week12: Die Matrix-Darstellung des 1D Bose-Hubbard Modells: Zeitevolution von $\langle a_\ell^+ a_\ell\rangle(t)$

Wiederholen wir noch einmal das Setup aus dem week11: Das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell mit L Gitterplätzen und N Teilchen ist gegeben durch den Hamiltonoperator

$$H \;=\; \varepsilon\, H_0 \,+\, u\, H_{\rm int} \;:\; L^2_s(\Gamma^N) \;\to\; L^2_s(\Gamma^N) \tag{1}$$

mit dem eindimensionalen Ortsraum-Gitter

$$\Gamma \;:=\; \bigl\{\, 1\,,\,2\,,\,\cdots\,,\,L\,\bigr\} \tag{2}$$

Der kinetische Energie-Anteil H_0 ist

$$H_0 \;=\; \sum_{j=1}^{L-1} \bigl(\, a_j^+ a_{j+1} \,+\, a_{j+1}^+ a_j \,\bigr) \tag{3}$$

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

$$H_{\rm int} \;=\; \sum_{j=1}^{L} a_j^+ a_j^+ a_j a_j \tag{4}$$

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

$$B \;=\; \bigl\{\, e_j : \Gamma \to \mathbb{C} \;\mid\; e_j(i) = \delta_{j,i}\,,\;\; 1 \le j \le |\Gamma| = L \;\bigr\} \tag{5}$$

und genügen den Vertauschungsrelationen

$$[a_i, a_j^+] \;=\; \delta_{i,j} \tag{6}$$

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

$$B_N \;=\; \Bigl\{\, \bigl[\tfrac{N!}{\Pi_j\, n_j!}\bigr]^{1/2} \otimes_j^s e_j^{\otimes_s n_j} \;\mid\; n_j \in \{0,1,\cdots,N\}\,,\;\; \sum_j n_j \;=\; N \;\Bigr\} \tag{7}$$

Wir kürzen ab:

$$|n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle \;:=\; \bigl[\tfrac{N!}{\Pi_j\, n_j!}\bigr]^{1/2} \otimes_j^s e_j^{\otimes_s n_j} \tag{8}$$

so dass also

$$B_N \;=\; \left\{ \; |n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle \;\middle|\; n_1 + n_2 + \cdots + n_L = N,\; n_j \in \{0, 1, ..., N\} \; \right\} \tag{9}$$

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

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

Basisvektoren gibt. Die physikalische Bedeutung ist, dass, wenn sich das System in einem Zustand befindet, welcher durch den Basisvektor $|n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle$ 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 $n_1 + \cdots + n_L = N$ Teilchen.

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

$$a_j^+ \, |n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle \;=\; \sqrt{n_j + 1}\; |n_1, n_2, \cdots, n_j + 1, \cdots, n_L\rangle \tag{11}$$

$$a_j \, |n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle \;=\; \sqrt{n_j}\; |n_1, n_2, \cdots, n_j - 1, \cdots, n_L\rangle \tag{12}$$

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

$$\begin{aligned} H_0 \, \big|n_1, \cdots, n_L\big\rangle \;=\; \sum_{j=1}^{L-1} \Big\{ & \sqrt{n_j + 1}\,\sqrt{\;n_{j+1}\;} \;\times\; \big|n_1, \cdots, n_j + 1, n_{j+1} - 1, \cdots, n_L\big\rangle \\ & + \sqrt{\;n_j\;}\,\sqrt{n_{j+1} + 1} \;\times\; \big|n_1, \cdots, n_j - 1, n_{j+1} + 1, \cdots, n_L\big\rangle \Big\} \end{aligned} \tag{13}$$

und

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

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

$$\Big(\big\langle n_1, \cdots, n_L \big| \, H \, \big| m_1, \cdots, m_L \big\rangle \Big) \;\in\; \mathbb{R}^{|B_N| \times |B_N|} \tag{15}$$

wobei, da wir ja eine Orthonormalbasis haben, die Rechenregel

$$\big\langle n_1, \cdots, n_L \big| m_1, \cdots, m_L \big\rangle \;=\; \delta_{n_1, m_1} \times \cdots \times \delta_{n_L, m_L} \tag{16}$$

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 hatten wir in dem `week11.txt` mit R-Code angelegt.

Die Funktion $\langle a_\ell^+ a_\ell\rangle(t)$

Wir betrachten jetzt den Anfangszustand

$$\psi_0 \;:=\; |n\rangle \;=\; \big|n_1, n_2, \cdots, n_L\big\rangle \tag{17}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ befinden sich also n_j Teilchen am Gitterplatz $j \in \{1, 2, \cdots, L\}$. Die Zeitevolution von dem ψ_0 ist dann gegeben durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (wir setzen das $\hbar$ auf 1 oder absorbieren es in die Parameter ε und u des Hamilton-Operators)

$$i\,\tfrac{\partial}{\partial t}\,\psi_t \;=\; H\,\psi_t \tag{18}$$

und die Lösung können wir mit Hilfe des Matrix-Exponentials schreiben,

$$\psi_t \;=\; e^{-itH}\,\psi_0 \tag{19}$$

Die Anzahl der Teilchen am Gitterplatz $\ell \in \{1, 2, \cdots, L\}$ zur Zeit $t > 0$ ist dann gegeben durch

$$\langle\, \psi_t \,|\, a_\ell^+ a_\ell\; \psi_t \,\rangle \;=:\; \langle a_\ell^+ a_\ell\rangle(t) \tag{20}$$

Um die Notation nicht zu schwerfällig werden zu lassen, haben wir die ψ_0-Abhängigkeit auf der rechten Seite von (20) nicht explizit gemacht, eine genauere Notation wäre etwa $\langle a_\ell^+ a_\ell\rangle_{\psi_0}(t)$. Diese Funktion wollen wir jetzt in dem `week12.txt` berechnen. Dazu gehen wir folgendermassen vor: Wir schreiben (mit B_N die Menge aller Basisvektoren)

$$\begin{aligned}
\langle a_\ell^+ a_\ell\rangle(t) \;&=\; \sum_{|m\rangle\,\in\,B_N} \langle\, \psi_t \,|\, a_\ell^+ a_\ell\; m \,\rangle\,\langle\, m \,|\, \psi_t \,\rangle \\
&=\; \sum_{|m\rangle\,\in\,B_N} m_\ell \;\times\; \big|\,\langle\, m \,|\, \psi_t \,\rangle\,\big|^2 \\
&=\; \sum_{|m\rangle\,\in\,B_N} m_\ell \;\times\; \Big|\Big\langle\, m \,\Big|\; e^{-itH}\; \Big|\, \psi_0 \,\Big\rangle\Big|^2 \\
&=\; \sum_{\substack{m_1,\cdots,m_L=0\\ m_1+\cdots+m_L=N}}^{N} m_\ell \;\times\; \Big|\Big\langle m_1, \cdots, m_L\Big|\; e^{-itH}\; \Big|n_1, n_2, \cdots, n_L\Big\rangle\Big|^2
\end{aligned} \tag{21}$$

und die Matrix-Elemente

$$\Big\langle\, m \,\Big|\; e^{-itH}\; \Big|\, \psi_0 \,\Big\rangle \;=\; \Big\langle\, m \,\Big|\; e^{-itH}\; \Big|\, n \,\Big\rangle \;=\; \Big\langle m_1, \cdots, m_L\Big|\; e^{-itH}\; \Big|n_1, n_2, \cdots, n_L\Big\rangle \tag{22}$$

berechnen wir mit Hilfe der Eigenwerte und Eigenvektoren von H, die wir im week11 berechnet hatten: Ist etwa

