

**week11: Die Matrix-Darstellung des 1D Bose-Hubbard Modells
 (Exakte Diagonalisierung)**

Das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell mit L Gitterplätzen und N Teilchen ist gegeben durch den Hamiltonoperator

$$H = \varepsilon H_0 + u H_{\text{int}} : L_s^2(\Gamma^N) \rightarrow L_s^2(\Gamma^N) \quad (1)$$

mit dem eindimensionalen Ortsraum-Gitter

$$\Gamma := \{1, 2, \dots, L\} \quad (2)$$

Der kinetische Energie-Anteil H_0 ist

$$H_0 = \sum_{j=1}^{L-1} (a_j^+ a_{j+1} + a_{j+1}^+ a_j) \quad (3)$$

und die Wechselwirkungs-Energie H_{int} ist gegeben durch

$$H_{\text{int}} = \sum_{j=1}^L a_j^+ a_j^+ a_j a_j \quad (4)$$

Die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a_j^+, a_j sind gegeben durch Definition 8.1 mit der Einteilchen-Basis (das ist die Standardbasis von $\mathbb{C}^{|\Gamma|} = \mathbb{C}^L$)

$$B = \{ e_j : \Gamma \rightarrow \mathbb{C} \mid e_j(i) = \delta_{j,i}, 1 \leq j \leq |\Gamma| = L \} \quad (5)$$

und genügen den Vertauschungsrelationen

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{i,j} \quad (6)$$

Eine ONB von $L_s^2(\Gamma^N)$ hatten wir im Theorem 5.1 im week5 angegeben,

$$B_N = \left\{ \left[\frac{N!}{\prod_j n_j!} \right]^{1/2} \otimes_j^s e_j^{\otimes n_j} \mid n_j \in \{0, 1, \dots, N\}, \sum_j n_j = N \right\} \quad (7)$$

Wir kürzen ab:

$$|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle := \left[\frac{N!}{\prod_j n_j!} \right]^{1/2} \otimes_j^s e_j^{\otimes n_j} \quad (8)$$

so dass also

$$B_N = \left\{ |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \mid n_1 + n_2 + \dots + n_L = N, n_j \in \{0, 1, \dots, N\} \right\} \quad (9)$$

Im Theorem 5.1 hatten wir uns auch überlegt, dass es genau

$$\dim L_s^2(\Gamma^N) = |B_N| = \binom{N+L-1}{L-1} \quad (10)$$

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.

Im Theorem 8.1 im week8 hatten wir die Wirkung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf die Basis-Vektoren angegeben, es war

$$a_j^+ |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle = \sqrt{n_j + 1} |n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots, n_L\rangle \quad (11)$$

$$a_j |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle = \sqrt{n_j} |n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots, n_L\rangle \quad (12)$$

Daraus ergibt sich dann die folgende Wirkungsweise von H_0 und H_{int} :

$$H_0 |n_1, \dots, n_L\rangle = \sum_{j=1}^{L-1} \left\{ \begin{aligned} &\sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_{j+1}} \times |n_1, \dots, n_j + 1, n_{j+1} - 1, \dots, n_L\rangle \\ &+ \sqrt{n_j} \sqrt{n_{j+1} + 1} \times |n_1, \dots, n_j - 1, n_{j+1} + 1, \dots, n_L\rangle \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

und

$$H_{\text{int}} |n_1, \dots, n_L\rangle = \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1) \times |n_1, \dots, n_L\rangle \quad (14)$$

Die Matrix-Darstellung von H ist dann gegeben durch die $|B_N| \times |B_N|$ - Matrix

