aus Effizienzgründen die trunkierte Basis bei einer festen Wechselwirkungsstärke U/J und berechnet damit die Observablen für einen großen Wechselwirkungsbereich. Da man in den Abbildungen 6.1 und 6.2 erkennt,

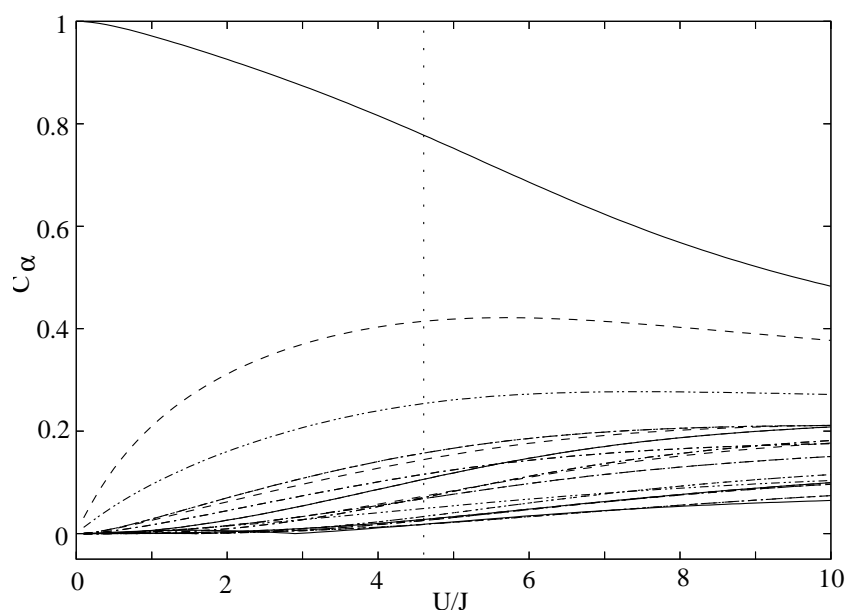


Abbildung 6.2: Die Koeffizienten der Basiszustände der reduzierten Basis in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . $I = N = 5$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

daß einige Koeffizienten einander in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J schneiden, bedeutet dies, daß es möglich ist, daß für einen Teil dieses Wechselwirkungsbereiches verworfene Fockzustände einen großen Beitrag zum Grundzustand leisten. Für eine Trunkierung, die die Ergebnisse im superfluiden reproduzieren soll, muß also auch das Trunkierungskriterium im superfluiden Bereich, das heißt für $U/J \lesssim 4.6$, angewandt werden.

Wie bereits erwähnt, muß der Zusammenhang zwischen dem Matrixelement des Hamiltonoperators und dem Koeffizienten des zugehörigen Fockzustandes möglichst eindeutig sein, um mit dem Trunkierungskriterium (6.2) die Zustände mit einem großen Koeffizienten auszuwählen. Um den Zusammenhang zwischen dem Matrixelement $\langle \hat{H} \rangle_\alpha$ und dem Koeffizienten darstellen zu können wird ein Maß χ_α definiert

$$\chi_\alpha \equiv \frac{\langle \hat{H} \rangle_\alpha - \text{Min}(\langle \hat{H} \rangle)}{\text{Max}(\langle \hat{H} \rangle) - \text{Min}(\langle \hat{H} \rangle)}, \quad (6.3)$$

so daß χ_α immer zwischen 0 und 1 liegt. Große χ_α bedeuten große Matrixelemente und kleine χ_α kleine Matrixelemente. In Abbildung 6.3 ist der Koeffizient C_α für 8 Teilchen auf 8 Gitterplätzen bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken über χ_α

aufgetragen. Für kleine Wechselwirkungsstärken sind viele Koeffizienten null, und tauchen deshalb in der Graphik nicht auf. Die Voraussetzungen für die Trunkierung sind besser, je eindeutiger von χ_α auf den Koeffizienten geschlossen werden kann. Für $U/J = 2$ und noch besser für $U/J = 4$ ist dies, in unserem Fall, am besten erfüllt. Für wachsende Matricelemente sollte χ_α monoton abnehmen. Die Trunkierung wird daher im Folgenden bei einer Wechselwirkungsstärke von $U/J = 4$, also knapp unterhalb des Phasenübergangs zum Mott-Isolator, durchgeführt.

Die nächste wichtige Frage ist, wieviele Basiszustände man in der trunkierten Basis braucht, um die exakten Ergebnisse in der gewünschten Genauigkeit zu reproduzieren. Hierzu wird die Trunkierungsstärke

$$T = \frac{\text{Dimension der trunkierten Basis}}{\text{Dimension der reduzierten Basis}} \quad (6.4)$$

bezogen auf die reduzierte Basis (siehe Kapitel 4) definiert. Zum Vergleich werden Observablen mit verschiedenen stark trunkierten Basen berechnet und mit dem exakten Ergebnis verglichen. In den folgenden Abbildungen werden die Observablen (siehe Kapitel 5) Energie (Abbildung 6.4), maximaler Koeffizient (Abbildung 6.5), Kondensatanteil (Abbildung 6.6) und Besetzungszahlfluktuation (Abbildung 6.7) für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen aufgetragen. Deutlich ist zu erkennen, daß alle hier betrachteten Observablen, die mit den trunkierten Basen erzeugt wurden, für sehr kleine Wechselwirkungsstärken U/J gut mit den exakten Ergebnissen übereinstimmen. Für wachsende Wechselwirkungsstärken weichen die Ergebnisse immer stärker von dem exakten Ergebnis ab. Dies geschieht umso früher, je stärker die Basis trunkiert wurde. Für eine Basis die 70% der Basiszustände der exakten reduzierten Basis (siehe Kapitel 4) enthält, werden die Ergebnisse bis zu einer Wechselwirkungsstärke von $U/J \approx 5$ gut reproduziert. Für eine Basis mit 10% der Basiszustände der exakten reduzierten Basis trifft dies nur noch bis zu einer Wechselwirkungsstärke von $U/J \approx 2$ zu. Bei der Berechnung der Observablen in den Abbildungen 6.4 bis 6.7 wurde das Trunkierungskriterium (Gleichung (6.2)) bei einer Wechselwirkungsstärke von $U/J = 4$ angewandt, um dann mit der trunkierten Basis Observablen für einen breiten Bereich der Wechselwirkungsstärke auszurechnen. Wie in den Abbildungen 6.1 und 6.2 zu sehen ist, sind einige Koeffizienten bei anderen Wechselwirkungsstärke größer als bei $U/J = 4$. Es kann also passieren, daß Fockzustände einen großen Koeffizienten bei der Wechselwirkungsstärke haben bei der das Trunkierungskriterium angewandt wird, nicht aber in dem gesamten Spektrum der Wechselwirkung für die die Observable erzeugt wird. Es können Fehler auftreten, die daher rühren, daß die Koeffizienten in Abhängigkeit der Wech-