$$H\,v_j \;=\; E_j\,v_j \tag{23}$$

mit $1 \leq j \leq |B_N|$ und $v_j \in \mathbb{R}^{|B_N|}$ und $(v_j, v_k) = \delta_{j,k}$, H ist ja eine reelle, symmetrische Matrix und die `eigen()`-Funktion liefert uns genau den Vektor der Eigenwerte

$$e \;:=\; \big(\,E_1\,,\; \cdots\,,\; E_{|B_N|}\,\big) \tag{24}$$

mit der Matrix der orthonormierten Eigenvektoren

$$V \;:=\; \begin{pmatrix} | & & | \\ v_1 & \cdots & v_{|B_N|} \\ | & & | \end{pmatrix} \tag{25}$$

dann können wir schreiben

$$\big\langle\, m \,\big|\, e^{-itH} \,\big|\, n \,\big\rangle \;=\; \sum_j \big\langle\, m \,\big|\, e^{-itH} \,\big|\, v_j \,\big\rangle \big\langle\, v_j \,|\, n \,\big\rangle \;=\; \sum_j \big\langle\, m \,\big|\, v_j \,\big\rangle\, e^{-i\,t\,E_j} \big\langle\, v_j \,|\, n \,\big\rangle \tag{26}$$

Okay, schauen wir uns ein paar Bilder an:

$\langle a_\ell^+ a_\ell\rangle(t)$ für $L = 2,\ N = 20$:

Selbst für den Fall von nur $L = 2$ Gitterplätzen, da würde man vielleicht vermuten, 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 12 Bildern ist also $L = 2$, wir nehmen insgesamt $N = 20$ Teilchen, der Anfangszustant sei

$$\psi_0 \;=\; |n\rangle \;=\; \big|n_1, n_2\big\rangle \;:=\; \big|\, 20\,,\, 0\,\big\rangle$$

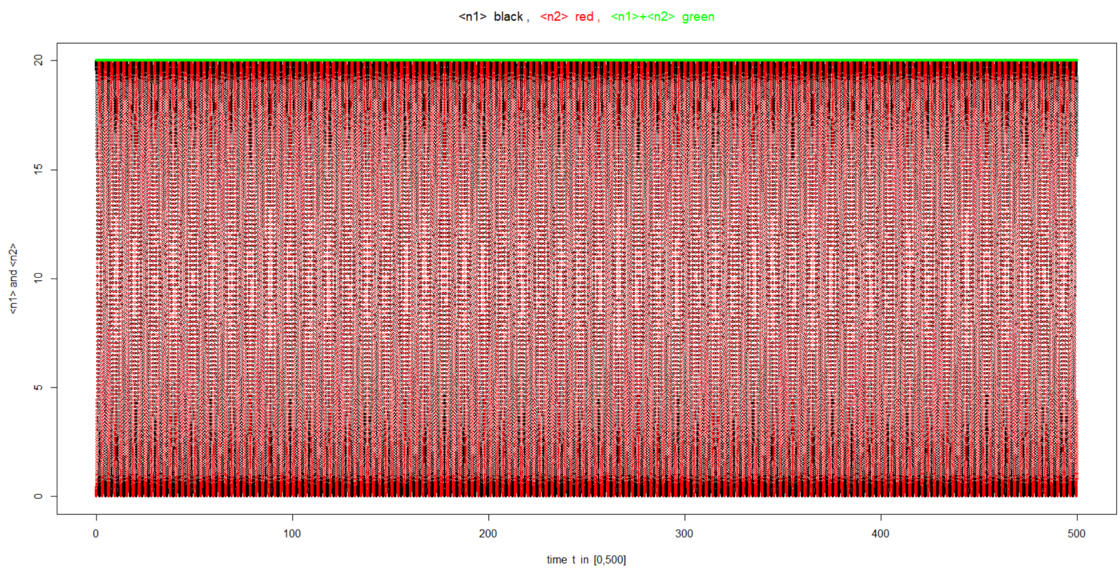
20 Teilchen auf Gitterplatz 1 und 0 Teilchen auf Gitterplatz 2 zum Zeitpunkt $t = 0$, und die Zeitachse ist jeweils $t \in [0, 500]$. Das ε, der Parameter vor der kinetischen Energie H_0, ist $\varepsilon = 1$, und für den Wechselwirkungsparameter u vor dem H_{int} schreiben wir

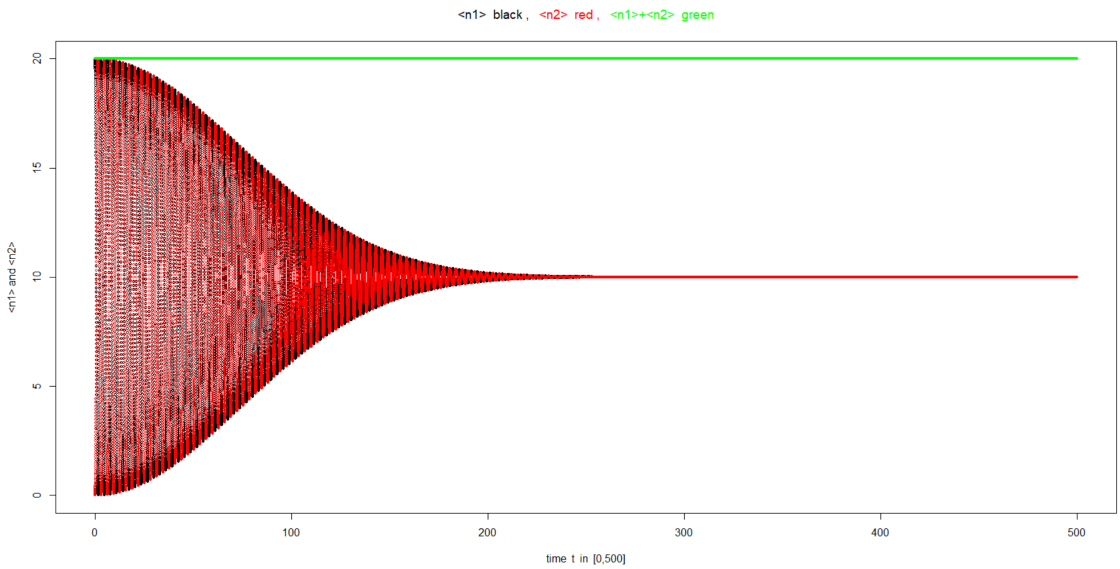
$$u \;=\; \frac{g}{N} \;=\; \frac{g}{20}$$