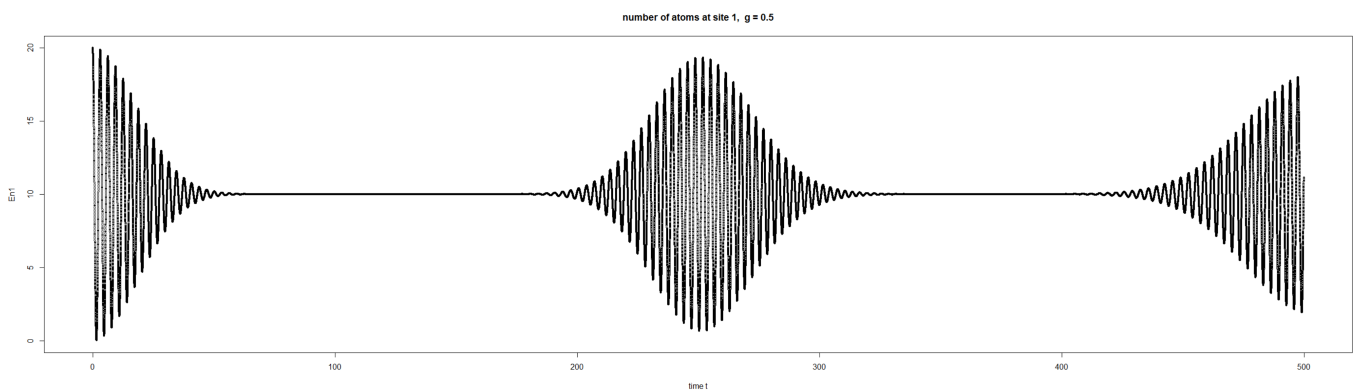
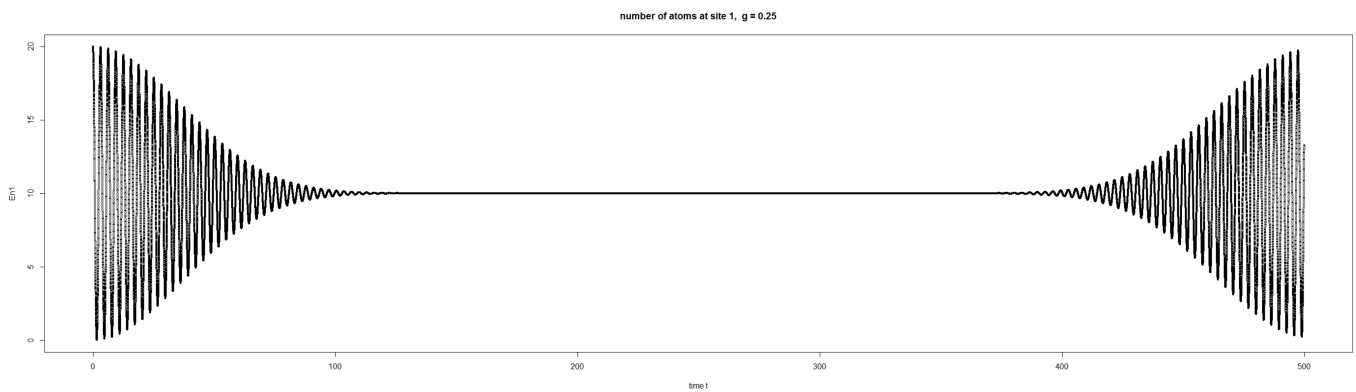
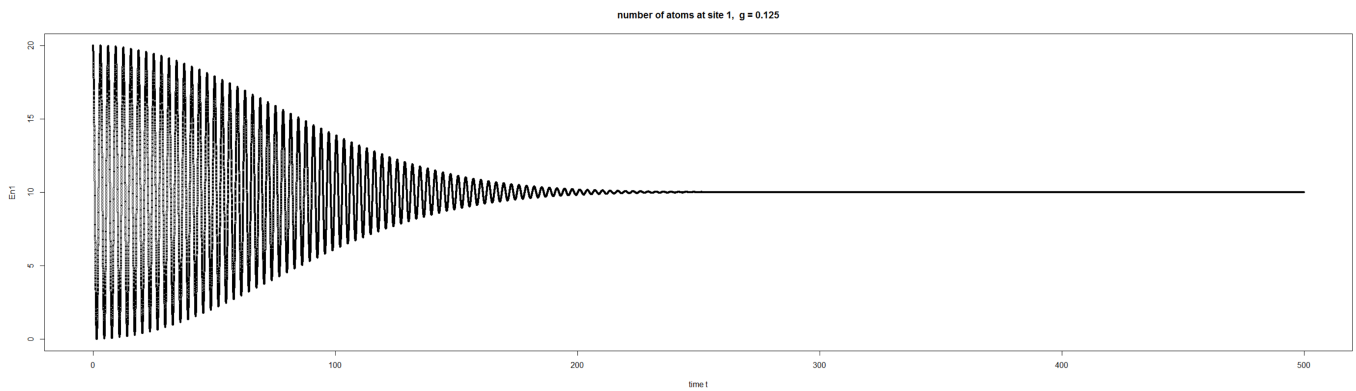
