Übungen zur Vorlesung Quantenmechanik II

Wintersemester 2013/14, Universität Erlangen-Nürnberg, Dozent: Prof. Florian Marquardt

Blatt 8 - Abgabetermin: Mittwoch, 11.12.2013, in der Vorlesung

Exercises for the course Quantum Mechanics II

Winter term 2013/14, Universität Erlangen-Nürnberg, Prof. Florian Marquardt

Sheet 8 - Deadline: Wednesday, 11.12.2013, during the lecture

Präsenzübungen (Exercises during the tutorial)

Allgemeiner Hinweis: Fertigen Sie so oft wie möglich saubere Skizzen an, in denen auch wesentliche Längen, Frequenzen, Periodizitäten etc. vermerkt sind. Überlegen Sie sich selbst weitergehende Fragestellungen.

General hint: Whenever possible, always make clear sketches that include essential length and frequency scales, periodicities etc. Also think about other possible questions.

1. Mott-Isolator / Superfluid Übergang für bosonische Atome im Gitter

Man kann heutzutage Wolken von Atomen auf sehr tiefe Temperaturen abkühlen und diese Atome in Lichtgittern ("optischen Gittern") fangen. Dort springen sie von Gitterplatz zu Gitterplatz und wechselwirken miteinander. Für bosonische Atome wird diese Situation oft sehr gut beschrieben durch das sogenannte "Bose-Hubbard-Modell",

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

wobei $\hat{n}_j = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$ die Besetzungszahl eines Gitterplatzes j ist, die Summen über alle Gitterplätze laufen, und "$j = NN(i)$" bedeuten soll, dass die j-Summe über alle nächsten Nachbarplätze von i läuft. Das Gitter ist normalerweise in 2D oder 3D, aber Sie können sich hier der Einfachheit halber ein 1D Gitter vorstellen, mit M Plätzen und periodischen Randbedingungen. Es sei hier $N \equiv \langle \sum_i \hat{n}_i \rangle = M$ (im Mittel ein Atom pro Platz).

(1.) Überlegen Sie sich: Wie sieht der Grundzustand des Systems aus für (a) $J > 0, U = 0$ (keine Wechselwirkung) und (b) $J = 0, U > 0$ (nur Wechselwirkung, kein Hüpfen). Der Zustand für (a) ist ein einfacher Idealfall eines Bose-Einstein-Kondensats, der Zustand für (b) ist ein einfacher Idealfall des sogenannten "Mott-Isolators". Wie schreibt man den jeweiligen Zustand hin als ein Produkt von Operatoren, die auf das "Vakuum" (den 0-Teilchen-Zustand) wirken?

(2.) Die Struktur des Zustandes im Experiment kann festgestellt werden durch ein sogenanntes Expansionsexperiment, bei dem plötzlich das optische Gitter ausgeschaltet wird und die Wolke von Atomen frei expandiert. Überzeugen Sie sich davon, dass man klassisch nach hinreichend langer Expansionszeit in der Dichteverteilung $\rho(\vec{r})$ im Ortsraum ein Abbild der ursprünglichen Geschwindigkeitsverteilung sieht. So ist das auch quantenmechanisch. Berechnen Sie deshalb die Impulsverteilung der Atome auf dem Gitter, also

$$\left\langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \right\rangle$$

mit $\hat{b}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} \hat{a}_j$. Welchen Unterschied sieht man hier zwischen Bose-Einstein-Kondensat und Mott-Isolator? Zeigen Sie allgemein, dass diese Impulsverteilung von der sogenannten Einteilchendichtematrix $\left\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right\rangle$ abhängt, und diskutieren Sie, wie diese für die Fälle (a) und (b) aussieht.

1. Mott-insulator/superfluid transition for bosonic atoms on a lattice

Nowadays, it is possible to cool down atom clouds to ultralow temperatures and trap them in lattices formed by standig waves of light ("optical lattices"). There, they hop from site to site and interact with each other. For bosonic atoms this situation is often very well described by the so-called Bose-Hubbard model,

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

where $\hat{n}_j = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$ is the occupation number of site j, the i-sums run over all sites, and "$j = NN(i)$" means that the j-sum runs over the nearest neighbor of site i. The lattice is usually a 2D or 3D lattice but here, for simplicity, you can think of a 1D lattice with M sites and periodic boundary conditions. Moreover, we consider $N \equiv \langle \sum_i \hat{n}_i \rangle = M$ (on average one atom per site).

(1.) Which is the system groundstate for (a) $J > 0$, $U = 0$ (no interaction) and (b) $J = 0, U > 0$ (only interaction, no hopping). In the simple ideal case, the groundstate for (a) is a simple Bose-Einstein condensate, whereas the groundstate for (b) is a Mott insulator. How can the corresponding states be written as a product of operators that act on the "Vacuum" (the 0-particle state)?