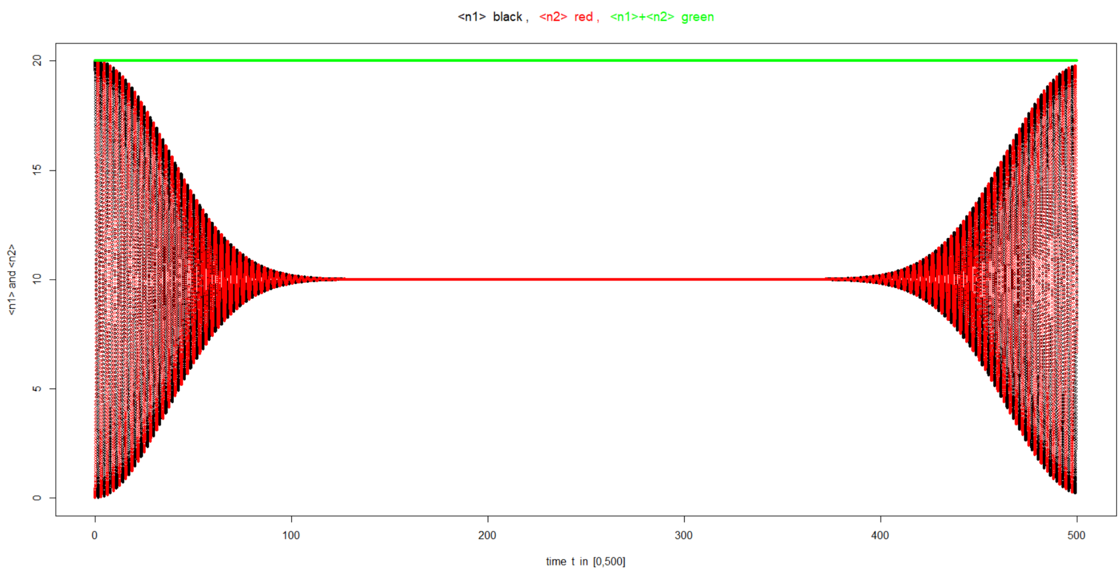
und wählen dann für g die folgenden Werte:

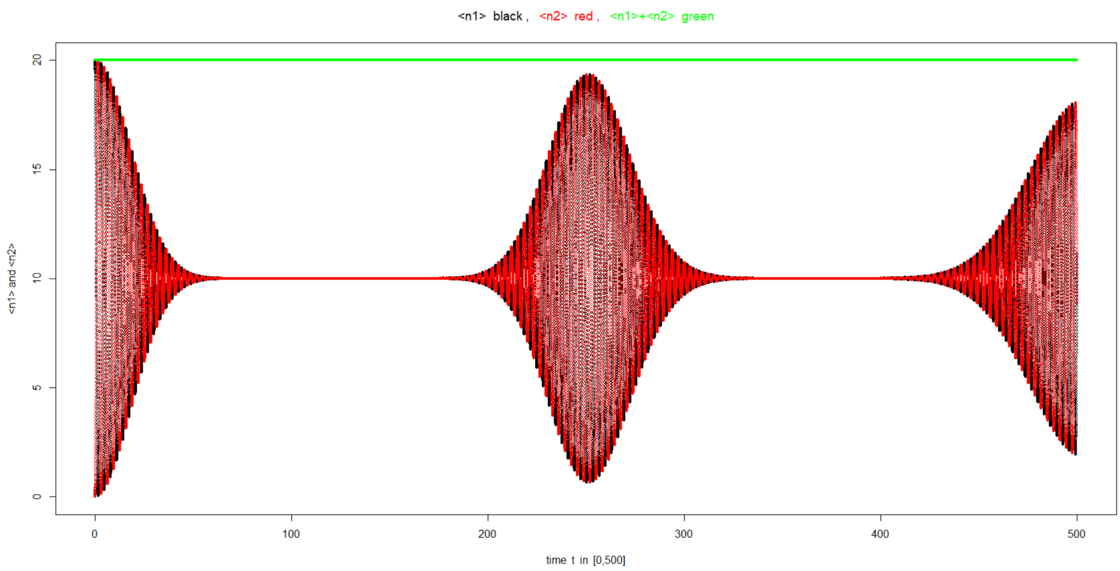
$$g \;\in\; \big\{\, 0.0\,,\ 1/16\,,\ 1/8\,,\ 1/4\,,\ 1/2\,,\ 1.0\,,\ 1.5\,,\ 2.0\,,\ 2.5\,,\ 3.0\,,\ 5.0\,,\ 10.0\,\big\}$$

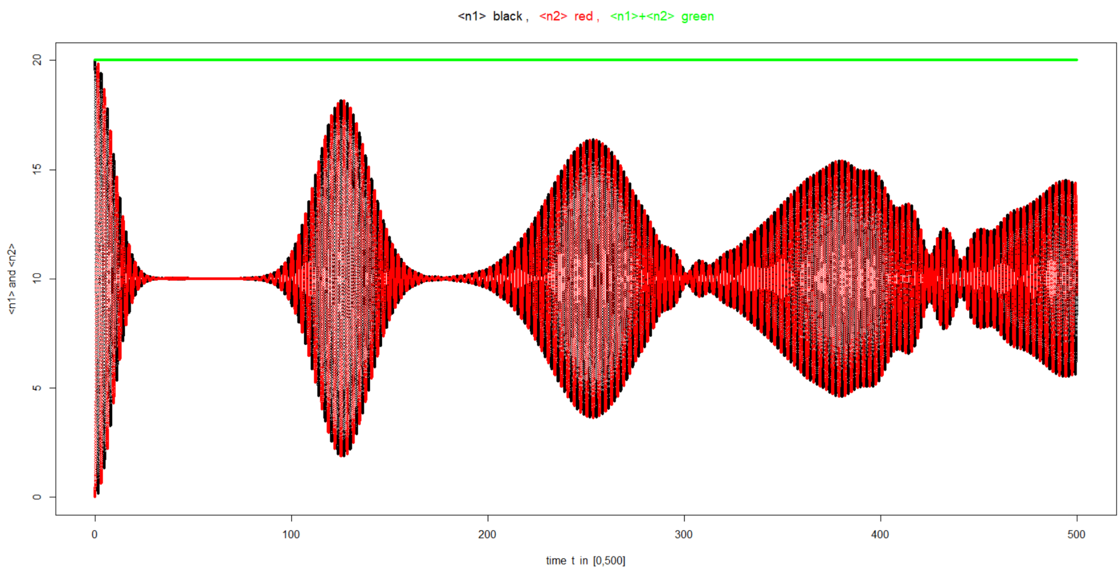
Man bekommt dann die folgenden Bilder, die Anzahl der Atome auf Gitterplatz 1 in schwarz und die Anzahl der Teilchen auf Gitterplatz 2 zur Zeit $t \in [0, 500]$ in rot:

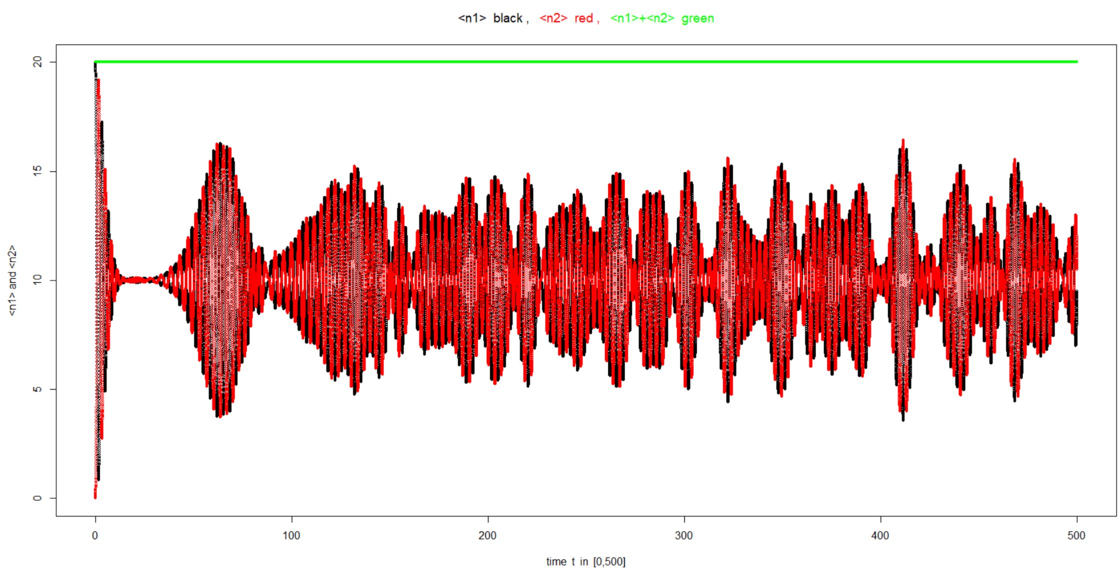

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
time t in [0,500]