Kapitel 6 · Trunkierung der Blochbasis

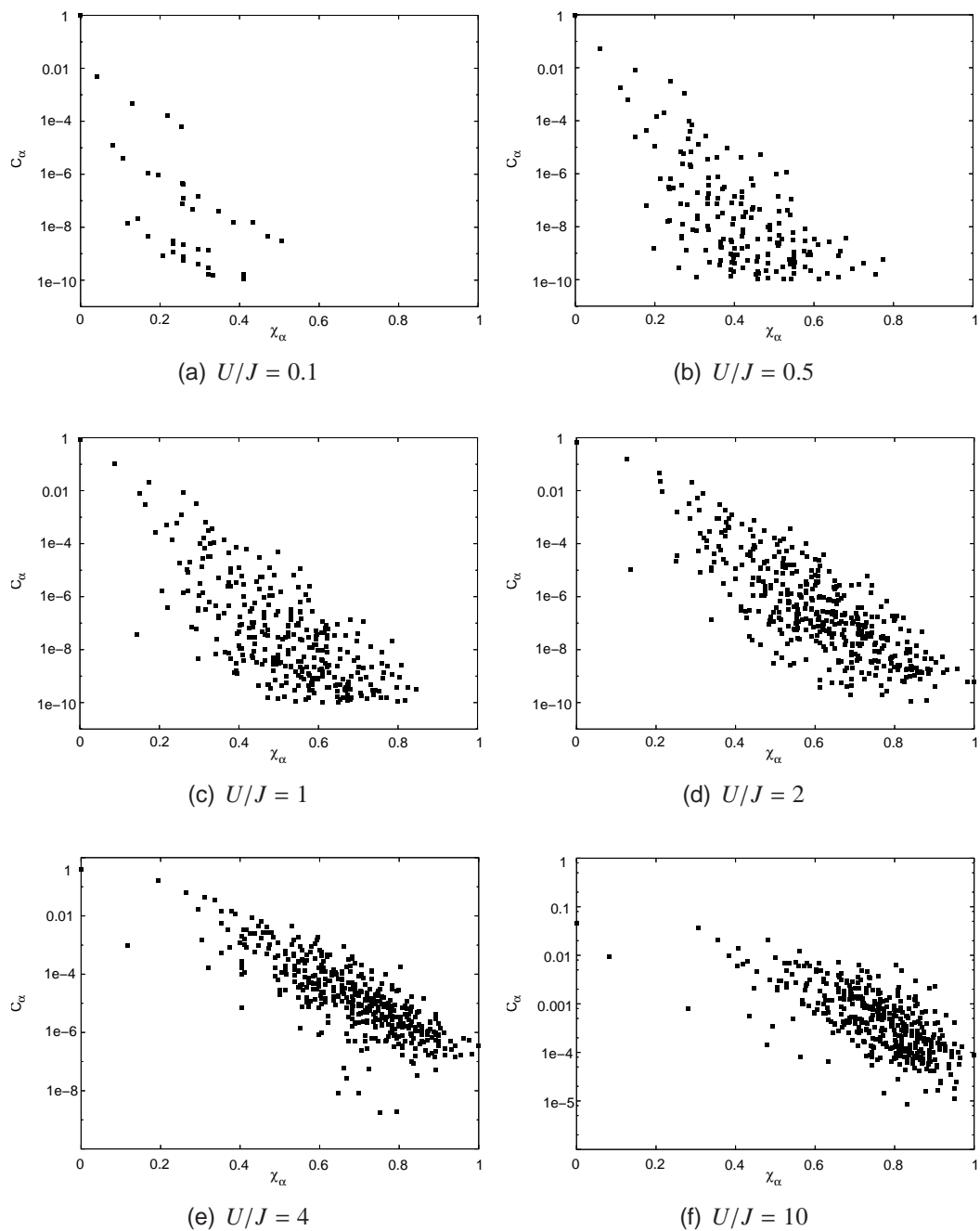


Abbildung 6.3: Logarithmische Darstellung des Koeffizienten C_α in Abhängigkeit von χ_α bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken U/J .

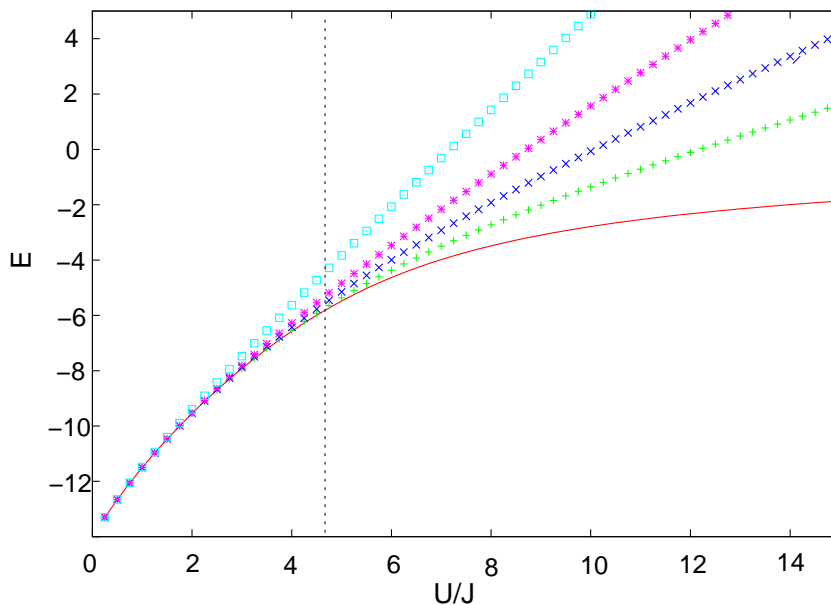


Abbildung 6.4: Die Energie E des Grundzustandes für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J für verschiedene Trunkierungsstärken: — $T = 100\%$, + $T = 70\%$, × $T = 50\%$, * $T = 30\%$, □ $T = 10\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

selwirkungsstärke einander schneiden oder ihre Größe ändern. Um diesen Fehler abzuschätzen, wird die Basis dynamisch trunkiert. Das heißt, für jede Wechselwirkungsstärke wird das Trunkierungskriterium neu ausgewertet und damit eine trunkierte Basis erzeugt. Dann werden Observablen für beide Formen der Trunkierung berechnet und verglichen. Die dynamische Trunkierung hat einerseits den Vorteil, daß die Fockzustände $|\{n_{q_1}, \dots, n_{q_l}\}_\alpha\rangle$ die ausgewählt werden, für diese Wechselwirkungsstärke auch tatsächlich ein kleines Diagonalmatrixelement $\langle \hat{H}_\alpha \rangle$ haben und andererseits kann man für sehr kleine Wechselwirkungsstärken eine wesentlich kleinere Basis verwenden. Die bisherige Form der Trunkierung wird im Folgenden auch als statische Trunkierung bezeichnet. Für die dynamische Trunkierung wurde der maximale Koeffizienten C_{max} und der Kondensatanteil f_c in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke U/J für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen berechnet. Die Ergebnisse sind, zusammen mit den Ergebnissen der statischen Trunkierung und der exakten Rechnung in Abbildung 6.8 und 6.9 dargestellt. Die statische Trunkierung hat dabei, genauso wie die dynamische Trunkierung, eine Trunkierungsstärke von $T = 0.5$. Die Basis der dynamischen Trunkierung enthält allerdings nicht für alle Wechselwirkungsstärken dieselben Basiszustände. Man sieht, daß für $U/J < 4.6$,

