

## Die Matrix-Darstellung des 1D Hubbard-Modells

(dieses Material ist nicht klausurrelevant)

Das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell mit  $L$  Gitterplätzen und  $N$  Teilchen wird spezifiziert durch einen Hamiltonoperator  $H$ , der auf einem endlichdimensionalem Vektorraum  $\mathcal{F}_{N,L}$  operiert. Für den Raum  $\mathcal{F}_{N,L}$  kann man eine Orthonormalbasis  $\mathcal{B}$  angeben, die wie folgt aussieht:

$$\mathcal{B} := \left\{ |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \mid n_1 + n_2 + \dots + n_L = N, n_j \in \{0, 1, \dots, N\} \right\} \quad (1)$$

Man kann sich überlegen, dass es genau

$$\dim \mathcal{F}_{N,L} = |\mathcal{B}| = \binom{N+L-1}{L-1} \quad (2)$$

Basisvektoren gibt. Die physikalische Bedeutung ist, dass, wenn sich das System in einem Zustand befindet, welcher durch den Basisvektor  $|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$  beschrieben wird, dann befinden sich  $n_1$  Teilchen am Gitterplatz 1,  $n_2$  Teilchen am Gitterplatz 2 usw. bis  $n_L$  Teilchen am Gitterplatz  $L$ , insgesamt haben wir also  $n_1 + \dots + n_L = N$  Teilchen. Der Hamiltonoperator  $H$  besteht aus einer kinetischen Energie  $H_0$  und einer Wechselwirkungsenergie  $H_{\text{int}}$ ,

$$H = \varepsilon H_0 + u H_{\text{int}} : \mathcal{F}_{N,L} \rightarrow \mathcal{F}_{N,L} \quad (3)$$

die wie folgt auf die Basisvektoren wirken:

$$H_0 |n_1, \dots, n_L\rangle = \sum_{j=1}^{L-1} \left\{ \sqrt{n_j+1} \sqrt{n_{j+1}} \times |n_1, \dots, n_j+1, n_{j+1}-1, \dots, n_L\rangle \right. \\ \left. + \sqrt{n_j} \sqrt{n_{j+1}+1} \times |n_1, \dots, n_j-1, n_{j+1}+1, \dots, n_L\rangle \right\} \quad (4)$$

$$H_{\text{int}} |n_1, \dots, n_L\rangle = \sum_{j=1}^L n_j(n_j-1) \times |n_1, \dots, n_L\rangle \quad (5)$$

Die Matrix-Darstellung von  $H$  ist dann gegeben durch die  $|\mathcal{B}| \times |\mathcal{B}|$  - Matrix

$$\left( \langle n_1, \dots, n_L | H | m_1, \dots, m_L \rangle \right) \in \mathbb{R}^{|\mathcal{B}| \times |\mathcal{B}|} \quad (6)$$

wobei, da wir ja eine Orthonormalbasis haben, die Rechenregel

$$\langle n_1, \dots, n_L | m_1, \dots, m_L \rangle = \delta_{n_1, m_1} \times \dots \times \delta_{n_L, m_L} \quad (7)$$

zu berücksichtigen ist. Durch die Gleichungen (4), (5) und (7) sind die Matrix-Elemente (6) eindeutig festgelegt. Auf der Hauptdiagonalen stehen also die Zahlen  $\sum_{j=1}^L n_j(n_j-1)$ , und

off-diagonal Elemente können nur dann ungleich 0 sein, wenn sie sich in maximal 2 Besetzungszahlen, die zu benachbarten Gitterplätzen gehören, um maximal  $\pm 1$  unterscheiden tun. Mit anderen Worten, die meisten off-diagonal Elemente sind 0 und man hat eine dünnbesetzte Matrix. Diese Matrix wollen wir jetzt in dem `week5.txt` anlegen.