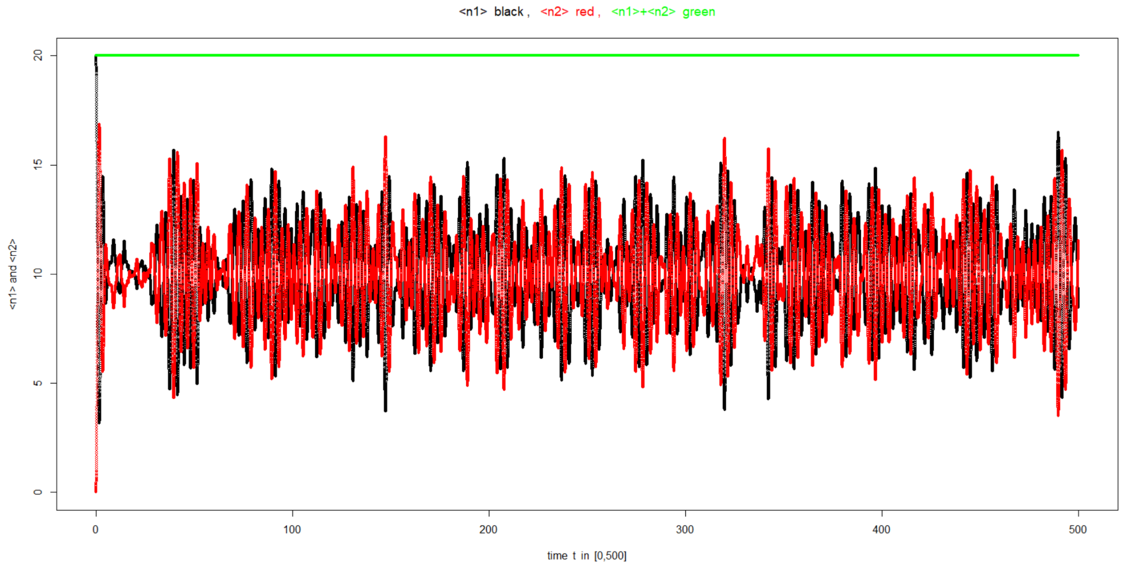

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
time t in [0,500]

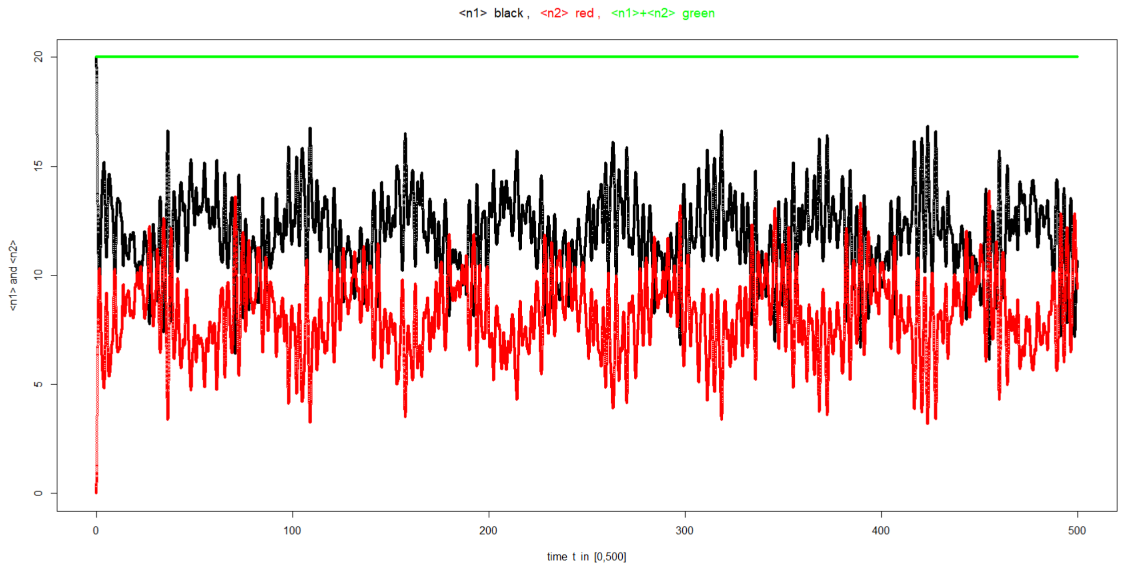

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
time t in [0,500]

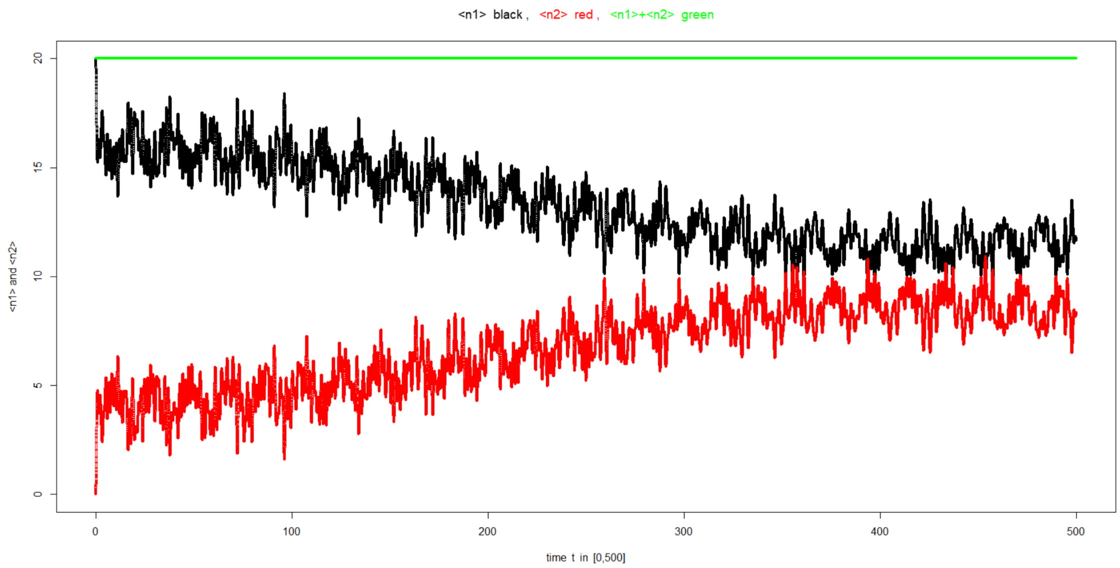

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
0
5
10
15
20
0
100
200
300
400
500
time t in [0,500]