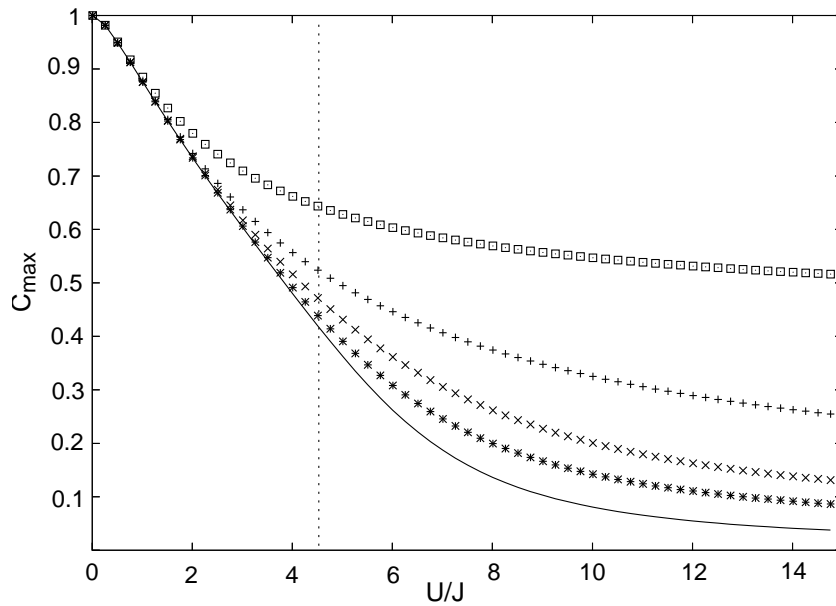


Abbildung 6.5: Der Maximale Koeffizient C_{max} für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J , für verschiedene Trunkierungsstärken: — $T = 100\%$, * $T = 70\%$, × $T = 50\%$, + $T = 30\%$, □ $T = 10\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

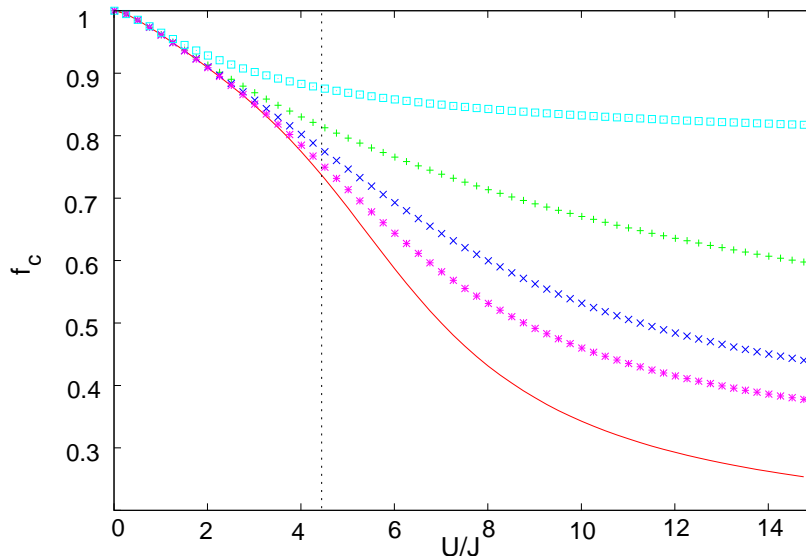


Abbildung 6.6: Der Kondensatanteil f_c für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J , für verschiedene Trunkierungsstärken: — $T = 100\%$, * $T = 70\%$, × $T = 50\%$, + $T = 30\%$, □ $T = 10\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

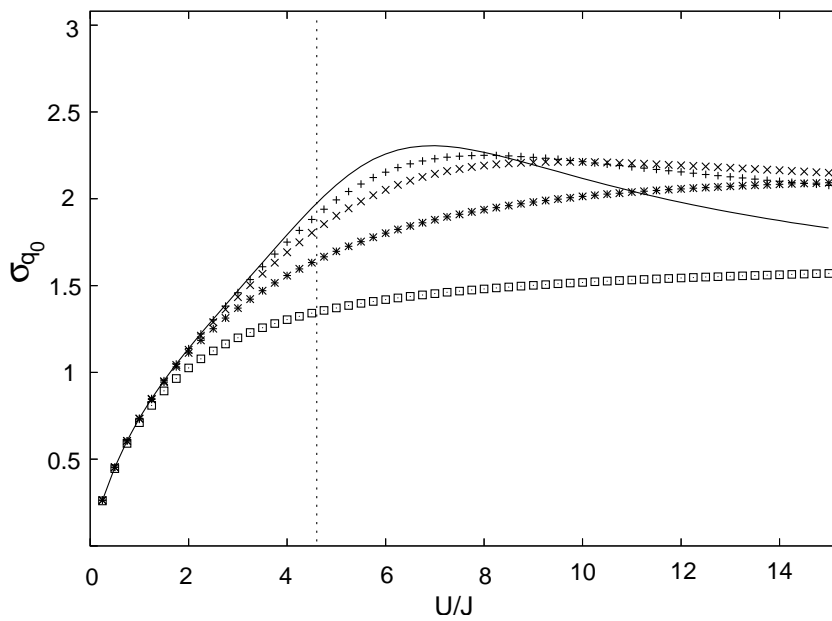


Abbildung 6.7: Die Fluktuation der mittleren Besetzungszahl des nullten Quasiimpulses σ_{q_0} für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J , für verschiedene Trunkierungsstärken: — $T = 100\%$, + $T = 70\%$, × $T = 50\%$, * $T = 30\%$, □ $T = 10\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

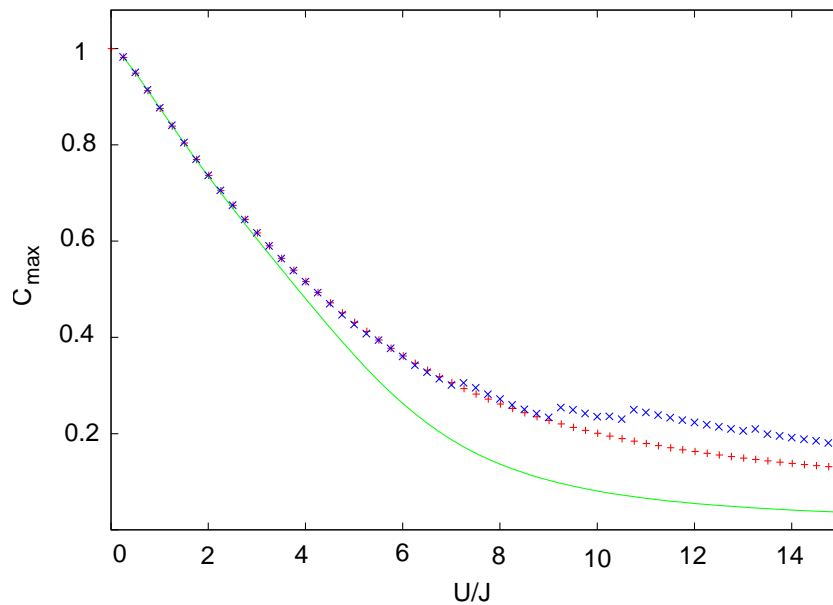


Abbildung 6.8: Vergleich der statischen Trunkierung (+ $T = 50\%$) mit der dynamischen Trunkierung ($\times T = 50\%$) am Beispiel des maximalen Koeffizienten C_{max} für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . Berechnung mit der vollen Basis: —.