Wir wollen dann auch noch ein bisschen was mit der Matrix machen, und zwar wollen wir zu einem gegebenen Anfangszustand (oder zu einem gegebenen Basisvektor)

$$|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \quad (8)$$

die folgende Grösse berechnen:

$$\begin{aligned} \langle a_\ell^\dagger a_\ell \rangle(t) &:= \sum_{|m\rangle \in \mathcal{B}} m_\ell \times |\langle m | e^{-itH} | n \rangle|^2 \\ &= \sum_{\substack{m_1, \dots, m_L=0 \\ m_1 + \dots + m_L = N}}^N m_\ell \times |\langle m_1, \dots, m_L | e^{-itH} | n_1, n_2, \dots, n_L \rangle|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

Diese Grösse gibt dann die Anzahl der Teilchen am Gitterplatz  $\ell$  zur Zeit  $t > 0$  an, wenn sich zur Zeit  $t = 0$  eine Anzahl von  $n_j$  Teilchen am Gitterplatz  $j$  befunden haben,  $j = 1, 2, \dots, L$ . Dabei ist  $e^{-itH}$  das Matrix-Exponential, definiert durch die Potenzreihenentwicklung der  $e$ -Funktion, und  $i = \sqrt{-1}$  ist die komplexe imaginäre Einheit.

Selbst für den Fall von nur  $L = 2$  Gitterplätzen, da würde man eigentlich meinen, dass da nicht allzuviel passieren kann, zeigt diese Funktion schon ein sehr komplexes Verhalten, wenn der Wechselwirkungsparameter  $u$  in dem Hamiltonoperator langsam von 0 auf grössere Werte ‘hochgedreht’ wird. In den folgenden Bildern ist  $L = 2$ , wir nehmen insgesamt  $N = 20$  Teilchen, der Anfangszustand sei

$$|n\rangle = |n_1, n_2\rangle := |20, 0\rangle \quad (10)$$

wir haben also 20 Atome auf Gitterplatz 1 und 0 Atome auf Gitterplatz 2 zum Zeitpunkt  $t = 0$ , und die Zeitachse ist jeweils  $t \in [0, 500]$ . Das  $\varepsilon$ , der Parameter vor der kinetischen Energie  $H_0$ , ist  $\varepsilon = 1$ , und für den Wechselwirkungsparameter  $u$  vor dem  $H_{\text{int}}$  schreiben wir

$$u = \frac{g}{N} = \frac{g}{20} \quad (11)$$

und wählen dann für  $g$  die folgenden Werte:

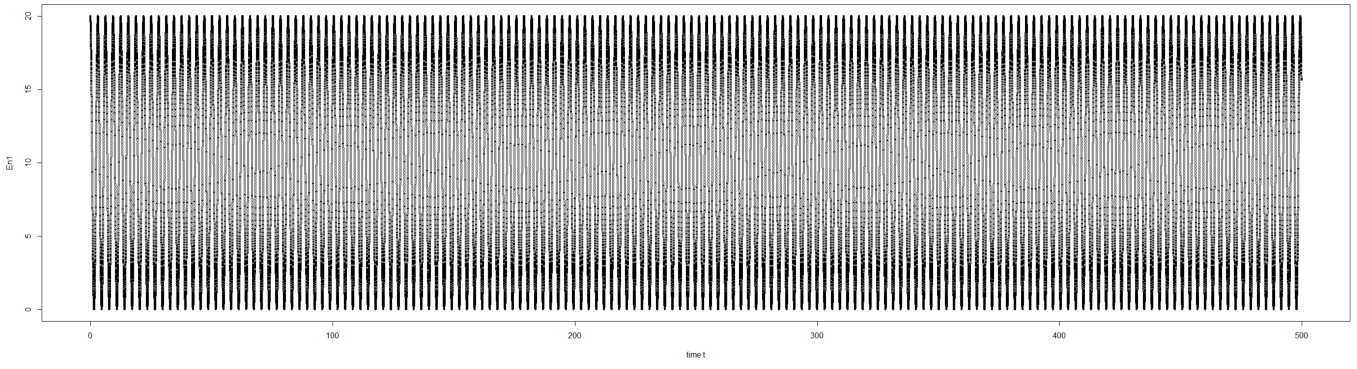
$$g \in \{ 0.00, 0.125, 0.25, 0.50, 0.75, 1.00, 1.50, 2.00, 3.00, 4.00, 5.00, 6.00, 10.00, 50.00 \} \quad (12)$$

Man bekommt dann die folgenden Bilder für die Anzahl der Atome auf Gitterplatz 1 zur Zeit  $t \in [0, 500]$ , das wäre hier dann also die Funktion