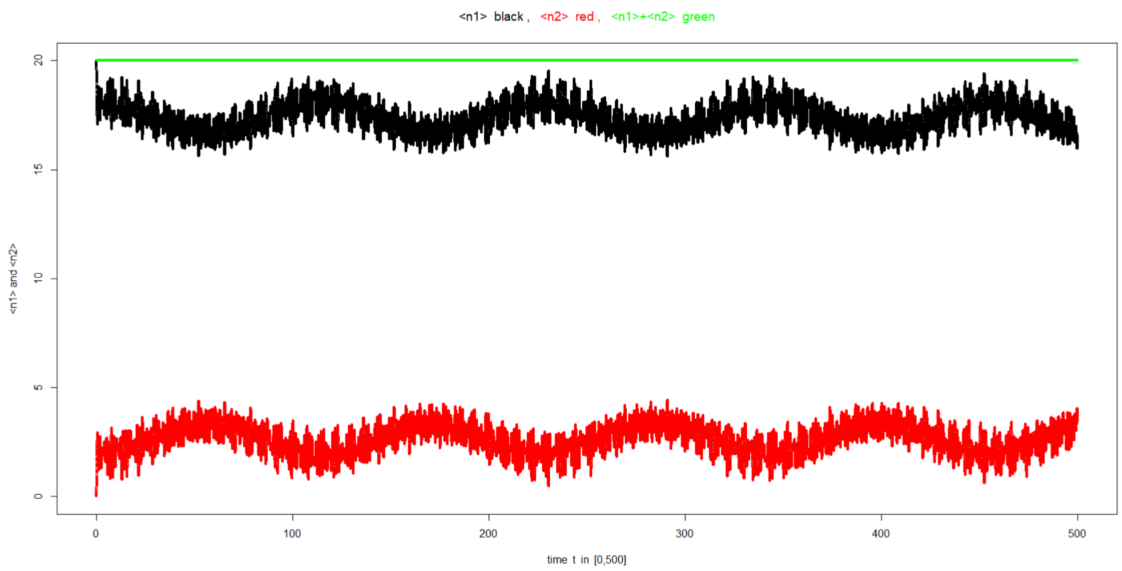

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
0
5
10
15
20
0
100
200
300
400
500
time t in [0,500]


<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
0
5
10
15
20
0
100
200
300
400
500
time t in [0,500]

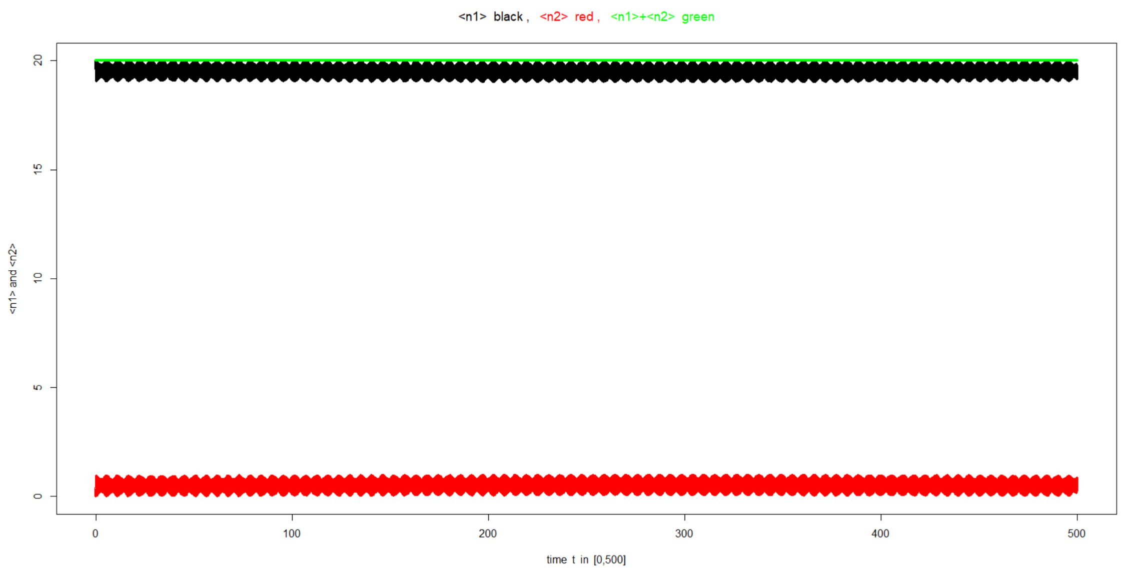

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
0
5
10
15
20
0
100
200
300
400
500
time t in [0,500]


<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
0
5
10
15
20
0
100
200
300
400
500
time t in [0,500]

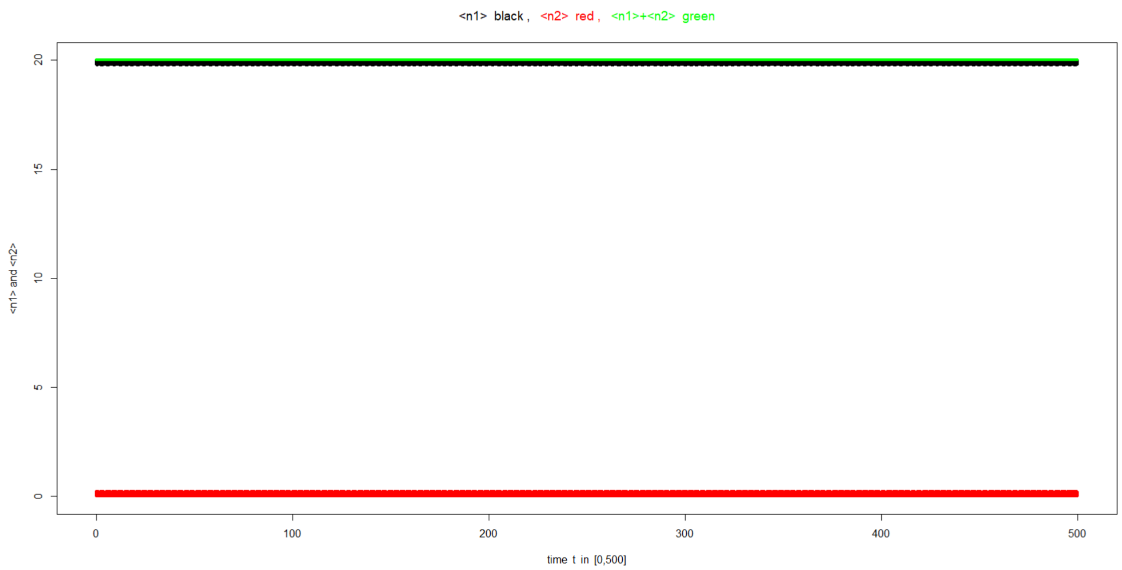

<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
0
5
10
15
20
0
100
200
300
400
500
time t in [0,500]



<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
time t in [0,500]



<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
time t in [0,500]



<n1> black , <n2> red , <n1>+<n2> green
<n1> and <n2>
time t in [0,500]

$\langle a_\ell^+ a_\ell \rangle(t)$ für $L = 5,\ N = 10$:

Wir wählen den Anfangszustand

$$\psi_0 \;=\; |n\rangle \;=\; \big|n_1, n_2, n_3, n_4, n_5\big\rangle \;:=\; \big|\,10\,,\,0\,,\,0\,,\,0\,,\,0\,\big\rangle \qquad (27)$$

