Lösung Blatt 8 - Hausaufgaben

December 7, 2011

Aufgabe 3 Expansion

Wir betrachten die freie Expansion einer Atomwolke. Die Expansion selber wird hierbei durch die freie Green's Funktion G beschrieben, so dass

$$\hat{\psi}(\vec{r},t) \quad = \quad \int d^3\vec{r}\, G(\vec{r}-\vec{r}',t)\hat{\psi}(\vec{r}',0). \tag{1}$$

Anfänglich sei das System im **Mott-Isolator** Zustand eines optischen Gitters (welches bei $t = 0$ abgeschaltet wird), $|\Psi\rangle = \prod_{j=1}^{M} \hat{a}_j^\dagger|0\rangle$ (wobei $|0\rangle$ das Vakuum mit null Bosonen bezeichnet). Die Operatoren $\hat{a}_j^\dagger$ erzeugen hierbei ein Atom in einem Orbital [von der Form $\phi(\vec{r})$] um den j-ten Gitterplatz $\vec{R}_j$:

$$\hat{a}_j^\dagger \quad \equiv \quad \int d^3\vec{r}\, \phi(\vec{r}-\vec{R}_j)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}). \tag{2}$$

Im Mott-Isolator Zustand ist die relative Phase zwischen den Atomen des Gitters (hier eines pro Gitterplatz) **unbestimmt**. Demnach werden wir nun zeigen, dass in der Dichte $\langle\hat{\psi}^\dagger(\vec{r},t)\hat{\psi}(\vec{r},t)\rangle$ **keine Interferenzterme** auftauchen, welche von interferierenden Atomen ursprünglich **verschiedener** Gitterplätze stammen.

Im ersten Schritt betrachten wir hierzu $\langle\Psi|\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1,0)\hat{\psi}(\vec{r}_2,0)|\Psi\rangle$. Mit Hilfe von Eq. (2) erhalten wir

$$\begin{aligned}\langle\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1,0)\hat{\psi}(\vec{r}_2,0)\rangle \quad &= \quad \langle 0|\prod_{i=1}^{M}\hat{a}_i\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)\hat{\psi}(\vec{r}_2)\prod_{j=1}^{M}\hat{a}_j^\dagger|0\rangle \\ &= \quad \langle\prod_i\int d^3\vec{r}_i'\,\phi^*(\vec{r}_i'-\vec{R}_i)\hat{\psi}(\vec{r}_i')\left(\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)\hat{\psi}(\vec{r}_2)\right)\prod_j\int d^3\vec{r}_j''\,\phi(\vec{r}_j''-\vec{R}_j)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_j'')\rangle\end{aligned} \tag{3}$$

Nun müssen wir von der Annahme gebrauch machen, dass die Orbitale verschiedener Plätze **nicht überlappen**[1], d.h. $\phi^*(r-R_i)\phi(r-R_j) = 0$ für $i \neq j$. Als Konsequenz geben die Mehrfachintegrale

[1] Im Bose-Hubbard Model (siehe Präsenzaufgabe) des optischen Gitters übersetzt sich dieser verschwindende Überlapp in eine verschwindende Hüpfamplitude $J = 0$.

nur dann Beiträge, falls jeweils alle $\vec{r}'_i$ und $\vec{r}''_j$ in Eq. (3) **verschieden** sind. Wir können also z.B. den Operator $\hat{\psi}(\vec{r}_2)$ so lange nach rechts durchtauschen bis zum Orbital j^* für das gilt $\phi(\vec{r}_2 - R_{j^*}) \neq 0$. Analog verfahren wir mit dem Operator $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)$ (diesen tauschen wir jedoch nach links). Dann erhalten wir

$$
\begin{aligned}
&\langle \prod_i \int d^3\vec{r}'_i \, \phi^*(\vec{r}'_i - \vec{R}_i)\hat{\psi}(\vec{r}'_i) \left(\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)\hat{\psi}(\vec{r}_2)\right) \prod_j \int d^3\vec{r}''_j \, \phi(\vec{r}''_j - \vec{R}_j)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}''_j)\rangle \\
= &\Big\langle \int d^3\vec{r}'_{i*} \, \phi^*(\vec{r}'_{i*} - \vec{R}_{i*})\hat{\psi}(\vec{r}'_{i*})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \prod_{i\neq i*} \int d^3\vec{r}'_i \, \phi^*(\vec{r}'_i - \vec{R}_i)\hat{\psi}(\vec{r}'_i) \times \\
&\prod_{j\neq j*} \int d^3\vec{r}''_j \, \phi(\vec{r}''_j - \vec{R}_j)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}''_j) \int d^3\vec{r}''_{j*} \, \phi(\vec{r}''_{j*} - \vec{R}_{j*})\hat{\psi}(\vec{r}_2)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}''_{j*}) \Big\rangle \\
= &\int d^3\vec{r}'_{i*} \, \phi^*(\vec{r}'_{i*} - \vec{R}_{i*}) \int d^3\vec{r}''_{j*} \, \phi(\vec{r}''_{j*} - \vec{R}_{j*}) \underbrace{\langle 0|\hat{\psi}(\vec{r}'_{i*})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)}_{\delta(\vec{r}'_{i*} - \vec{r}_1)\langle 0|} \prod_{i\neq i*} \hat{a}_i \prod_{j\neq j*} \hat{a}^\dagger_j \underbrace{\hat{\psi}(\vec{r}_2)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}''_{j*})|0\rangle}_{|0\rangle\delta(\vec{r}''_{j*} - \vec{r}_2)} \qquad (4) \\
= &\phi^*(\vec{r}_1 - \vec{R}_{i*})\phi(\vec{r}_2 - \vec{R}_{j*})\langle 0| \prod_{i\neq i^*} \hat{a}_i \prod_{j\neq j^*} \hat{a}^\dagger_j |0\rangle \qquad (5)
\end{aligned}
$$