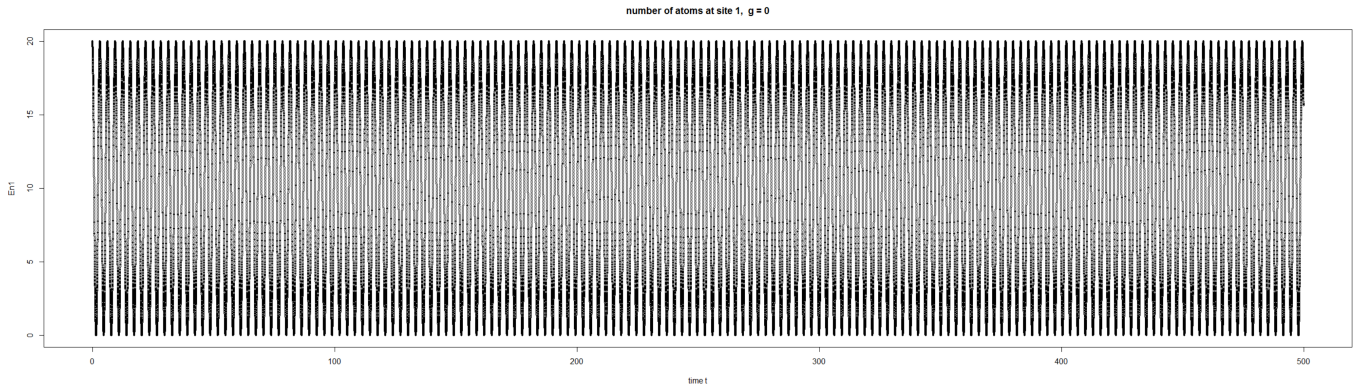
$$\left(\langle n_1, \dots, n_L | H | m_1, \dots, m_L \rangle \right) \in \mathbb{R}^{|B_N| \times |B_N|} \quad (15)$$