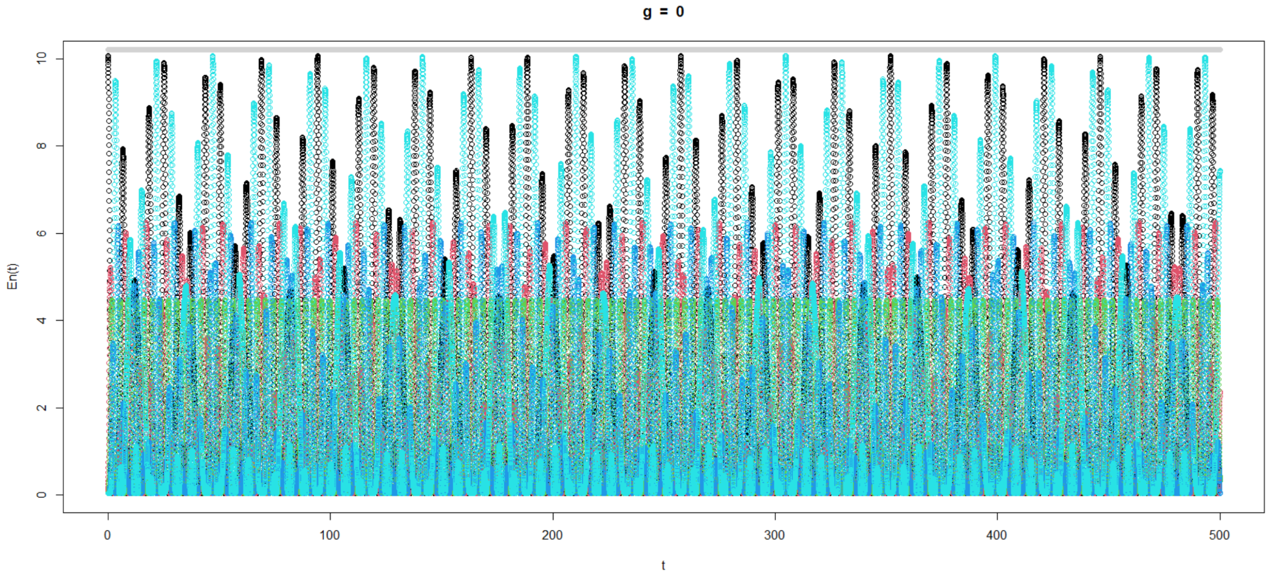
also alle $N = 10$ Teilchen auf den ersten Gitterplatz zur Zeit $t = 0$ und die Gitterplätze 2 bis 5 alle unbesetzt. Wir plotten die Funktionen

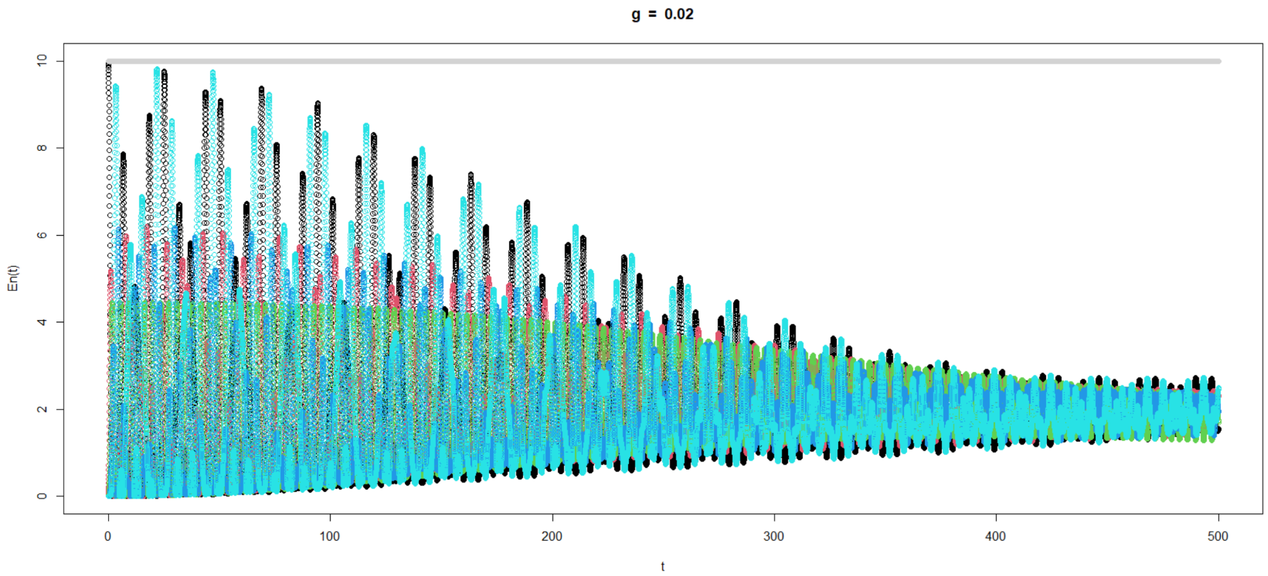
$\langle a_1^+ a_1\rangle(t)$	in schwarz
$\langle a_2^+ a_2\rangle(t)$	in rot
$\langle a_3^+ a_3\rangle(t)$	in grün
$\langle a_4^+ a_4\rangle(t)$	in blau
$\langle a_5^+ a_5\rangle(t)$	in hellblau

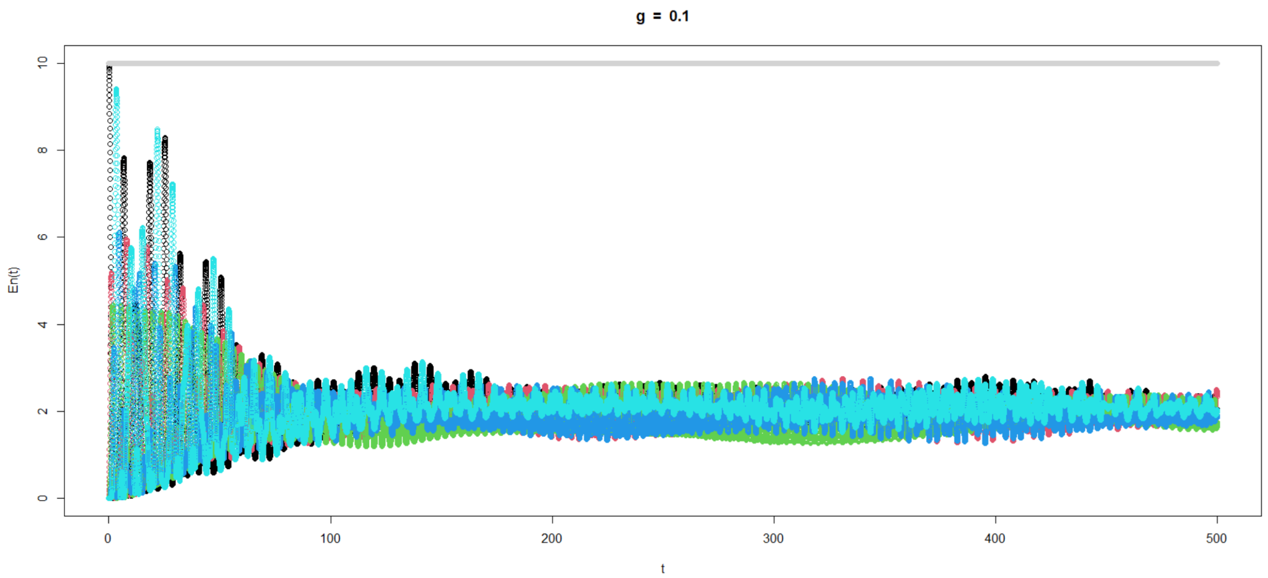
für $t \in [0, 500]$ jeweils alle in einem Plotfenster, für verschiedene Werte von $g = u/N = u/10$. Wir wählen