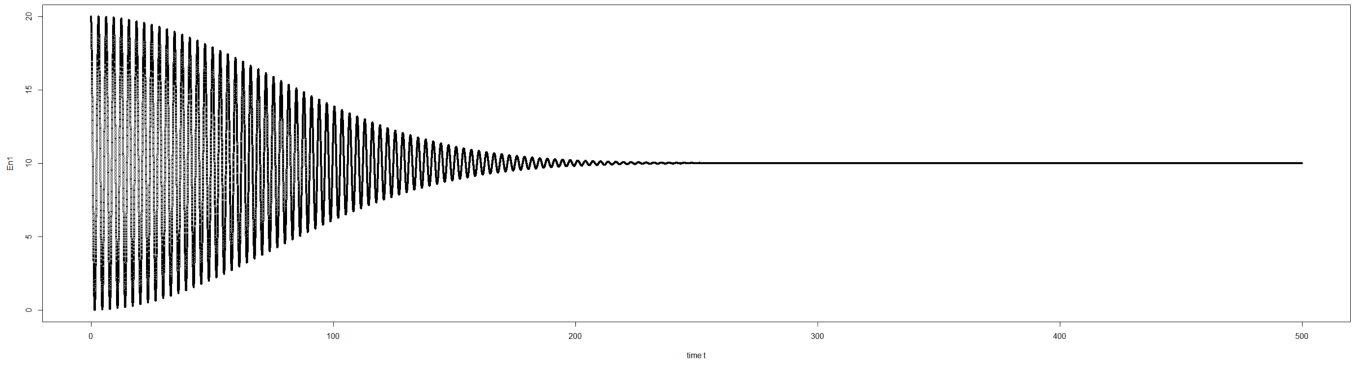
$$\langle a_1^\dagger a_1 \rangle(t) = \sum_{m_1=0}^N m_1 \times |\langle m_1, N - m_1 | e^{-itH} | N, 0 \rangle|^2 \quad (13)$$

mit  $N = 20$ :