Der entscheidende Punkt ist nun, dass

$$
\begin{aligned}
\langle 0| \prod_{i\neq i^*} \hat{a}_i \prod_{j\neq j^*} \hat{a}^\dagger_j |0\rangle &= \langle 0|\hat{a}_{j^*} \underbrace{\left(\prod_{i\neq i^*, j^*} \hat{a}_i \hat{a}^\dagger_i\right)}_{1} \hat{a}^\dagger_{i^*}|0\rangle \\
&= \delta_{i^* j^*} \qquad (6)
\end{aligned}
$$

und somit $\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, 0)\hat{\psi}(\vec{r}_2, 0)\rangle = \phi^*(\vec{r}_1 - R_{i^*})\phi(\vec{r}_2 - R_{i^*})$. Dies können wir übersichtlich notieren:

$$
\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, 0)\hat{\psi}(\vec{r}_2, 0)\rangle = \sum_j \phi^*(\vec{r}_1 - R_j)\phi(\vec{r}_2 - R_j). \qquad (7)
$$

Mit diesem Ergebnis können wir Atomedichte leicht berechnen. Mit Eq. (9) erhalten wir

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}, t)\rangle &= \int d^3\vec{r}' \int d^3\vec{r}'' \, G^*(\vec{r} - \vec{r}', t)G(\vec{r} - \vec{r}'', t)\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', 0)\hat{\psi}(\vec{r}'', 0)\rangle \\
&= \sum_j \int d^3\vec{r}' G^*(\vec{r} - \vec{r}', t)\phi^*(\vec{r}' - \vec{R}_j) \int d^3\vec{r}'' \, G(\vec{r} - \vec{r}'', t)\phi(\vec{r}'' - \vec{R}_j) \\
&= \sum_j \left| \int d^3\vec{r}' \, G(\vec{r} - \vec{r}', t)\phi(\vec{r}' - \vec{R}_j)\right|^2. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

Die Atom-Dichte ist damit einfach die Summe der Dichten $\left|\int d^3\vec{r}' \, G(\vec{r} - \vec{r}', t)\phi(\vec{r}' - \vec{R}_i)\right|^2$ pro Atom startend von Gitterplatz j.

Aufgabe 4 Bose-Hubbard-Modell mit 2 Plätzen und 2 Teilchen

Nun betrachten wir das BH-Modell mit 2 Teilchen/Plätzen. Zunächst stellen wir den Hamiltonoperator

$$\hat{H} \quad = \quad -J(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) + \frac{U}{2}\sum_{j=1}^{2} \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1) \tag{9}$$

in der Besetzungszahlbasis $\{|0,2\rangle, |1,1\rangle, |2,0\rangle\}$ dar. Man erhält

$$\hat{H} \quad = \quad \begin{bmatrix} U & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & U \end{bmatrix} \tag{10}$$

Dies ist der Hamiltonian von drei Leveln mit Energien U, 0 und U, wobei die Level $(1,2)$ und $(2,3)$ miteinander gekoppelt sind. Eine ähnliche Matrix tritt bei der Kopplung dreier Oszillatoren auf (dort jedoch als Einteilchen Hamiltonmatrix) (siehe Übungsblatt 5, Aufgabe 4). Derselben Strategie folgend konstruieren wir nun die Eigenvektoren indem wir deren Orthogonalität verwenden.

Der erste Eigenzustand $|\alpha_1\rangle$ ist offensichtlich auch hier $[1/\sqrt{2}, 0, -1/\sqrt{2}]$ mit Eigenergie U. Die restlichen Eigenzustände $|\alpha_2\rangle$ und $|\alpha_3\rangle$ müssen orthogonal zu $|\alpha_1\rangle$ sein. Dies führt zu der Bedingung $\langle\alpha_j|0,2\rangle = \langle\alpha_j|2,0\rangle$ für $j = 2,3$. Machen wir nun den Ansatz $[\alpha, \beta_j, \alpha]$ für $|\alpha_j\rangle$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} U & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta_j \\ \alpha \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha U - \sqrt{2}J\beta_j \\ -2\sqrt{2}J\alpha \\ U\alpha - \sqrt{2}J\beta_j \end{bmatrix} \\ &= (U - \sqrt{2}J\frac{\beta_j}{\alpha}) \begin{bmatrix} \alpha \\ \frac{-2\sqrt{2}J\alpha^2}{\alpha U - \sqrt{2}J\beta_j} \\ \alpha \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{11}$$

und damit die Bedingung $\frac{-2\sqrt{2}J}{U - J\sqrt{2}\beta_j/\alpha} \stackrel{!}{=} \beta_j/\alpha$, bwz.

$$\left(\frac{\beta_j}{\alpha}\right)^2 - \left(\frac{\beta_j}{\alpha}\right)\frac{U}{\sqrt{2}J} - 2 \quad = \quad 0, \tag{12}$$

woraus folgt, dass

$$\frac{\beta_j}{\alpha} \quad = \quad \frac{U}{2\sqrt{2}J} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{U^2}{2J^2} + 8}. \tag{13}$$

Die Eigenzustände des Systems sind also gegeben durch

$$|\alpha_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |\alpha_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{U}{2\sqrt{2}J} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{U^2}{2J^2} + 8} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\alpha_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{U}{2\sqrt{2}J} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{U^2}{2J^2} + 8} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{14}$$

mit dazugehörigen Eigenenergien

$$\frac{E_1}{U} = 1 \quad , \quad \frac{E_{2,3}}{U} = \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{16J^2}{U^2} + 1}. \tag{15}$$