wobei, da wir ja eine Orthonormalbasis haben, die Rechenregel

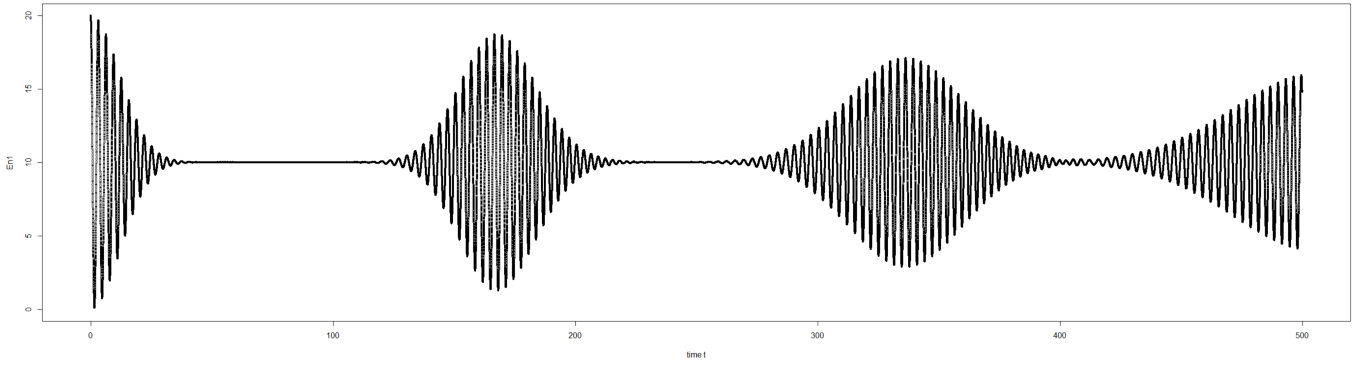
$$\langle n_1, \dots, n_L | m_1, \dots, m_L \rangle = \delta_{n_1, m_1} \times \dots \times \delta_{n_L, m_L} \quad (16)$$

zu berücksichtigen ist. Durch die Gleichungen (13), (14) und (16) sind die Matrix-Elemente (15) eindeutig festgelegt. Auf der Hauptdiagonalen stehen 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 ± 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 `week11.txt` anlegen.

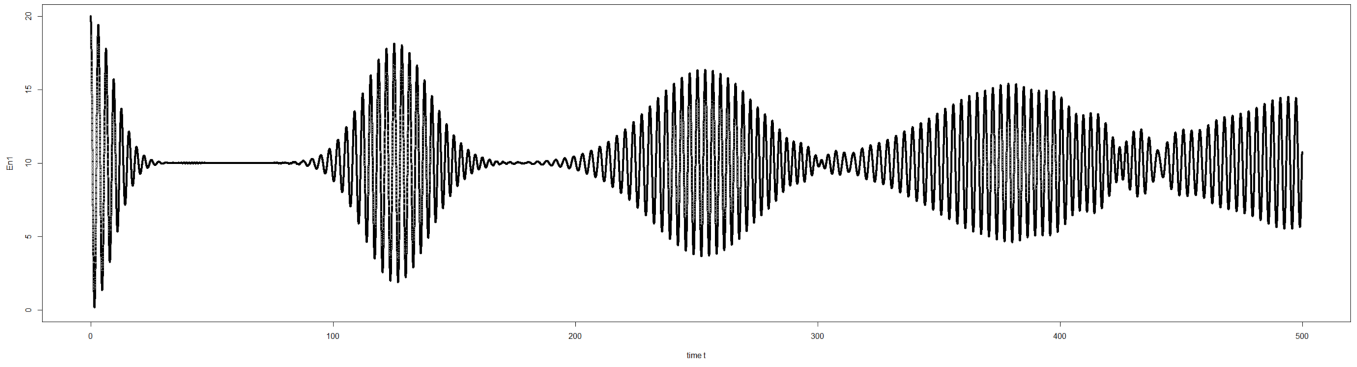
Nächste Woche tun wir dann damit noch die folgenden Bilder reproduzieren:



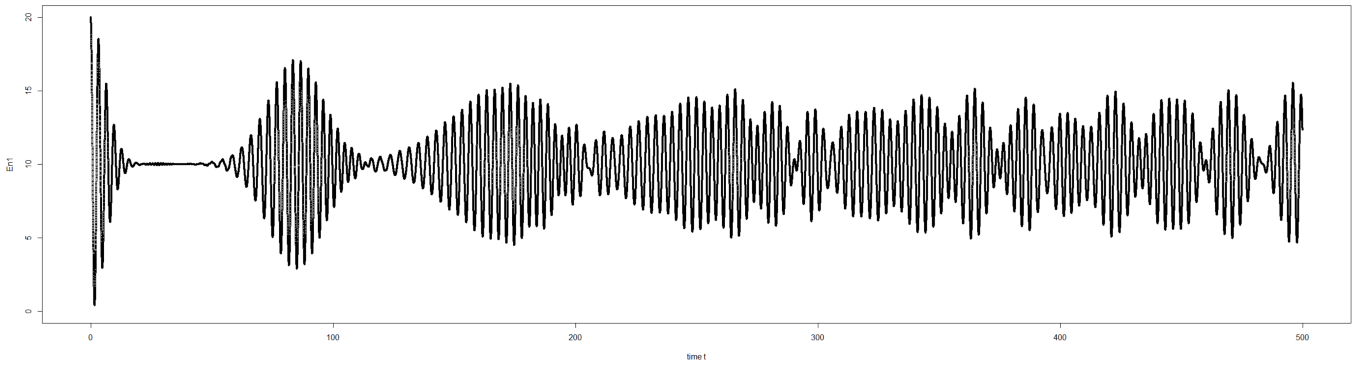
number of atoms at site 1, $g = 0.75$



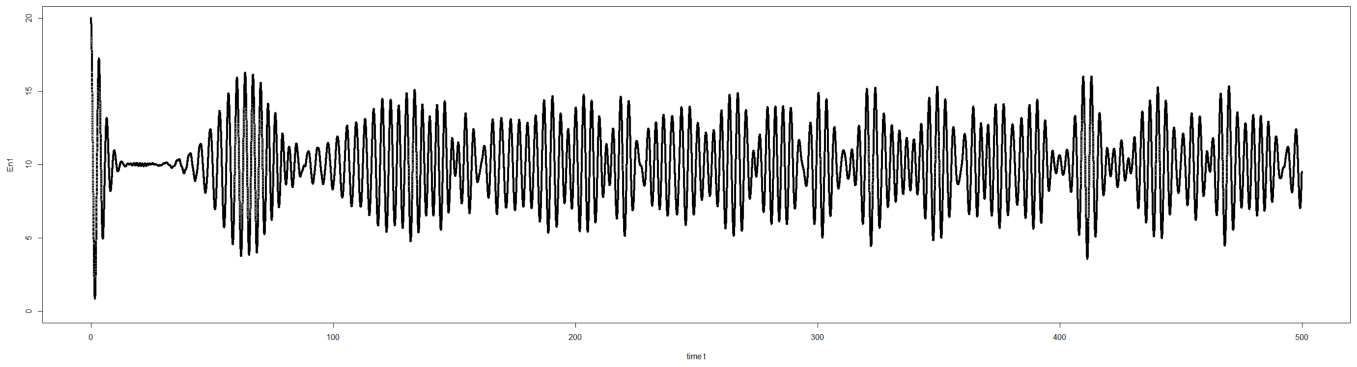
number of atoms at site 1, $g = 1.0$



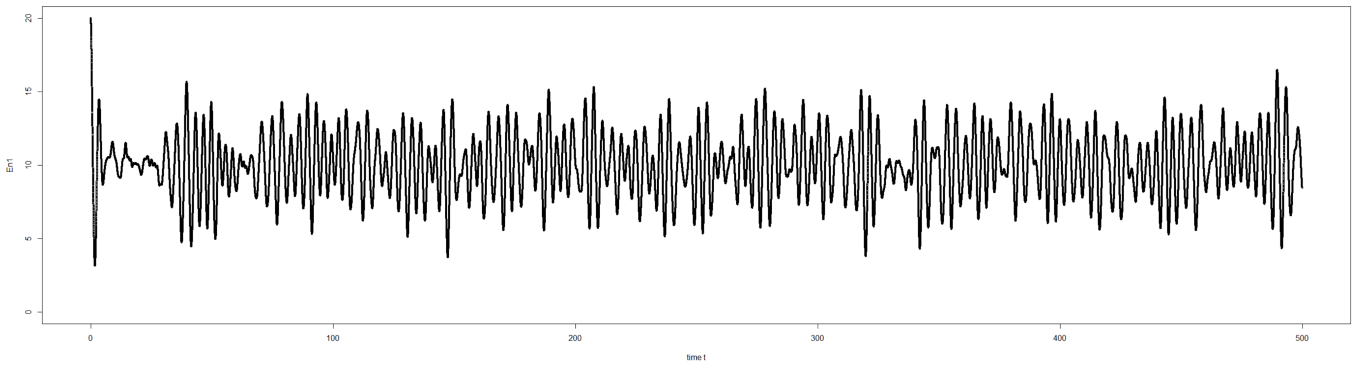
number of atoms at site 1, $g = 1.5$