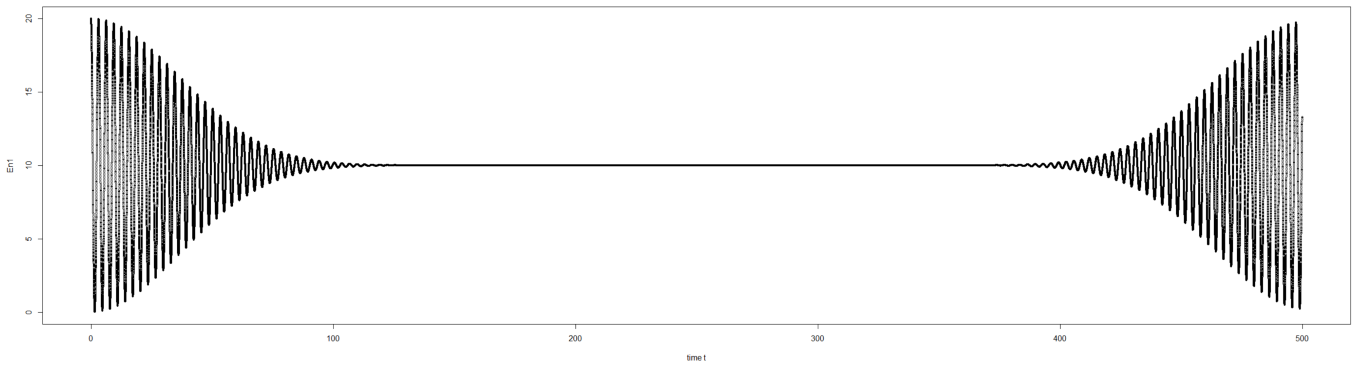
number of atoms at site 1,  $g = 0$



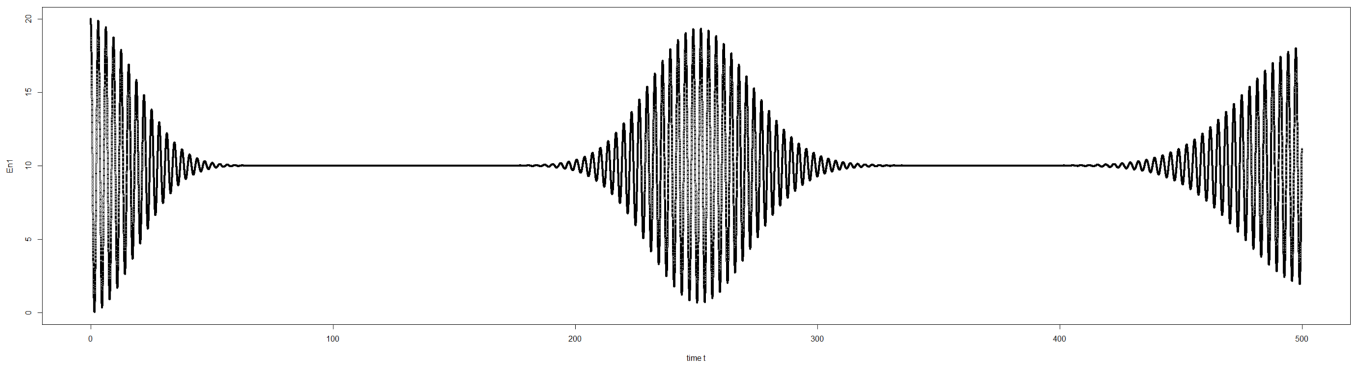
number of atoms at site 1,  $g = 0.125$



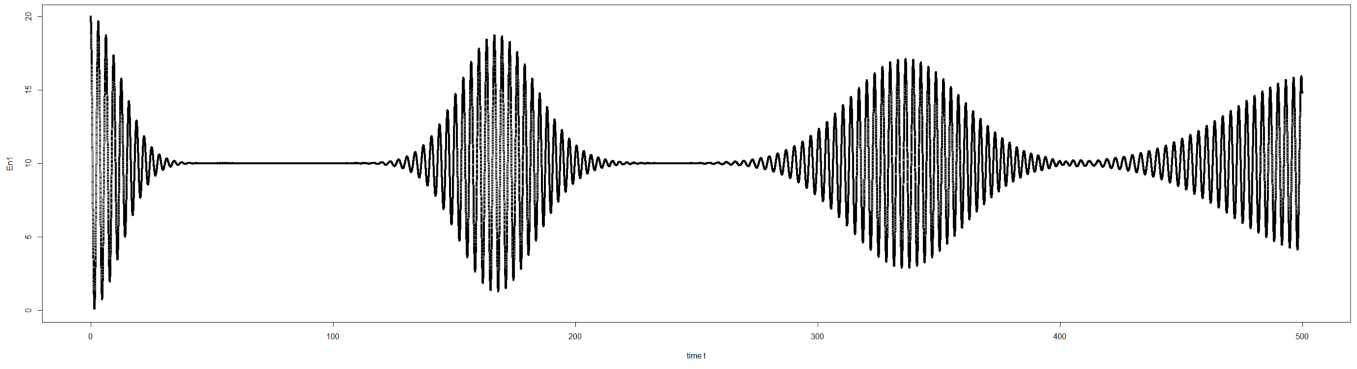
number of atoms at site 1,  $g = 0.25$



