Lösung Blatt 8 - Präsenzaufgaben

December 7, 2011

Aufgabe 1 Mott-Insolator / Superfluid Übergang für bosonische Atome im Gitter

Wir betrachten ein optisches Gitter mit M Plätzen gefüllt mit $N = M$ bosonischen Atomen, welches durch den Bose-Hubbard Hamiltonian in 1D

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=\mathrm{NN}(i)} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^{M} \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) \tag{1}$$

beschrieben wird. Wir nehmen periodische Randbedingungen an.

1. Grundzustand

Superfluider Grundzustand $J > 0, U = 0$

Ohne Wechselwirkung ($U = 0$) sind die bosonischen Atome über das gesamte Gitter delokalisiert. In der Tat ist der Hamiltonian diagonal in den Operatoren $\hat{b}_k = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{j=1}^{M} e^{-ikj} \hat{a}_j$:

$$\hat{H}(U = 0) = \sum_k \omega_k \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{1}{2} \right) \tag{2}$$

mit $\omega_k = -2J \cos k$. Im Grundzustand sammeln sich alle **Bosonen** im Zustand mit der niedrigsten Energie, d.h., im $k = 0$-Zustand. Demnach kann man diesen schreiben als

$$|\mathrm{GZ}, U = 0\rangle = \frac{(\hat{b}_0^\dagger)^M}{\sqrt{M!}} |0\rangle \tag{3}$$

$$= \frac{1}{M^{M/2} \sqrt{M!}} (\sum_j \hat{a}_j^\dagger)^M |0\rangle \tag{4}$$

wobei $|0\rangle$ den Vakkuum Zustand, d.h., den Zustand mit Null Bosonen bezeichnet.

Mott-Insolator Grundzustand $J = 0, U > 0$

Für verschwindendes Hüpfmatrixelement $J = 0$ sind die Bosonen natürlich auf ihren jeweiligen Gitterplatz festgelegt. Demnach diagonalisieren die Besetzungszahloperatoren $\hat{n}_i$ den Hamiltonian

$$\hat{H}(J = 0) \quad = \quad \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \tag{5}$$

Um die Wechselwirkungsenergie zu minimieren (repulsive Wechselwirkung mit $U > 0$) müssen wir die Bosonen so homogen als möglich verteilen. In unserem Fall $M = N$ platzieren wir also auf jedem Gitterplatz ein Boson. Der Grundzustand lässt sich nun einfach schreiben als

$$|\mathrm{GZ}, J = 0\rangle \quad = \quad \prod_{j=1}^{M} \hat{a}_j^\dagger |0\rangle. \tag{6}$$

Impulsverteilung

Zunächst stellen wir fest, dass $\langle \hat{n}_k \rangle = \frac{1}{M} \sum_{mn} e^{ik(n-m)} \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle$. Demnach müssen wir die Einteilchendichtematrix $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle$ berechnen.

Mott-Isolator Grundzustand

Im Mott-Isolator Grundzustand ist

$$\begin{aligned} & \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle \\ = \quad & \langle 0| \prod_i \hat{a}_i (\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n) \prod_j \hat{a}_j^\dagger |0\rangle \\ = \quad & \delta_{mn} \end{aligned} \tag{7}$$

und somit $\langle \hat{n}_k \rangle = \frac{1}{M} \sum_{mn} e^{ik(n-m)} \delta_{mn} = 1$. Da die Position der Teilchen im Gitter festgelegt ist, ist deren Impuls vollständig unbestimmt.

Superfluider Grundzustand

Die Impulsverteilung im Superfluiden Grundzustand ist einfach $\langle \hat{n}_k \rangle = M\delta_{k0}$ (siehe oben). Dies folgt aus der Einteilchendichtematrix

$$\begin{aligned} & \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle \\ = \quad & \frac{1}{M} \sum_{k,k'} e^{-ikm+ik'n} \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} \rangle \\ = \quad & 1. \end{aligned} \tag{8}$$

Aufgabe 2 Coulombwechselwirkung

Ziel ist es das Volumenintegral $V_{\vec{q}} = \int d^3\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} V(\vec{r})$ mit $V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-r/\xi}$ zu berechnen. Das Potential ist sphärisch symmetrisch. Demnach ist $V_{\vec{q}} = V_q$ und wir setzen der Einfachheit halber $\vec{q} = q\hat{e}_z$ und wechseln in Kugelkoordinaten $d\theta/d\cos\theta = -\frac{1}{\sin\theta}$

$$
\begin{aligned}
\frac{V_{\vec{q}}}{e^2} &= 2\pi \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta\, r^2 \sin\theta\, \frac{e^{-iqr\cos\theta}}{r} e^{-r/\xi} \\
&= 2\pi \int_0^\infty dr \int_{-1}^1 d\cos\theta\, r e^{-iqr\cos\theta} e^{-r/\xi} \\
&= 2\pi \int_0^\infty dr\, \frac{e^{-iqr} - e^{iqr}}{-iq} e^{-r/\xi} \\
&= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr\, \sin(qr) e^{-r/\xi} \\
&= \frac{4\pi}{q^2 + \xi^{-2}}. \qquad (9)
\end{aligned}
$$