also im superfluiden Regime, die dynamische Trunkierung minimal bessere Ergebnisse liefert als die statische. Dies gilt allerdings nicht für den Mott-Isolator Bereich. Dort weicht, entgegen den Erwartungen, das Ergebnis der dynamischen Trunkierung stärker vom exakten Ergebnis ab, als das der statischen Trunkierung. Dies lässt sich durch die Verküpfung zwischen dem Matrixelement und dem Koeffizienten für große U/J erklären. Man erkennt in Abbildung 6.3(f), daß der Koeffizient dem χ_α Matrixelement $\langle \hat{H}_\alpha \rangle$ nicht eindeutig zuordenbar ist. Für große Wechselwirkungsstärken liefern viele Basiszustände einen großen Beitrag (siehe auch Abbildung 6.1 und 6.2). Daher kann es natürlich passieren, daß ein Basiszustand mit einem großen Koeffizienten und einem etwas größeren Matrixelement der trunkierten Basis nicht hinzugefügt wird, während ein anderer Fockzustand mit einem möglicherweise kleineren Koeffizienten aufgrund seines etwas kleineren Matrixelementes in die trunkierte Basis aufgenommen wird. Für kleine Wechselwirkungsstärken passiert dies auch. Allerdings liefern hier nur sehr wenige Basiszustände einen großen Beitrag. Solange diese in der trunkierten Basis vorhanden sind, fällt es nicht ins Gewicht, wenn einige Basiszustände aufgrund ihres größeren Matrixelements nicht in die trunkierte Basis aufgenommen werden. Diese tragen, wie man in Abbildung 6.3 für

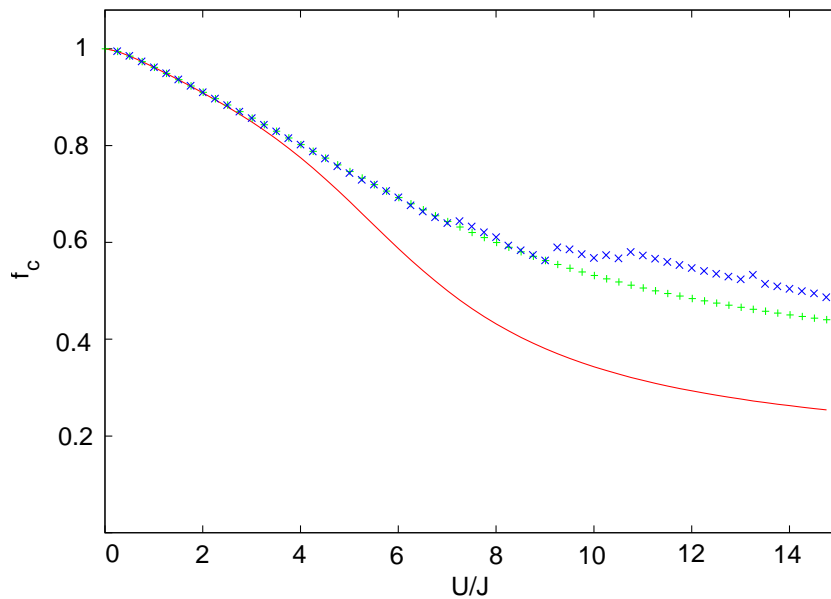


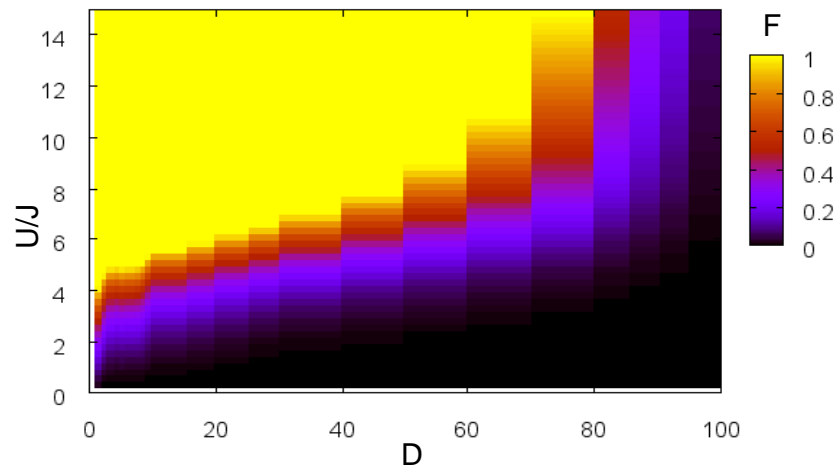
Abbildung 6.9: Vergleich der statischen Trunkierung (+ $T = 50\%$) mit der dynamischen Trunkierung ($\times T = 50\%$) am Beispiel des Kondensatanteils f_c für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . Berechnung mit der vollen Basis:——.

kleine U/J und in Abbildung 6.1 und 6.2 sehen kann, kaum zum Gesamtzustand bei. Für eine Störungsreihe bedeutet dies, daß die Störung im Mott-Isolatorbereich nicht mehr als klein gegenüber dem ungestörten Term annehmbar ist. Deshalb ist im Mott-Isolator Bereich das sehr einfache Argument der Trunkierung, nämlich der Abschätzung über den Energienenner in der Störungsreihe, nicht mehr anwendbar. Also ist das Diagonalmatrixelement nicht mehr geeignet um den Beitrag eines Fockzustandes zum Gesamtzustand abzuschätzen. Da man für die dynamische Trunkierung außerdem für jede untersuchte Wechselwirkungsstärke U/J den komplizierten Wechselwirkungsteil \hat{U} der Hamiltonmatrix neu erzeugen muß, ist dies zusätzlich auch noch sehr viel zeitaufwendiger als die statische Trunkierung. Die dynamische Trunkierung ist also nicht praktikabel.