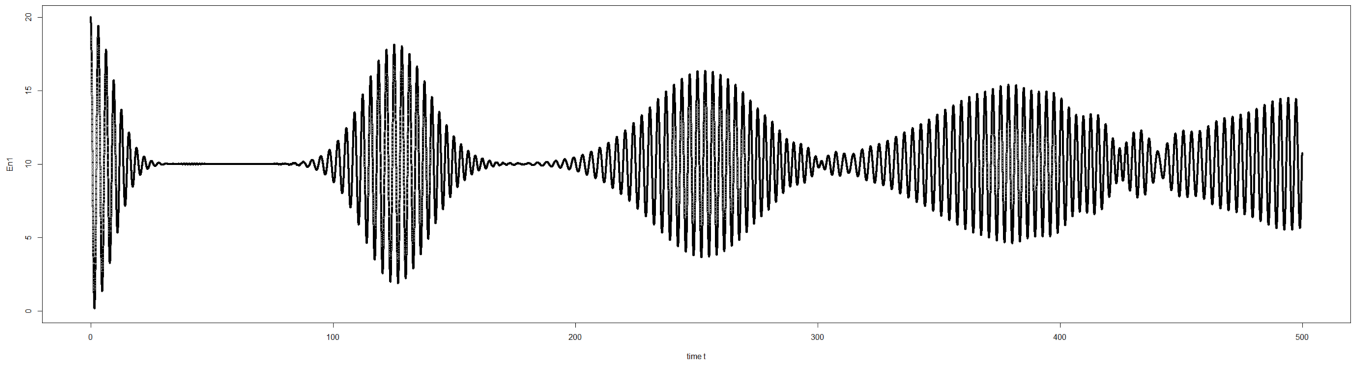
number of atoms at site 1,  $g = 0.5$



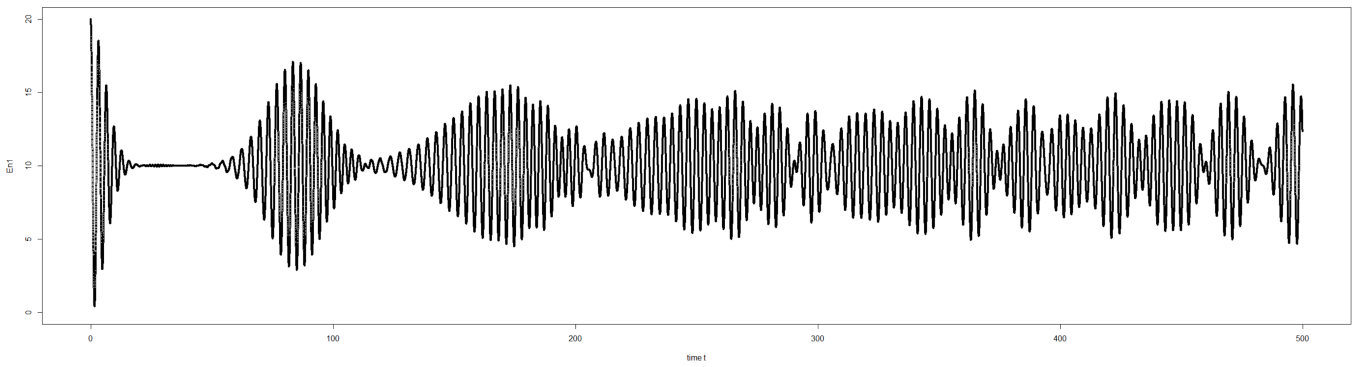
number of atoms at site 1,  $g = 0.75$



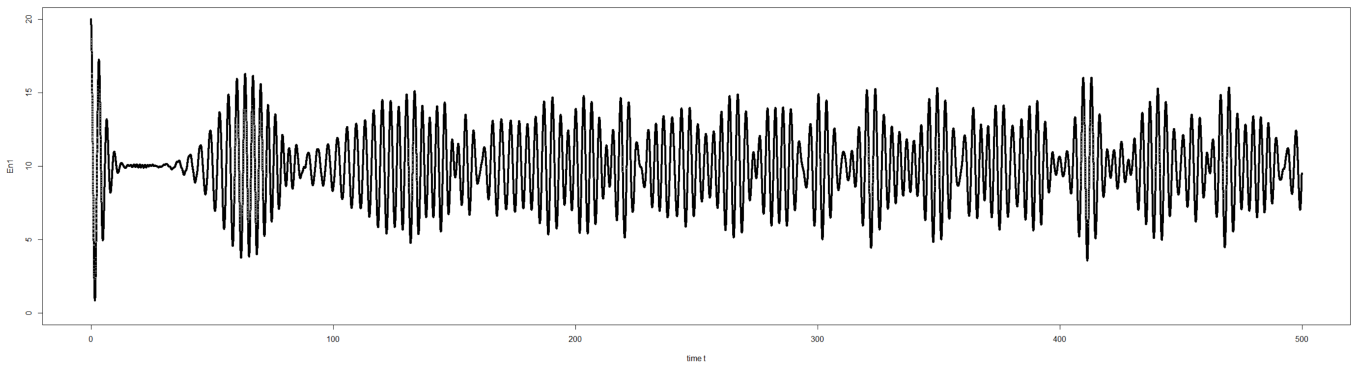
number of atoms at site 1,  $g = 1.0$