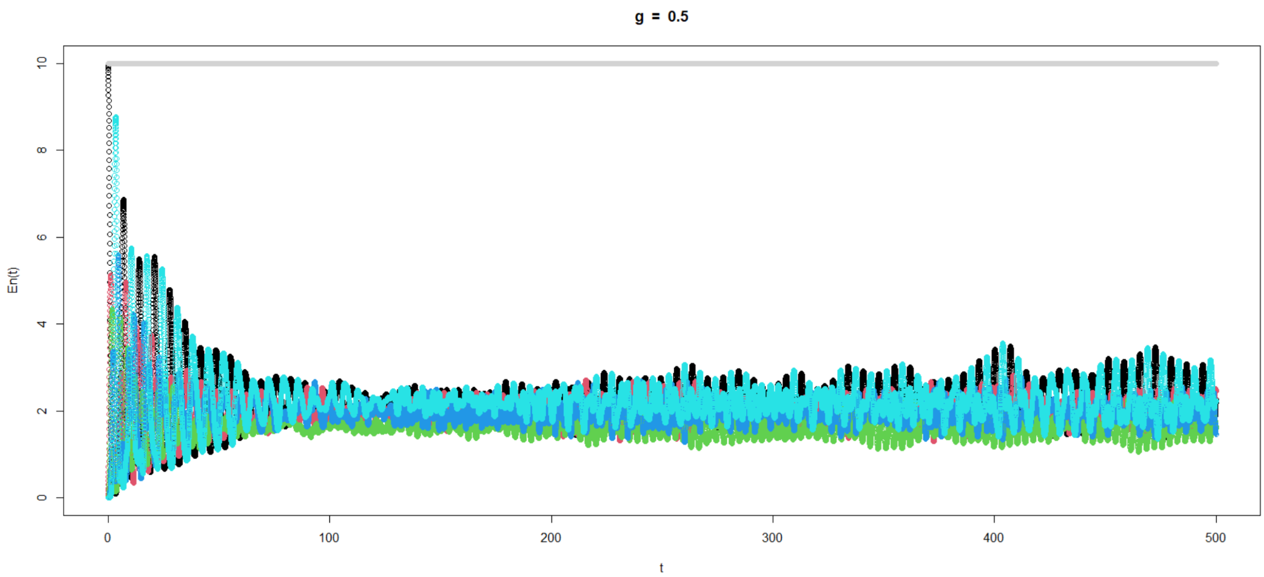
$$g \;\in\; \big\{\, 0.0\;,\; 0.02\;,\; 0.1\;,\; 0.5\;,\; 1.0\;,\; 1.5\;,\; 2.0\;,\; 2.5\;,\; 5.0\,\big\}$$

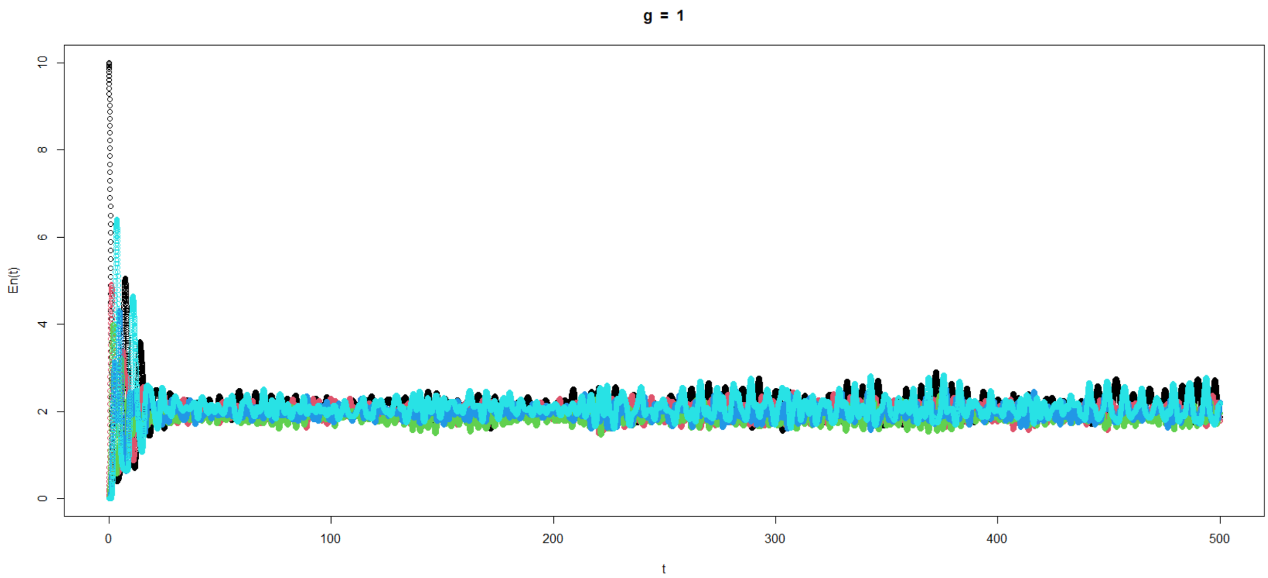
und bekommen die folgenden 9 Bilder (wieder mit $\varepsilon = 1$):

