

BACHELORARBEIT IN PHYSIK

---

**Entwicklung nach zusammenhängenden  
topologischen Graphen  
des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells**

---

von

Philipp Höllmer

Angefertigt im Physikalischen Institut

vorgelegt der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der  
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität  
Bonn

August 2016



# Danksagung

---

Ich danke Herrn Prof. Dr. Monien, der mir die Möglichkeit gegeben hat, in seiner Arbeitsgruppe diese Bachelorarbeit zu schreiben und mir weiterhin ermöglicht hat, ein für mich sehr spannendes Thema zu untersuchen. Weiterhin möchte ich mich für die großartige Hilfe die Physik betreffend bedanken aber auch für die vielen interessanten Gespräche neben der Physik.

Auch Ramsés J. Sánchez Fórnica gegenüber, der immer ein offenes Ohr für jegliche Fragen meinerseits hatte, möchte ich meinen Dank ausdrücken.

Zu guter Letzt danke ich ebenfalls all jenen, die mich immer privat unterstützt haben.

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, .....  
Datum

.....  
Unterschrift

1. Gutachter: Prof. Dr. Hartmut Monien
2. Gutachterin: Prof. Dr. Corinna Kollath



# Inhaltsverzeichnis

---

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretischer Hintergrund</b>	<b>3</b>
2.1	Thermodynamische Größen . . . . .	3
2.2	Suprafluidität . . . . .	4
2.3	Bose-Hubbard-Modell . . . . .	4
2.4	Phasendiagramm des Bose-Hubbard-Modells . . . . .	7
2.4.1	Doppeltopf-Potential . . . . .	7
2.4.2	Supraflüssigkeit . . . . .	8
2.4.3	Mott-Isolator . . . . .	9
2.4.4	Phasendiagramm . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen</b>	<b>13</b>
<b>4</b>	<b>Durchführung der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen</b>	<b>17</b>
4.1	Berechnung der Grundzustandsenergie . . . . .	17
4.1.1	Aufsetzen der Matrixdarstellung von $\hat{H}_0$ . . . . .	18
4.1.2	Aufsetzen der Matrixdarstellung von $\hat{V}$ . . . . .	21
4.1.3	Grundzustandsenergie der einzelnen Graphen . . . . .	23
4.1.4	Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes . . . . .	24
4.1.5	Optimierungen des Programmes . . . . .	25
4.2	Berechnung der Einteilchen- und Einlochanregungsenergie . . . . .	27
4.2.1	Berechnung des effektiven Hamiltonians . . . . .	27
4.2.2	Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen . . . . .	29
4.2.3	Einteilchenanregungsenergie bis zur 3. Ordnung . . . . .	29
4.2.4	Optimierungen des Programmes . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Phasendiagramm des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells</b>	<b>35</b>
<b>6</b>	<b>Ergebnisdiskussion und Ausblick</b>	<b>43</b>
	<b>Literatur</b>	<b>45</b>
<b>A</b>	<b>Alternative Darstellung der isothermen Kompressibilität <math>\kappa_T</math></b>	<b>49</b>
<b>B</b>	<b>Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie einer endlichen Matrix</b>	<b>51</b>
<b>C</b>	<b>CCS-Format</b>	<b>53</b>
<b>D</b>	<b>Störungstheoretische Darstellung einer Matrix als Blockdiagonalmatrix</b>	<b>55</b>

<b>E Berechnete Reihen</b>	<b>57</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>65</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>67</b>

---

## Einleitung

---

Das Bose-Hubbard-Modell wurde 1963 von Gersch und Knollmann eingeführt [1] und stößt bis heute sowohl in der theoretischen als auch in der experimentellen Physik auf großes Interesse.

Als minimales Modell, welches die Konkurrenz zwischen potentieller und kinetischer Energie in sich vereint und somit die grundlegende Physik von wechselwirkenden Bosonen auf einem Gitter beschreiben kann [2], zeigt es höchst interessante physikalische Phänomene. Durch die abstoßende Wechselwirkung der Bosonen untereinander und die durch die Heisenbergsche Unschärfe geschuldete Delokalisierung und daraus folgende Bewegung der Bosonen über die Gitterplätze kommt es selbst bei einer Temperatur von 0 K zu einem Phasenübergang zwischen einer suprafluiden Phase und dem sogenannten Mott-Isolator. Dieser Übergang wurde erstmals 1989 auf theoretischer Grundlage in einem bahnbrechendem Artikel von Fisher et al. behandelt [3].

