Blatt 9 Lösung der Präsenzübung

1.) Gutzwiller-Ansatz für den MI-SF Übergang

Die Wellenfunktion

$$|\Psi\rangle = \prod_j \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} f_n \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_j^+)^n \right\} |0\rangle$$

ist ein geeigneter Ansatz um den Mott-Isolator / Suprafluid Übergang zu beschreiben, da beide Grenzfälle reproduziert werden können.

Mott-Isolator mit m Teilchen pro Gitterplatz : $f_m = 1$, $f_n = 0 \quad \forall n \neq m$

Suprafluid (kohärenter Zustand) : $f_n = e^{-|\alpha|^2/2} \cdot \alpha^n$

(1) Im Folgenden benutzen wir die Relationen

$$\hat{a}_i (\hat{a}_j^+)^n = (\delta_{ij} + \hat{a}_j^+ \hat{a}_i)(\hat{a}_j^+)^{n-1}$$

$$= 2\delta_{ij} (\hat{a}_j^+)^{n-1} + (\hat{a}_j^+)^2 \hat{a}_i (\hat{a}_j^+)^{n-2}$$

$$\underset{\substack{n\text{-maliges} \\ \text{Vertauschen}}}{=} n\delta_{ij} (\hat{a}_j^+)^{n-1} + (\hat{a}_j^+)^n \hat{a}_i$$

Analog gilt:

$$(\hat{a}_j)^n \hat{a}_i^+ = n\delta_{ij} (\hat{a}_j)^{n-1} + \hat{a}_i^+ (\hat{a}_j)^n$$

Damit ergibt sich für $\langle\Psi|\hat{a}_j^+ a_i|\Psi\rangle$

$$= \langle 0| \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f_n^*}{\sqrt{n!}} \left(n\,\hat{a}_j^{\,n-1} + \overbrace{\hat{a}_j^+ \hat{a}_j^{\,n}}^{A} \right) \right\} \prod_{k\neq j} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f_n^*}{\sqrt{n!}} \hat{a}_k^{\,n} \right\}$$

$$\cdot \prod_{l\neq i} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f_m}{\sqrt{m!}} \hat{a}_l^{+\,m} \right\} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f_m}{\sqrt{m!}} \left(\hat{a}_i^{+\,m-1} \cdot m + \underbrace{\hat{a}_i^{+\,m}\,\hat{a}_i}_{B} \right) \right\} |0\rangle$$

Die Terme A und B können weggelassen werden, da

$$\ldots\ \hat{a}_i\,|0\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle 0|\,\hat{a}_j^+ \ldots = 0 .$$

Wir gruppieren die Terme nun so, dass wir Erzeuger und Vernichter an einem Gitterplatz zusammenfassen.

<u>für $i\neq j$:</u>

$$= \langle 0| \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^*}{\sqrt{n!}} \frac{f_m}{\sqrt{m!}} \cdot n\, \hat{a}_j^{\,n-1}\, \hat{a}_j^{+\,m} \right\}$$

$$\cdot \prod_{l\neq i,j} \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^*}{\sqrt{n!}} \frac{f_m}{\sqrt{m!}} \hat{a}_l^{\,n}\, \hat{a}_l^{+\,m} \right\}$$

$$\cdot \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^*}{\sqrt{n!}} \frac{f_m}{\sqrt{m!}} \cdot m\, \hat{a}_i^{\,n}\, a_i^{+\,m-1} \right\} |0\rangle$$

Da es jeweils nur einen Term gibt der auf einem bestimmten Gitterplatz Teilchen erzeugt und vernichtet gilt

$$\hat{a}_k^{\,n}\, \hat{a}_k^{+\,m} = \delta_{nm} \cdot n!$$

$\longrightarrow \quad \langle\psi|\hat{a}_j^{+} a_i|\psi\rangle$

$$= \underbrace{\left(\sum_{m=0}^{\infty} f_{m+1}^{*} f_m \underbrace{\frac{(m+1)\, m!}{\sqrt{m!\,(m+1)!}}}_{=\sqrt{m+1}} \right)}_{=:\alpha} \cdot \underbrace{\prod_{\ell\neq i,j} \left\{ \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} |f_n|^2}_{=1} \right\}}_{=1} \cdot \underbrace{\left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n^{*} f_{n+1} \underbrace{\frac{n!\,(n+1)}{\sqrt{n!\,(n+1)!}}}_{=\sqrt{n+1}} \right)}_{=:\alpha^{*}}$$

$$= \underline{|\alpha|^2}$$

für $i \neq j$ ergibt sich:

$\langle\psi|\hat{n}_i|\psi\rangle$

$$= \langle 0| \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^{*} f_m}{\sqrt{n!\,m!}} \, n \cdot m \, \hat{a}_i^{\,n-1} \hat{a}_j^{\,n-1} \right\} \prod_{\ell \neq j} \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^{*} f_m}{\sqrt{n!\,m!}} \, \hat{a}_\ell^{\,n} \hat{a}_\ell^{+m} \right\} |0\rangle$$

$$= \left(\sum_{n=0}^{\infty} n\, |f_n|^2 \right) \prod_{\ell\neq j} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} |f_n|^2 \right\} = \underline{\sum_{n=0}^{\infty} n\, |f_n|^2}$$

Fasst man für $\langle\psi|\hat{n}_i^2|\psi\rangle$ wieder die Erzeuger und Vernichter an einem Gitterplatz zusammen, so gilt:

$\langle\psi|\hat{n}_i^2|\psi\rangle$

$$= \langle 0| \prod_{\ell \neq i} \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^{*}}{\sqrt{n!}} \frac{f_m}{\sqrt{m!}} \hat{a}_\ell^{\,n} \hat{a}_\ell^{+m} \right\} \cdot \left\{ \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{f_n^{*} f_m}{\sqrt{n!\,m!}} \underbrace{\hat{a}_i^{\,n} \hat{a}_i^{+} \hat{a}_i \hat{a}_i^{+} \hat{a}_i \hat{a}_i^{+m}}_{= m^2 \hat{a}_i^{\,n} \hat{a}_i^{+m}} \right\} |0\rangle$$

Wie vorher gilt $\hat{a}_k^{\,n} \hat{a}_k^{+m} = \delta_{nm} \cdot n!$

$$= \langle 0| \prod_{l\neq i} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} |f_n|^2 \right\} \cdot \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} n^2 |f_n|^2 \right\} |0\rangle = \underline{\sum_{n=0}^{\infty} n^2 |f_n|^2}$$

(2)

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \mu \langle \psi | \sum_j \hat{n}_j | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | -J \sum_i \sum_{j=NN(i)} \hat{a}_j^+ a_i + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) | \psi \rangle - \mu \sum_j \langle \psi | \hat{n}_j | \psi \rangle$$

Sei M die Anzahl der Gitterplätze und z die Anzahl der nächsten Nachbarn (Annahme periodischer Randbedingungen).

$$= -J z M |\alpha|^2 + \frac{U}{2} M \cdot \left(\sum_{n=0}^{\infty} n^2 |f_n|^2 - \sum_{n=0}^{\infty} n |f_n|^2 \right) - M\mu \sum_{n=0}^{\infty} n |f_n|^2$$

$$= UM \left\{ - z \frac{J}{U} |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} (n^2 - n) |f_n|^2 - \frac{\mu}{U} \sum_{n=0}^{\infty} n |f_n|^2 \right\}$$

(3) Der Mott-Isolator ist stabil, wenn das großkanonische Potential als Funktion von δ_+, δ_- ein Minimum bei $\delta_+ = \delta_- = 0$ hat.

$$f_m = 1 - \frac{\delta_+^2 + \delta_-^2}{2}, \quad f_{m+1} = \delta_+, \quad f_{m-1} = \delta_-, \quad f_n = 0 \quad \forall n \neq m, m-1, m+1$$

$$\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} |f_n|^2 = \delta_-^2 + \left(1 - \frac{\delta_+^2 + \delta_-^2}{2}\right)^2 + \delta_+^2 = 1 + \mathcal{O}(\delta_{+,-}^4)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n |f_n|^2 = m \left(1 - \frac{\delta_+^2 + \delta_-^2}{2}\right)^2 + (m+1)\delta_+^2 + (m-1)\delta_-^2$$

$$= m + \delta_+^2 - \delta_-^2 + \mathcal{O}(\delta_{+,-}^4)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n^2-n)\,|f_n|^2 = (m^2-m)\left(1-\frac{\delta_+^2+\delta_-^2}{2}\right)^2 + \left\{(m+1)^2-(m+1)\right\}\delta_+^2 + \left\{(m-1)^2-(m-1)\right\}\delta_-^2$$