(2.) The structure of the groundstate can be experimentally verified by means of a so-called expansion experiment. In such an experiment, the optical lattice is suddenly switched-off and the atom cloud expands freely. Convince yourself that, in a classical framework and after a long enough expansion, one can extract from the classical density distribution $\rho(\vec{r})$ in position space the original velocity distribution. This is the case also in a quantum mechanical framework. Compute therefore the momentum distribution of the atoms in the lattice, that is

$$\left\langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \right\rangle$$

with $\hat{b}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} \hat{a}_j$. Which is the difference between a Bose-Einstein condensate and a Mott insulator? In the general case, show that the momentum distribution depends on the socalled single-particle density matrix $\left\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right\rangle$, and discuss how the latter looks like for the cases (a) and (b).

2. Coulomb-Wechselwirkung

Betrachten Sie die Coulomb-Wechselwirkung in 3D, also

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{|\vec{r}|} e^{-|\vec{r}|/\xi}$$

Hierbei haben wir noch eine Abschirmlänge ξ eingeführt, die in vielen physikalischen Situationen auftritt (z.B. für Ladungen in der Nähe eines Metalls oder *in* einem Metall) und uns die Rechnung erleichert. Die normale Coulomb-WW wird für $\xi \to \infty$ erhalten. Berechnen Sie das Impulsmatrixelement für den Impulsübertrag $\vec{q}$, also

$$V_{\vec{q}} = \int d^3\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} V(\vec{r}) \,.$$

2. Coulomb interaction

Consider the Coulomb interaction in 3D, that is

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{|\vec{r}|} e^{-|\vec{r}|/\xi}$$

Here, we have introduced the screening length ξ that appears in many physical situations (e.g. for charges close to a metal or inside a metal) and makes the calculation easier. The standard Coulomb interaction is recovered in the limit $\xi \to \infty$. Compute the momentum matrix element for the momentum transfer $\vec{q}$, that is

$$V_{\vec{q}} = \int d^3\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} V(\vec{r})\,.$$

Hausaufgabe (Homework)

3. Expansion

Betrachten Sie wieder die Expansion einer Atomwolke. Sei die Greensfunktion für die freie Expansion gegeben, so dass also

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

Es sei der Anfangszustand ein Mott-Isolator, bei dem auf jedem Orbital sich genau ein Atom befinde:

$$|\Psi\rangle = (\Pi_{j=1}^{M} \hat{a}_j^\dagger)\,|0\rangle$$

mit dem Operator, welcher ein Teilchen im Orbital j erzeugt (welches um $\vec{R}_j$ herum zentriert ist, so dass die einzelnen Orbitale, von der Form $\phi(\vec{r})$, nicht überlappen):

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

Zeigen Sie: Die Dichte $\left\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r},t)\hat{\psi}(\vec{r},t)\right\rangle$ zeigt keine Interferenz zwischen den Beiträgen von den einzelnen Plätzen. Hinweis: Es ist nützlich, sich zuerst zu überlegen, wie $\left\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1,0)\hat{\psi}(\vec{r}_2,0)\right\rangle$ aussieht.

3. Expansion

Consider again the expansion of an atom cloud. Assume that the Green function of the free expansion defined as

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

is known. The initial state is a Mott insulator with exactly one atom in each orbital:

$$|\Psi\rangle = (\Pi_{j=1}^{M} \hat{a}_j^\dagger)\,|0\rangle$$

where the operator $\hat{a}_j^\dagger$ which creates a particle in orbital j (centered around $\vec{R}_j$, the single orbitals have all the form $\phi(\vec{r})$ but do not overlap) is:

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

Show that: the density $\left\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r},t)\hat{\psi}(\vec{r},t)\right\rangle$ shows no interference between contributions from different sites. Tip: It is helpful to first think how $\left\langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1,0)\hat{\psi}(\vec{r}_2,0)\right\rangle$ looks like.

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

Überlegen Sie sich, wie explizit der Hamiltonoperator in der Besetzungszahlbasis $|1,1\rangle$, $|2,0\rangle$, $|0,2\rangle$ aussieht, d.h. wie man ihn als 3×3-Matrix schreiben würde. Dabei nehmen wir einmal keine periodischen Randbedingungen an, sondern es gibt nur ein Hüpfmatrixelement $-J$ vom linken zum rechten Platz und umgekehrt. Diagonalisieren Sie diesen Hamiltonoperator. Hinweis: Sie haben schon einmal einen ähnlichen gesehen.

4. Bose-Hubbard Model with two sites and two particles

How does the Hamilton operator in the occupation-number basis $|1,1\rangle$, $|2,0\rangle$, $|0,2\rangle$ look like. In other words, how does one represent it as 3×3 matrix. This time, we do not assume periodic boundary conditions but rather that there is only one hopping matrix element $-J$ from the left to the right and vice-versa. Diagonalize this Hamilton operator. Tip: you have already encountered once a similar Hamiltonian.