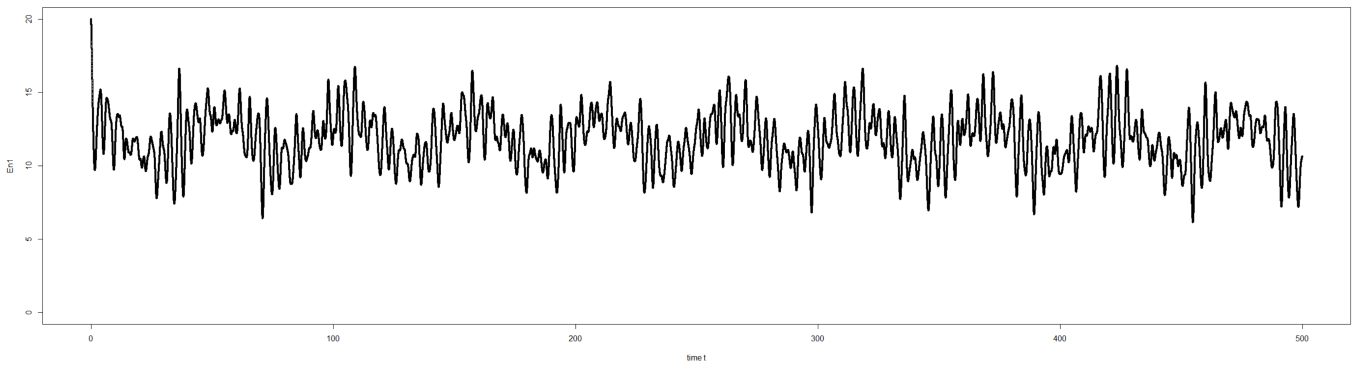
number of atoms at site 1, $g = 2.0$



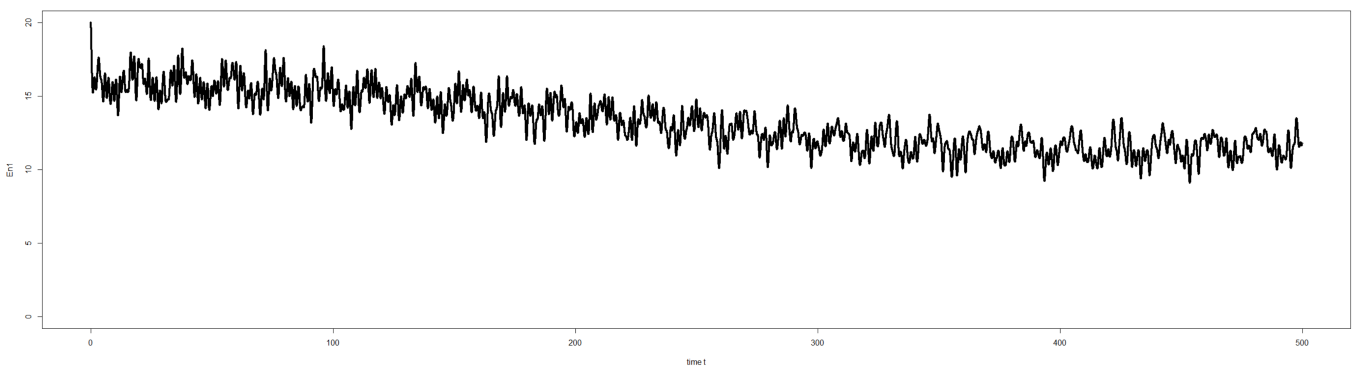
number of atoms at site 1, $g = 3.0$



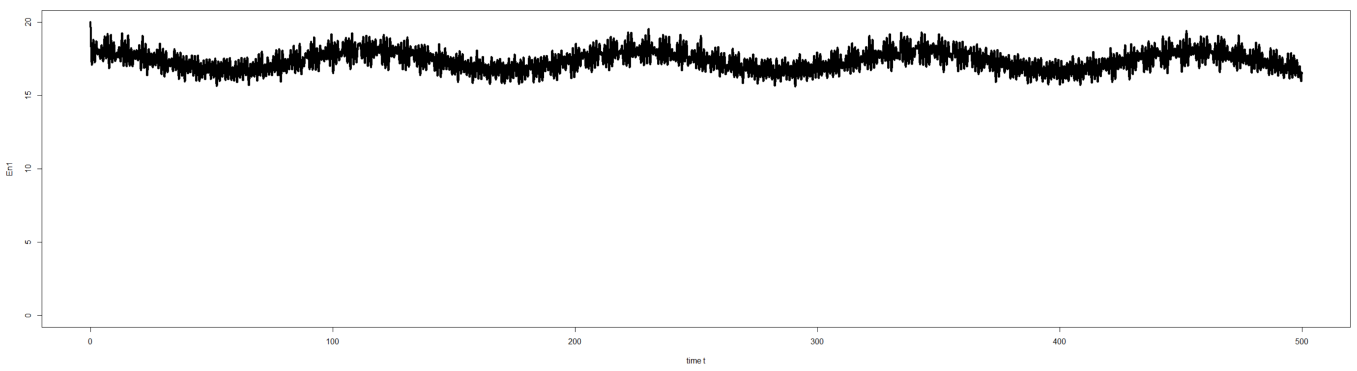
number of atoms at site 1, $g = 4.0$