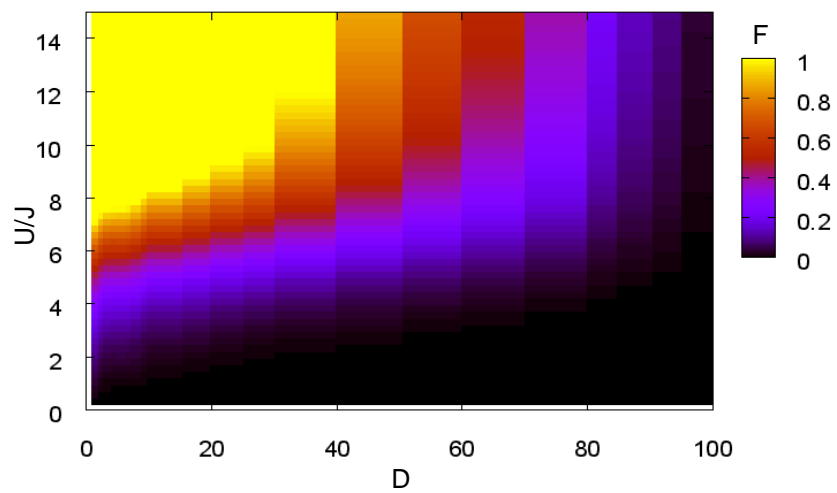
In Abbildung 6.10 ist der sich aus den Berechnungen mit der trunkierten Basis ergebende Fehler

$$F = \frac{|\text{Ergebnis der trunkierten Basis} - \text{Ergebnis der exakten Basis}|}{\text{Ergebnis der exakten Basis}} \quad (6.5)$$

für den maximalen Koeffizienten C_{max} und für den Kondensatanteil f_c für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen aufgetragen. Es wurde hierbei die Abhängigkeit des Fehlers von



(a) Maximaler Koeffizient, C_{max}



(b) Kondensatanteil, f_c

Abbildung 6.10: Farblich kodierter Fehler F für zwei Observablen, mit trunkierten Basen für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen berechnet, aufgetragen in Abhängigkeit von der Trunkierungsstärke T und der Wechselwirkungsstärke U/J .

der Wechselwirkungsstärke und von der Trunkierungsstärke untersucht. Der Fehler von C_{max} , beziehungsweise f_c vom exakten Wert ist farblich kodiert. Für stark trunkierte Basen weicht der Wert, wie zu erwarten war, schon für kleine Wechselwirkungsstärken stark vom exakten Wert ab, für schwächer trunkierte Basen erhält man bis weit über den Phasenübergang hinaus nur geringe Abweichungen vom exakten Ergebnis. Man sieht, daß selbst bei einer Basis, die nur 1% der Basiszustände der vollen Basis enthält, bis zu einer Wechselwirkung von $U/J = 2$ nur ein Fehler von $F \approx 0.1$ auftritt. Will man allerdings bis hin zum Phasenübergang bei $U/J \approx 4.6$ einen Fehler von $F \lesssim 0.1$ erreichen, so muß die trunkierte Basis mindestens 70% der Basiszustände der reduzierten Basis enthalten.

6.2 Kombination der Trunkierung in der Bloch- und der Wannierbasis

Kombiniert man die Trunkierung in der Blochbasis mit der Trunkierung in der Wannierbasis, kann man damit das gesamte Spektrum der Wechselwirkungsstärke U/J abdecken. Dazu muß man zunächst abschätzen, welche Trunkierungsstärke in der jeweiligen Basis geeignet ist. In der Blochbasis bezog sich bisher die Trunkierungsstärke auf die reduzierte Basis (siehe Kapitel 6.1). In der Wannierbasis gibt es keine reduzierte Basis und deswegen muß die Stärke der Trunkierung auf die volle Basis bezogen werden. Die reduzierte Basis ist aber ungefähr eine Größenordnung kleiner als die volle Basis. Daher muß man zusätzlich zu der Trunkierungsstärke T aus Gleichung (6.4) eine Trunkierungsstärke

$$\tilde{T} = \frac{\text{Dimension der trunkierten Basis}}{\text{Dimension der vollen Basis}}, \quad (6.6)$$

definieren, die sich auf die volle Basis bezieht. In Tabelle 6.1 ist dies am Beispiel von 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen gegenübergestellt. Für andere Systemgrößen ergeben sich ähnliche Zahlen.

In Abbildung 6.11 ist die Grundzustandsenergie und in Abbildung 6.12 der Kondensatanteil in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke U/J für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen aufgetragen. Die Observablen wurden einerseits mit der vollen Basis (durchgezogene Linie) und verschiedenen stark trunkierten Wannierbasen berechnet. Man sieht, sowohl für die Grundzustandsenergie als auch für den Kondensatanteil, daß der mit den trunkierten Basen berechnete Wert stärker von dem exakten

Anzahl Basiszustände	T (% der reduzierten Basis, 246 Basiszustände)	\tilde{T} (% der vollen Basis, 1716 Basiszustände)
246	100	14.3
172	70	10.0
123	50	7.2
74	30	4.3
25	10	1.4

Tabelle 6.1: Die Trunkierungsstärke T und die Trunkierungsstärke \tilde{T} für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen.

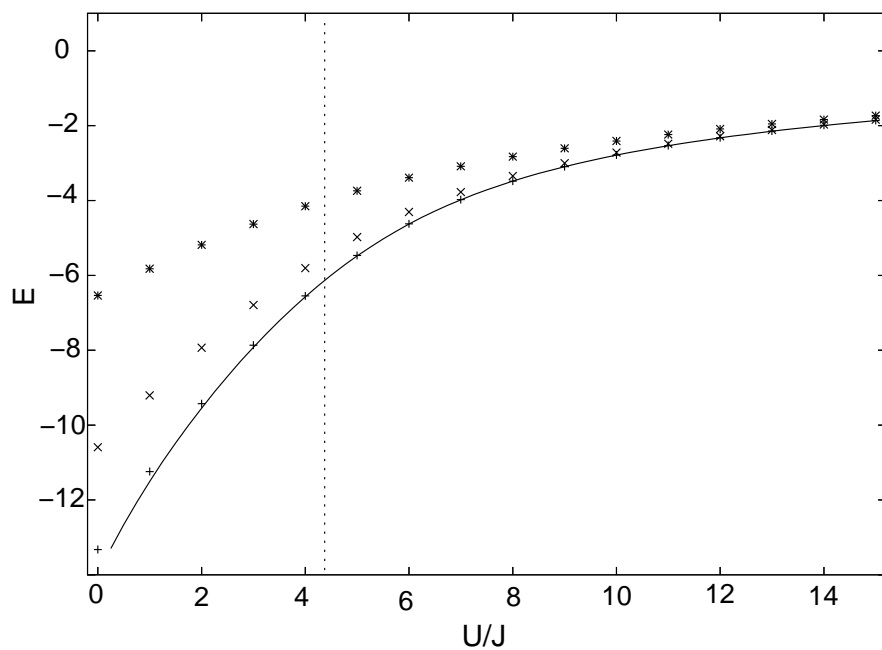


Abbildung 6.11: Die Grundzustandsenergie E für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J berechnet mit der trunkierten Wannierbasis: — $\tilde{T} = 100\%$, + $\tilde{T} = 50\%$, × $\tilde{T} = 15\%$, * $\tilde{T} = 2,5\%$. Die Position des Phasenübergangs vom Superfluid zum Mott-Isolator ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