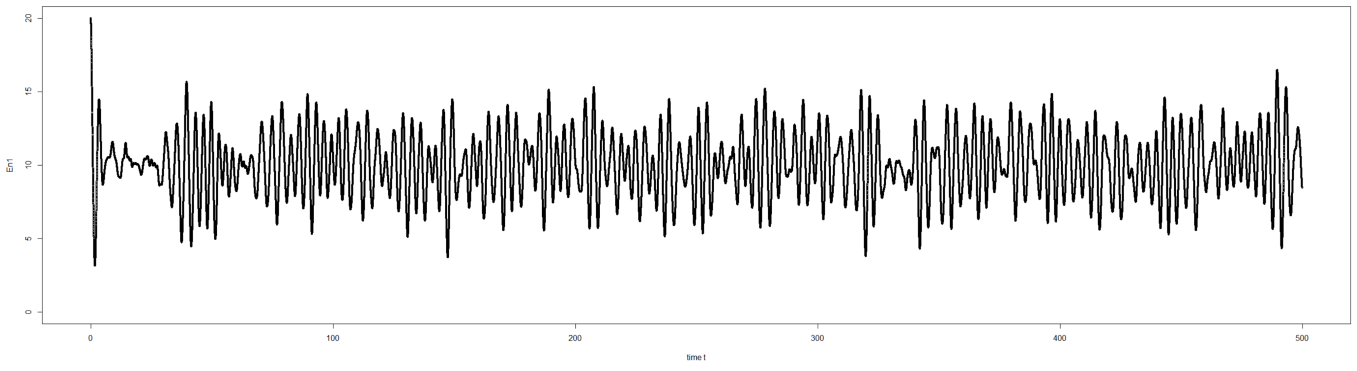
number of atoms at site 1,  $g = 1.5$



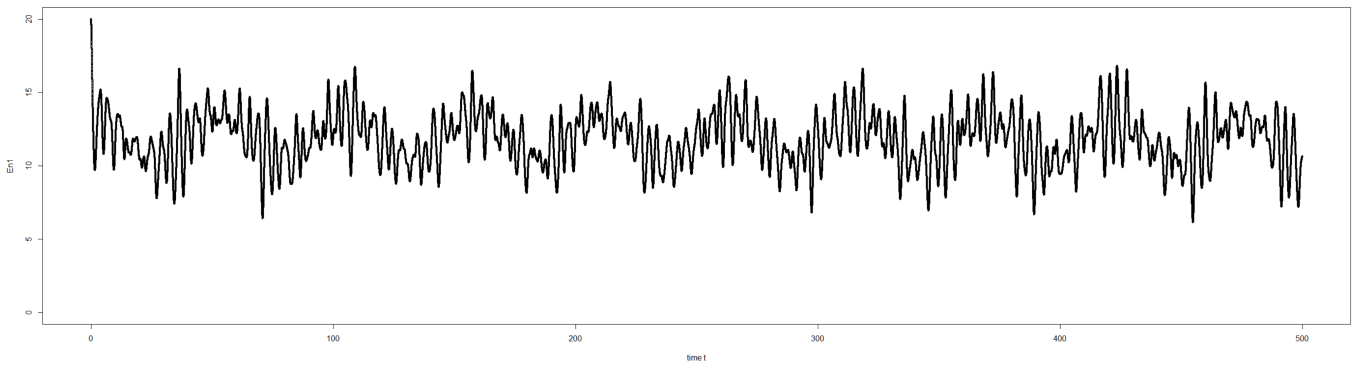
number of atoms at site 1,  $g = 2.0$



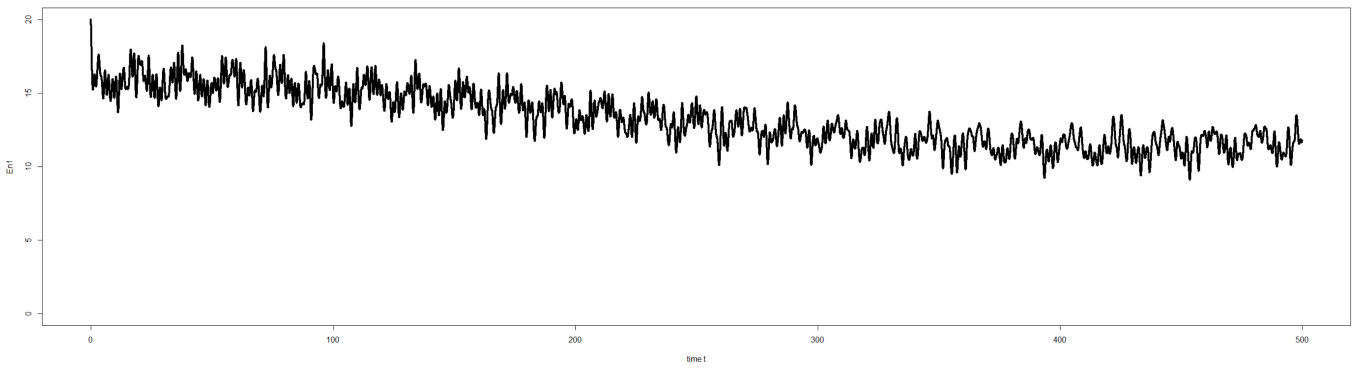
number of atoms at site 1,  $g = 3.0$



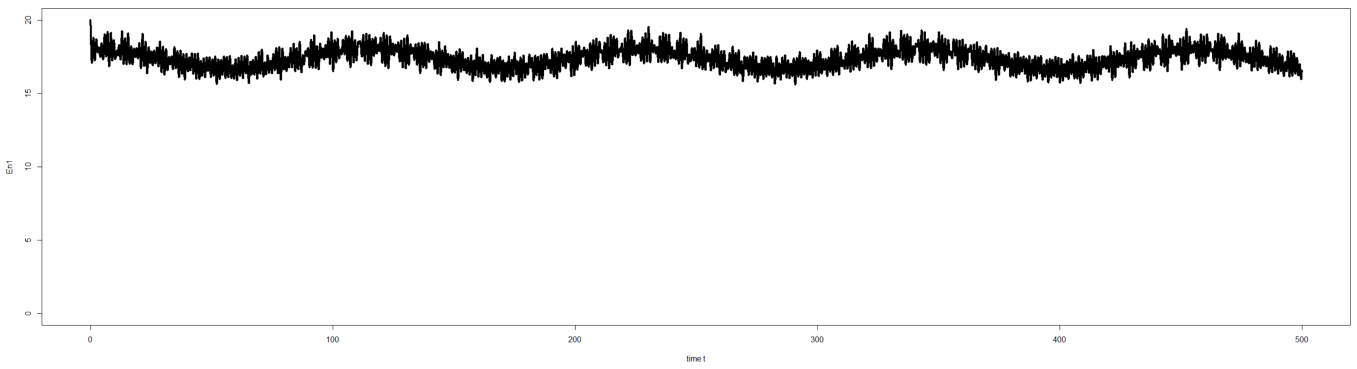