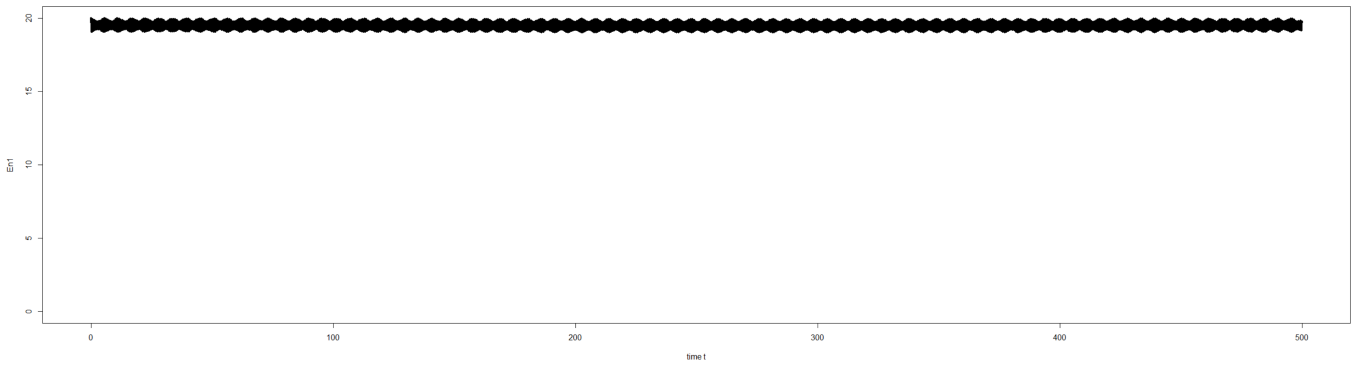
number of atoms at site 1, $g = 5.0$



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



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



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