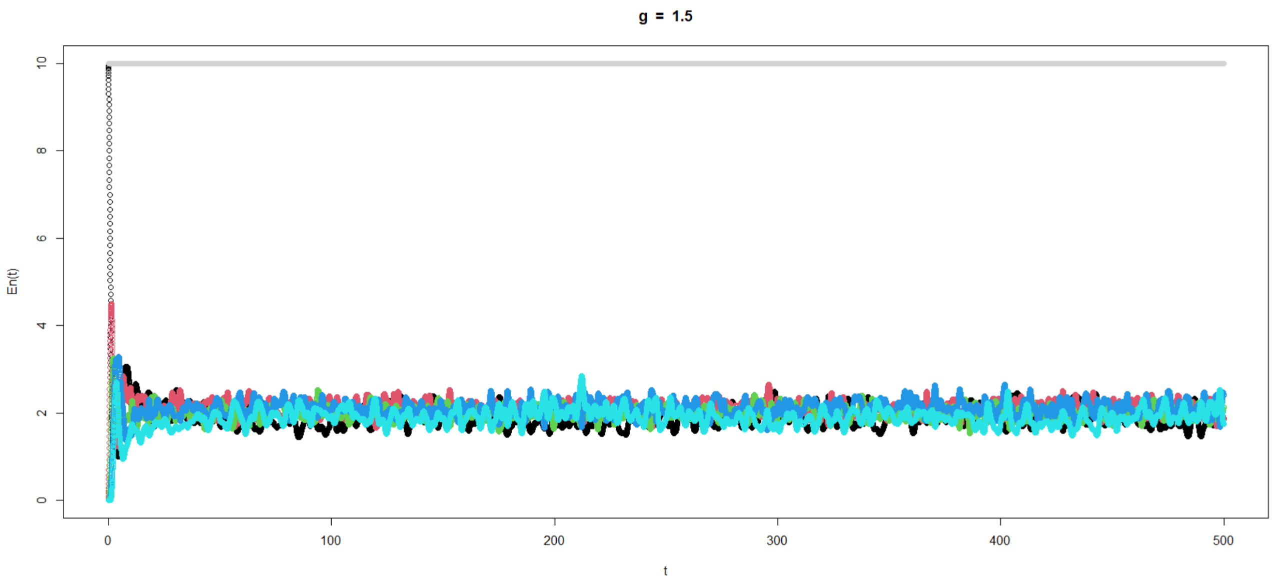

g = 0
En(t)
t
0
2
4
6
8
10
0
100
200
300
400
500

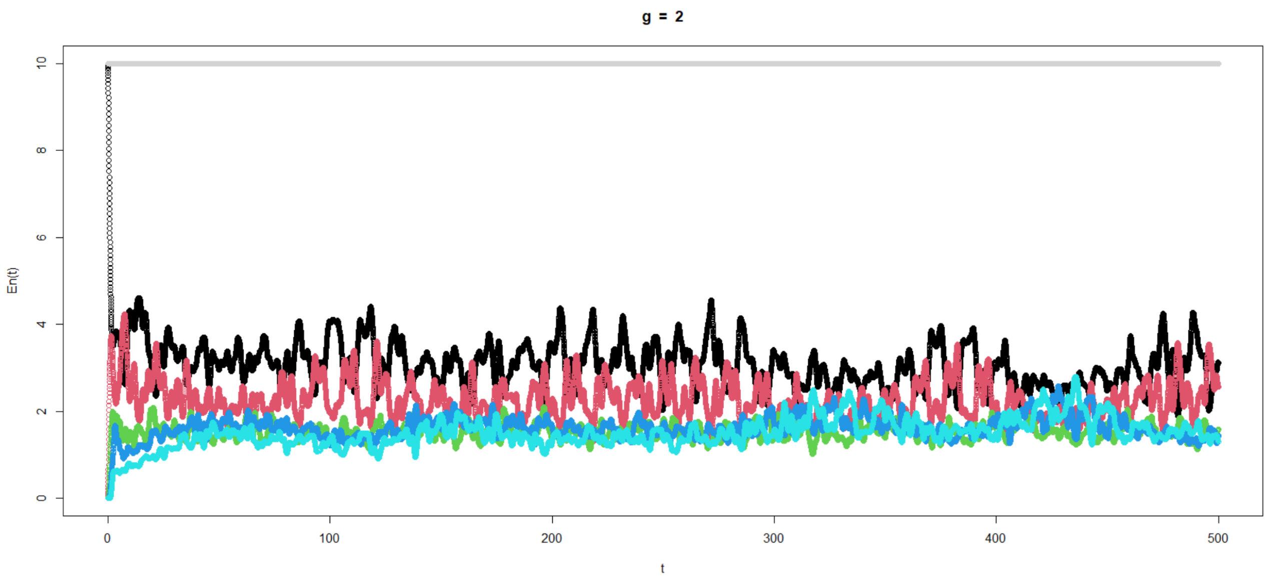

g = 0.02
En(t)
t
0
2
4
6
8
10
0
100
200
300
400
500

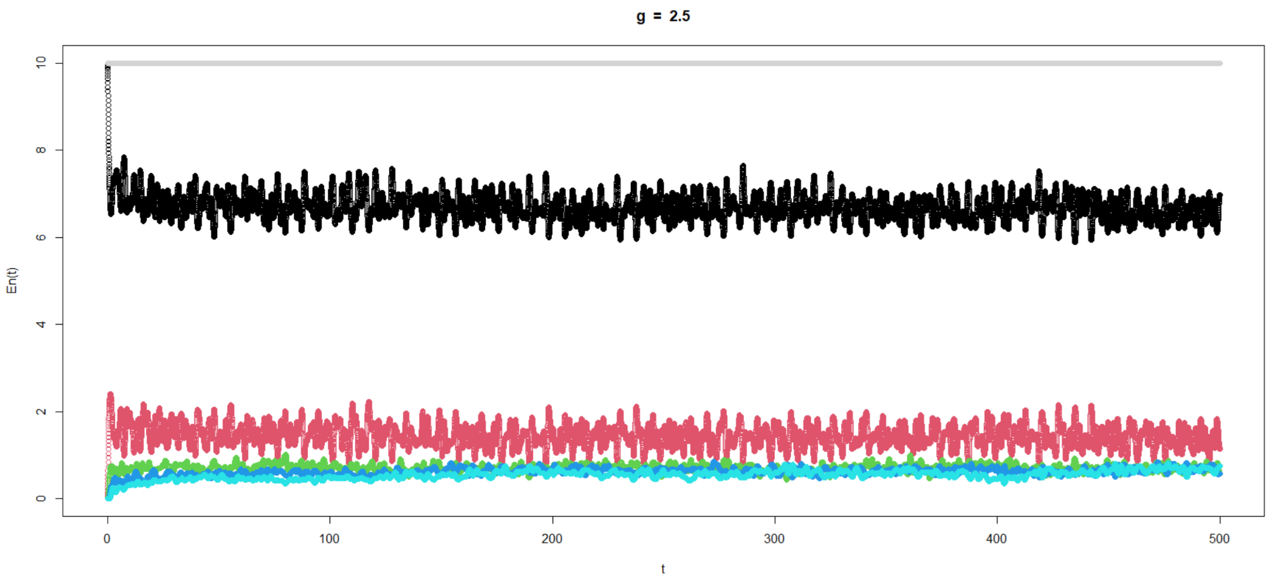

g = 0.1
En(t)
t
0
2
4
6
8
10
0
100
200
300
400
500

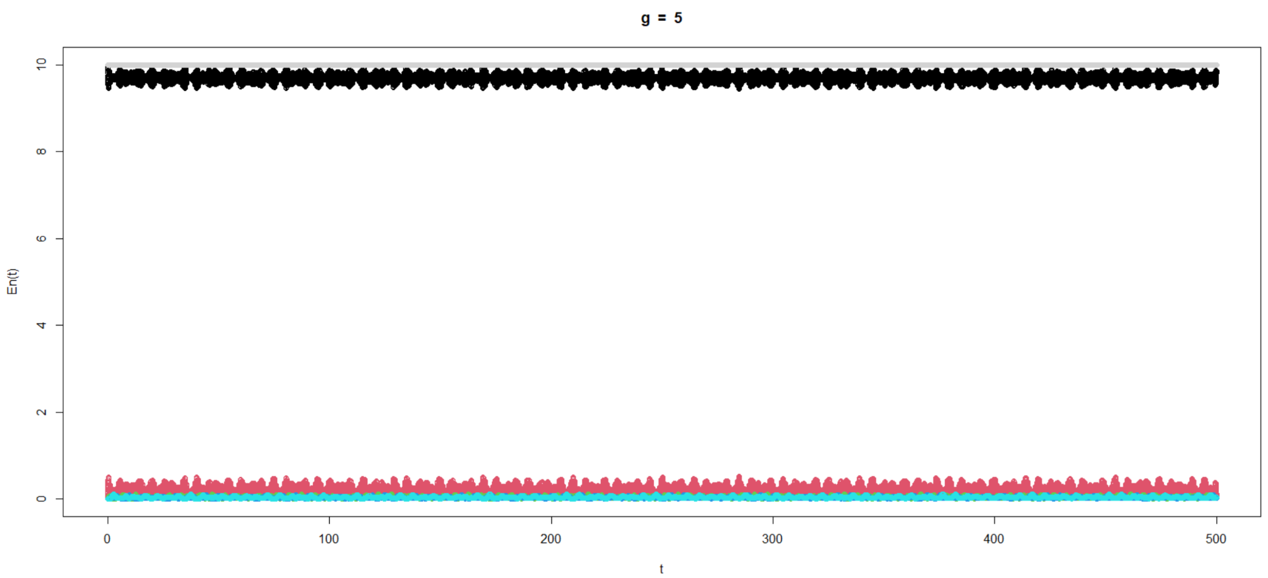

g = 0.5
En(t)
t
0
2
4
6
8
10
100
200
300
400
500


g = 1
En(t)
t
0
2
4
6
8
10
100
200
300
400
500


g = 1.5
En(t)
t
0
2
4
6
8
10
100
200
300
400
500


g = 2
En(t)
10
8
6
4
2
0
0
100
200
300
400
500
t


g = 2.5
En(t)
10
8
6
4
2
0
0
100
200
300
400
500
t


g = 5
En(t)
10
8
6
4
2
0
0
100
200
300
400
500
t