6.2 · Kombination der Trunkierung in der Bloch- und der Wannierbasis

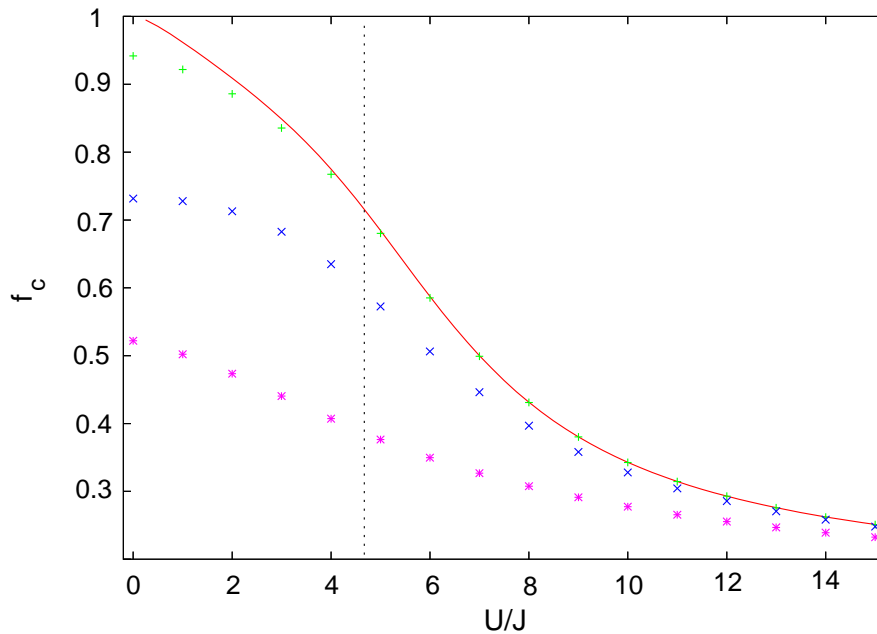


Abbildung 6.12: Der Kondensatanteil f_c für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J berechnet mit der trunkierten Wannierbasis: — $\tilde{T} = 100\%$, + $\tilde{T} = 50\%$, \times $\tilde{T} = 15\%$, * $\tilde{T} = 2,5\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt..

Ergebnis abweicht, je niedriger die Wechselwirkungsstärke U/J ist. Für die Grundzustandsenergie läßt sich mit der trunkierten Basis der Trunkierungsstärke $\tilde{T} = 50\%$ der gesamte Wechselwirkungsbereich mit nur einer geringfügigen Abweichung vom exakten Ergebnis darstellen. Diese Trunkierungsstärke liefert allerdings auch keine große Rechenzeitersparnis. Da die Werte die mit der Trunkierungsstärke $\tilde{T} = 15\%$ berechnet wurden bei großen U/J bis hin zum Phasenübergang (angedeutet durch die gestrichelte Linie) keinen großen Fehler F zeigt, sind diese für die Berechnung der Energie vorzuziehen.

Für den Kondensatanteil muß die Basis etwas größer sein, um ähnlich kleine Fehler zu erhalten wie für die Grundzustandsenergie. Auch hier ist der Fehler der sich mit der Basis der Trunkierungsstärke $\tilde{T} = 50\%$ ergibt, fast über den gesamten Wechselwirkungsbereich hinweg klein. Für $\tilde{T} = 15\%$ weicht der Wert der Observablen am Phasenübergang schon stark vom exakten Wert ab. Trotzdem wird wegen dem wesentlich geringeren Rechenaufwand für kleinere Basen hier ebenfalls eine stärkere Trunkierungsstärke von $\tilde{T} \approx 15\%$ gewählt. Bei gleicher Trunkierungsstärke \tilde{T} werden in der Blochbasis, wie in Tabelle 6.1 zu erkennen ist, die Observablen exakt

reproduziert, nämlich mit der reduzierten Basis. Wie in Abbildung 6.10 zu erken-

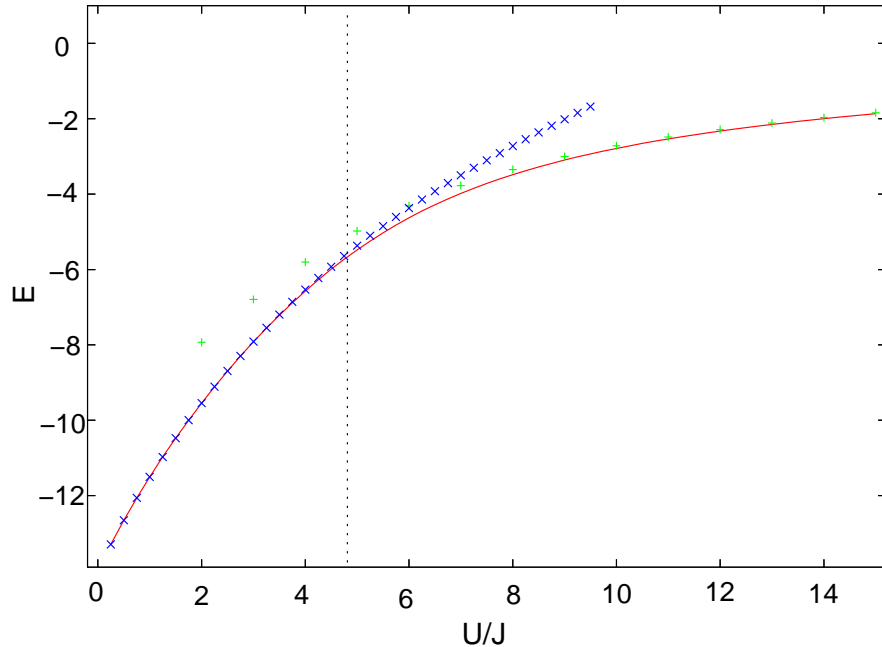


Abbildung 6.13: Die Grundzustandsenergie E für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . — volle Basis, \times trunkierte Wannierbasis mit $\tilde{T} \approx 15\%$, $+$ trunkierte Blochbasis mit $T \approx 30\%$ beziehungsweise $\tilde{T} \approx 4,3\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

nen ist und in Kapitel 6.1 bereits erwähnt wurde, braucht man in der Blochbasis mindestens 60 – 70% der reduzierten Basis, um das Ergebnis mit zehnpromtgeniger Genauigkeit bis zum Phasenübergang bei $U/J \approx 4.6$ zu reproduzieren. Dies entspricht, wie man Tabelle 6.1 entnehmen kann, ungefähr 10% der vollen Basis. In Abbildung 6.13 ist die exakte Grundzustandsenergie und die mit der trunkierten Bloch- beziehungsweise Wannierbasis für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen berechnete aufgetragen. Die Trunkierungsstärke liegt hier für die Wannierbasis bei $\tilde{T} \approx 15\%$ und für die Blochbasis bei $\tilde{T} \approx 4\%$. Für die Grundzustandsenergie liefert diese Trunkierungsstärke gute Ergebnisse. In Abbildung 6.14 ist der exakte und der mit den trunkierten Basen berechnete Kondensatanteil aufgetragen. Die Trunkierungsstärke in der Blochbasis ist hier etwas geringer als bei der Grundzustandsenergie. Sie beträgt $\tilde{T} = 6\%$. Man erkennt, daß die Grundzustandsenergie bei gleicher Trunkierungsstärke exakter berechnet werden kann als der Kondensatanteil. An Abbildung 6.13 und 6.14 kann man erkennen, daß sich, mit Hilfe der aus beiden Basen zusammengesetzten Trunkierung, Observablen im gesamten Wechselwirkungsbe-