$$= (m^2-m) + \delta_+^2\left(-m^2+m+(m+1)^2-(m+1)\right) + \delta_-^2\left(-m^2+m+(m-1)^2-(m-1)\right) + \mathcal{O}(\delta_{+,-}^4)$$

$$= m^2-m + \delta_+^2\, 2m + \delta_-^2(-2m+2)$$

$$|\kappa|^2 = \left[\left(1-\frac{\delta_+^2+\delta_-^2}{2}\right)\left\{\sqrt{m+1}\,\delta_+ + \sqrt{m}\,\delta_-\right\}\right]^2$$

$$= (m+1)\,\delta_+^2 + m\,\delta_-^2 + 2\sqrt{m(m+1)}\,\delta_+\delta_- + \mathcal{O}(\delta_{+,-}^3)$$

Damit ergibt sich

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \mu\,\langle\psi|\sum_j n_j|\psi\rangle$$

$$= UM\Big\{-\gamma\frac{J}{U}\left[(m+1)\,\delta_+^2 + m\,\delta_-^2 + 2\sqrt{m(m+1)}\,\delta_+\delta_-\right] + \frac{1}{2}\left[m^2-m+\delta_+^2\,2m-(2m-2)\delta_-^2\right] - \frac{\mu}{U}\left[m+\delta_+^2-\delta_-^2\right]\Big\} + \mathcal{O}(\delta_{+,-}^3)$$

$$= UM\Big\{ m\left(\frac{(m-1)}{2}-\frac{\mu}{U}\right) + \delta_+^2\left\{-(m+1)\gamma\frac{J}{U}+m-\frac{\mu}{U}\right\} + \delta_-^2\left\{-m\gamma\frac{J}{U}-(m-1)+\frac{\mu}{U}\right\} + \delta_+\delta_-\left(-2\gamma\sqrt{m(m+1)}\,\frac{J}{U}\right)\Big\} + \mathcal{O}(\delta_{+,-}^3)$$

$$= UM \left\{ m\left(\frac{m-1}{2} - \frac{\mu}{U}\right) + \begin{pmatrix} S_+ \\ S_- \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} -(m+1)\gamma\frac{J}{U} + m - \frac{\mu}{U} & -\gamma\sqrt{m(m+1)}\,\frac{J}{U} \\ -\gamma\sqrt{m(m+1)}\,\frac{J}{U} & -m\gamma\frac{J}{U} - (m-1) + \frac{\mu}{U} \end{pmatrix}}_{=:A} \begin{pmatrix} S_+ \\ S_- \end{pmatrix} \right\}$$

$$+ \mathcal{O}(S_{+,-}^3)$$

Der Mott-Isolator ist stabil, wenn A positive Eigenwerte hat. Der Übergang zum Suprafluid ergibt sich wenn ~~zumindest~~ der kleinere Eigenwert negativ wird.

MI - SF Übergang für $\det A = 0$

$$\rightarrow \left(-(m+1)\gamma\frac{J}{U} + m - \frac{\mu}{U}\right)\left(-m\gamma\frac{J}{U} - (m-1) + \frac{\mu}{U}\right) - \gamma^2 m(m+1)\left(\frac{J}{U}\right)^2 = 0$$

$$\rightarrow -\gamma\frac{J}{U} - \gamma\frac{J}{U}\frac{\mu}{U} - m(m-1) + (2m-1)\frac{\mu}{U} - \left(\frac{\mu}{U}\right)^2 = 0$$

$$\rightarrow \underline{\left[\frac{\mu}{U} - (m-1)\right]\left[m - \frac{\mu}{U}\right] - \gamma\frac{J}{U}\left(\frac{\mu}{U} + 1\right) = 0}$$

Für positive $\frac{\mu}{U}$ findet man für den MI - SF Übergang

- $m - 1 \leq \frac{\mu}{U} \leq m$

  für $\frac{\gamma J}{U} = 0$ gibt es für festes m die Lösungen $\frac{\mu}{U} = m-1$ und $\frac{\mu}{U} = m$

- Wegen $\left(\frac{\mu}{U} - (m-1)\right)\left(m - \frac{\mu}{U}\right) < 1$ gibt es ein maximales $\frac{\gamma J}{U}$, das für größer werdendes m kleiner wird.

MI – SF Übergang im Hubbard-Modell