number of atoms at site 1,  $g = 4.0$



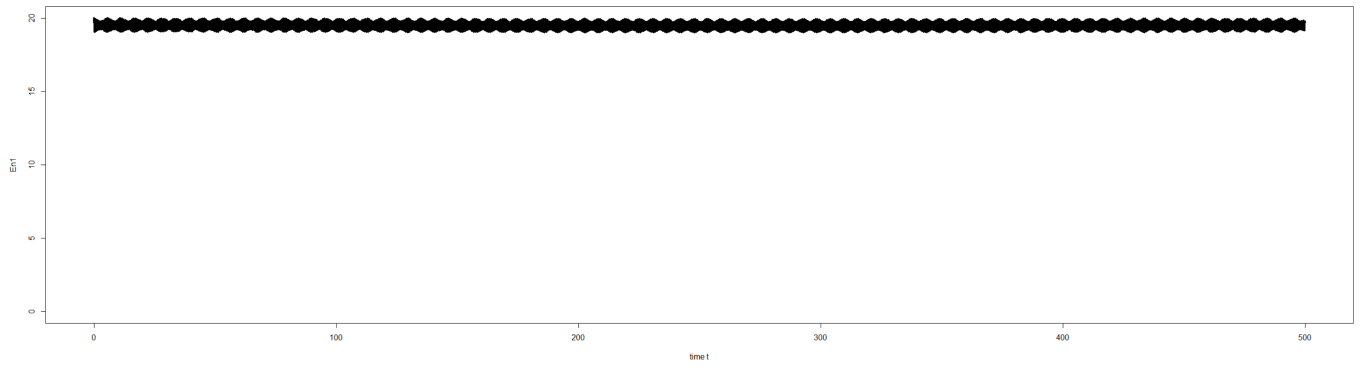
number of atoms at site 1,  $g = 5.0$



number of atoms at site 1,  $g = 6.0$



number of atoms at site 1,  $g = 10.0$



number of atoms at site 1,  $g = 50.0$