6.2 · Kombination der Trunkierung in der Bloch- und der Wannierbasis

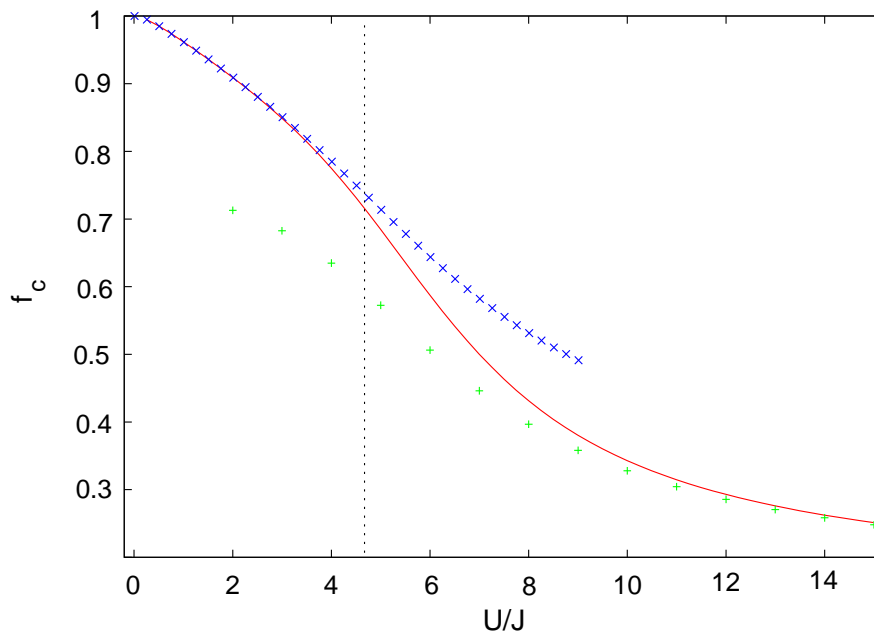


Abbildung 6.14: Der Kondensatanteil f_c für 7 Teilchen auf 7 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . — volle Basis, \times trunkierte Blochbasis mit $T \approx 40\%$ beziehungsweise $\tilde{T} \approx 6\%$, $+$ trunkierte Wannierbasis mit $\tilde{T} \approx 15\%$. Die Position des Phasenübergangs ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

reich recht genau darstellen lassen. Damit spart man deutlich an Rechenzeit und kann damit Observablen für größere Systeme, die einer exakten Rechnung nicht mehr zugänglich sind, berechnen. Dies wurde, wie in Abbildung 6.15 zu sehen ist, für die Grundzustandsenergie für 15 Teilchen auf 15 Gitterplätzen dargestellt. Da für diese Gittergröße die Trunkierungsstärke wesentlich größer sein muß, ist die Abweichung vom exakten Wert natürlich größer als in den Abbildungen 6.13 und 6.14. Ein exakter Vergleichswert, der mit der vollen Basis berechnet wurde, läßt sich hier natürlich nicht mit einer vertretbaren Rechenzeit erstellen. Man erkennt allerdings, daß sich die Kurven die mit der trunkierten Blochbasis und die mit der trunkierten Wannierbasis erzeugt wurden, wie erwartet, ungefähr am Phasenübergang schneiden. Eine Kurve für die Grundzustandsenergie läßt sich also für alle Wechselwirkungsstärken auf diese Art und Weise approximieren.

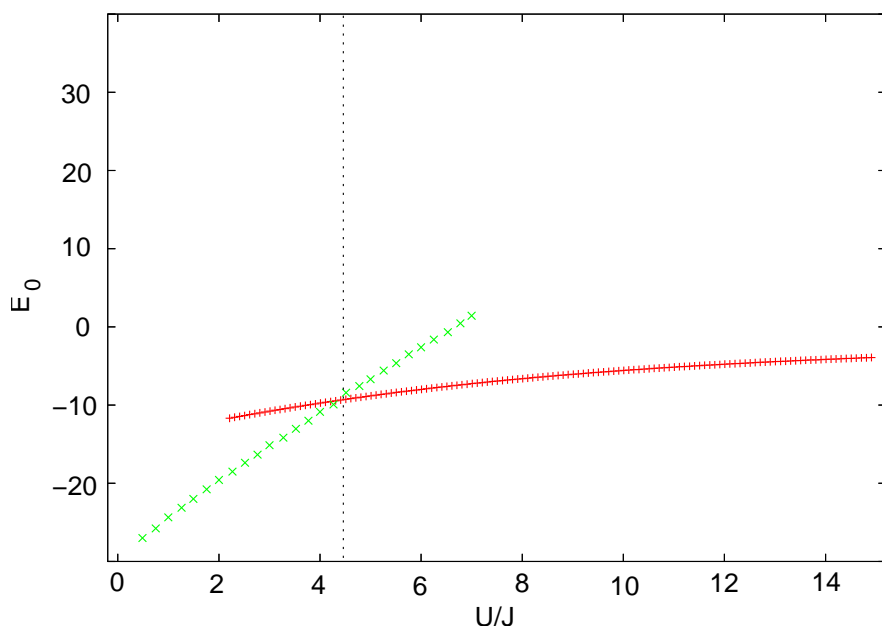


Abbildung 6.15: Die Grundzustandsenergie E_0 für 15 Teilchen auf 15 Gitterplätzen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U/J . \times trunkierte Blochbasis mit $\tilde{T} \approx 0.003\%$, $+$ trunkierte Wannierbasis mit $\tilde{T} \approx 0.01\%$. Die Position des Phasenübergangs vom Superfluid zum Mott-Isolator ist durch die gepunktete Linie dargestellt.

Kapitel 7

Ausblick

Ultrakalte Quantengase auf optischen Gittern bestehen im Experiment aus mindestens einigen hundert Teilchen. Das größte, zur Zeit theoretisch exakt diagonalisierbare, System besteht aus etwa 12 Teilchen. Eines der aktuellen Ziele in diesem Forschungsgebiet ist daher, die Systemgrößen einander anzugleichen. Für die Theorie bedeutet dies, größere Systeme beschreiben zu müssen. Hierzu gibt es verschiedene Möglichkeiten. Eine ist die, in Kapitel 6 erläuterte, Trunkierung der Basis. Bei diesem Verfahren muß die Basis, um wesentlich größere Systeme beschreiben zu können, sehr stark beschnitten werden. Die Ergebnisse weichen dann stark von denen mit der vollen Basis berechneten ab. Es müssen daher Methoden gefunden werden, bei denen die Basis auch für große Systeme klein bleibt und die Abweichungen vom exakten Wert nicht zu groß werden.

Möglichkeiten hierfür sind die numerische Renormierungsgruppe (NRG) [28, 29] und die Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) [30]. Dies sind iterative Verfahren, bei denen in jedem Schritt die Gitterlänge erhöht wird. Gleichzeitig wird in jedem Iterationsschritt die Basis so trunkiert, daß die Dimension des Hilbertraums erhalten bleibt. Hierzu wird bei der NRG die Basis auf eine Eigenbasis des Hamiltonoperators projiziert. Bei der DMRG wird das Gitter zunächst gespiegelt um realistischere Randbedingungen zu erhalten, dann wird auf eine Eigenbasis der Dichtematrix projiziert und schließlich wird die Spiegelung durch Spurbildung wieder herausgerechnet. Der Vorteil dieser Verfahren ist, daß der Rechenaufwand nicht mehr fakultativ sondern nur noch linear mit der Teilchenzahl wächst. Der Nachteil ist, daß durch die Trunkierung der Basis in jedem Iterationsschritt, die Lösung auch

Kapitel 7 · Ausblick

hier immer stärker von der exakten Lösung abweicht. Durch die Projektion auf die Eigenbasis des Hamiltonoperators ist diese Abweichung, insbesondere für größere Systeme, jedoch geringer als bei einer Trunkierung wie sie in Kapitel 6 vorgestellt wurde.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Hubbard,
Electron Correlations in Narrow Energy Bands
Proc. Roy. Soc. (London) A **276**, 238 (1963)

- [2] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, I. Bloch,
Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultra-cold atoms
Nature **415**, 39 (2002)

- [3] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, P. Zoller,
Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices
Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998)

- [4] F. Schmitt, M. Hild, R. Roth,
Bose-Fermi mixtures in 1D optical superlattices using full an truncated single-band bases
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **40**, 371 (2007)

- [5] F. Schmitt,
Correlations & Transport Properties of Ultracold Atomic Gases in Optical Lattices
Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt (2005)

- [6] R. Roth, K. Burnett,
Ultracold Bosonic Atoms in Disordered Optical Superlattices
arXiv:cond-mat/0205412v1 (2002)

- [7] R. Roth, K. Burnett,
Superfluidity and interference pattern of ultracold bosons in optical lattices
Phys. Rev. A **67**, 031602 (2003)

- [8] H. Kamerlingh Onnes,
The Superconductivity of Mercury
Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, 199, 120b, 122b, 124c (1911)
- [9] P. Kapitza, J. F. Allen, A. D. Misener,
Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point, Flow of Liquid Helium II
Nature **141**, 74 (1938)
- [10] A. Einstein,
Sitz. Ber. Preuß. Akad. Wiss. (Berlin) **22**, 261,(1924)
- [11] S. N. Bose,
Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese
Z. Phys. **26**, 178 (1924)
- [12] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wiemann, E. A. Cornell,
Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor
Science **269**, 198 (1995)
- [13] W. Ketterle,
Bose-Einstein Condensation
Phys. World, 29, (1997)
- [14] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, J. Dalibard,
Vortex lattices in a stirred Bose-Einstein condensate
cond-mat/0004037 (2000)
- [15] M. Greiner, C. A. Regal, D. S. Jin,
Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas
Nature **426**, 537 (2003)
- [16] F. Bloch,
Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern
Z. Physik **52**, 555 (1928)
- [17] F. Schwabl,
Quantenmechanik für Fortgeschrittene
2. Auflage, Springer (2000)
- [18] H. Haken,
Quantenfeldtheorie des Festkörpers
2. Auflage, Teubner (1973)

- [19] A. B. Balachandran, E. Ercolessi, G. Morandi, Srivastava,
Hubbard Modell and Anion Superconductivity: A Review
International Journal of Modern Physics B **4**, No.14 2057 (1990)
- [20] D. Jaksch, P. Zoller,
The cold atom Hubbard toolbox
Annals of Physics **315**, 52 (2005)
- [21] G. G. Batrouni, R. T. Scalettar,
World-line quantum Monte Carlo algorithm for a one-dimensional Bose model
Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992)
- [22] O. Penrose, L. Onsager,
Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium
Phys. Rev. **104**, 576 (1956)
- [23] C. N. Yang,
Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors
Rev. Mod. Phys. **4**, 34, 694 (1963)
- [24] M. Hild,
Quantum Dynamics & Excitations of Ultracold Atomic Gases in Optical Lattices
Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt (2005)
- [25] Cohen Tannoudji,
Quantenmechanik II
1. Auflage, de Gruyter (1997)
- [26] W. Nolting,
Grundkurs Theoretische Physik 7, Vielteilchentheorie
5. Auflage, Springer (2002)
- [27] R. Roth,
Skript zur Vorlesung: Theoretische Kernphysik, WS2006/07
Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt
- [28] K. G. Wilson,
Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture
Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971)

- [29] S. Binder,
The Numerical Renormalization Group applied to the Hubbard Model
Bachelor Thesis, Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt
(2007)
- [30] U. Schollwöck,
The density-matrix renormalization group
Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005)

Danksagung

Ich möchte mich bei einigen der Menschen bedanken, die zu Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben.

Zuerst, danke an Herrn Juniorprofesor **Robert Roth**, der mir die Möglichkeit zur Anfertigung dieser Arbeit gegeben hat. Danke, daß Sie immer Interesse an meiner Arbeit gezeigt haben und sich die Zeit genommen haben, alle meine Fragen zu beantworten.

Danke auch **Felix** und **Markus**, ihr habt mich vorbildlich, sowohl beim Einarbeiten in das Thema, wie auch später bei allen kleineren und größeren Problemen unterstützt.

Für die lockere und angenehme Arbeitsatmosphäre möchte ich mich auch bei allen anderen Mitarbeitern der Theorie des Instituts für Kernphysik bedanken.

Bei meinem Freund **Erik** möchte ich mich für das Korrekturlesen bedanken. Aber vor allem, danke für die inzwischen jahrelange seelische und moralische Unterstützung und nicht zuletzt dafür, daß Du es immer noch mit mir aushälst.

Dank geht auch an meinen Physik-LK Lehrer **Erwin Nungeßer**, ohne den ich möglicherweise nicht Physik studiert hätte.

Die wichtigste Voraussetzung für diese Arbeit ist aber meine Familie. Danke **Mama**, danke **Papa** und danke auch **Karla**, daß ihr immer zu mir haltet und mich immer unterstützt. Danke, daß ihr meine angeborene Neugierde soweit gefördert habt, daß ich überhaupt auf die Idee kam Physik zu studieren!

Danke!

Erklärung zur Diplomarbeit gemäß § 19 Abs. 6 DPO/AT

Hiermit versichere ich, die Diplomarbeit ohne Hilfe Dritter, nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Alle Stellen, die aus diesen Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht worden. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Darmstadt, den 14. Dezember 2007

Ilona Türschmann