Nach einer Beschreibung zur experimentellen Verwirklichung durch Jaksch et al. im Jahre 1998 [4] konnte dieser Quantenphasenübergang, welcher durch Quantenfluktuationen und nicht durch thermische Fluktuationen getrieben ist, mithilfe eines ultrakalten Gases in einem periodischen Potential zunächst in drei Dimensionen von Greiner et al. [5] (2002) und wenige Zeit später auch in einer Dimension von Stöferle et al. [6] (2004) bzw. in zwei Dimensionen von Spielman et al. [7] (2007) beobachtet werden. Grundlegend für diese Experimente ist hierbei die Rückreflexion von Lasern in sich selbst. Dies erzeugt optisch stehende Wellen, was zu einem gitterbildenden Potential führt [2], in welches dann ein ultrakaltes Gas bestehend aus Bosonen gefüllt und der Quantenphasenübergang durch Variation des Gitterpotentials beobachtet werden kann. Veranschaulicht sei dies in Abbildung 1.1 für zwei bzw. drei Dimensionen.

Das Bose-Hubbard-Modell, welches nur die Wechselwirkung von Bosonen ohne Spin auf gleichen Gitterplätzen und eine Bewegung nur auf benachbarte Gitterplätze zulässt, sah sich bereits einer Vielfalt von verschiedenen Lösungsmethoden ausgesetzt, angefangen beim *Bethe-Ansatz*, welcher zwar zu keiner exakten aber einer approximativen Lösung dieses Modells führt (siehe Krauth [8]), über Methoden wie ein *Quanten-Monte-Carlo* Algorithmus (siehe z.B. Batrouni und Scarlett [9]), die *Exakte Diagonalisierung* (siehe z.B. Elesin et al. [10]) oder die Nutzung der *Dichte-Matrix Renormierungsgruppe* (siehe z.B. Kühner und Monien [11]), welche jeweils mit endlichen Gittern arbeiten, bis hin zur *Starkkopplungsentwicklung*, die im Limes des unendlich großen Gitters arbeitet. Angewandt auf das Bose-Hubbard-Modell wurde Letztere erstmals 1994 von Freericks und Monien [12, 13], um diese hiernach mithilfe der *Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen* und einer darauffolgenden *Padé-Analyse* weiterzuentwickeln (siehe Elstner und Monien [14]). Diese Arbeit wird die zuletzt erwähnte Methode tiefer behandeln, diese dem Leser verständlich machen und letztendlich die Phänomene des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells in einem Phasendiagramm darstellen. Im Laufe dessen wird der kritische Punkt des Quantenphasenübergangs für drei verschiedene Dichten des Mott-Isolators bestimmt werden.

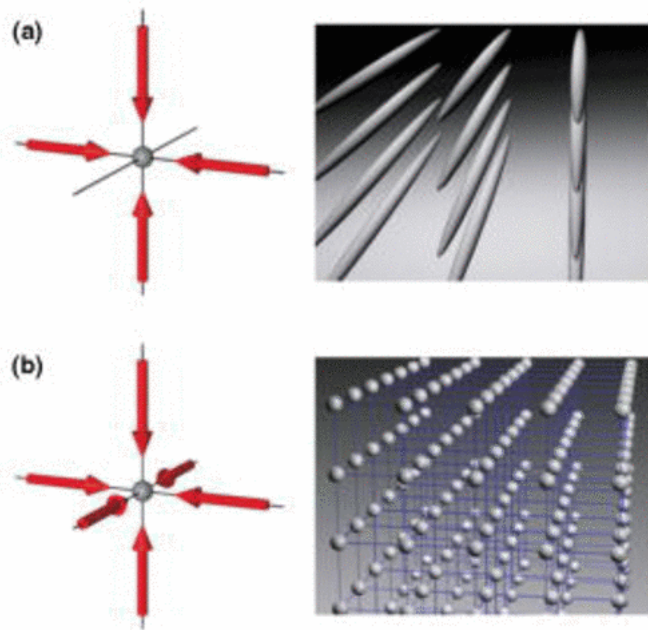


Abbildung 1.1: Durch das Überlappen von zwei bzw. drei optischen stehenden Wellen, welche durch Laser gebildet werden (rote Pfeile), lagern sich die Atome in zwei Dimensionen (a) entlang eindimensionaler Potentialröhren an, während das Potential in drei Dimensionen (b) durch ein kubisches Gitter mit einem Potential eines harmonischen Oszillators an jedem Gitterplatz genähert werden kann. Abbildung aus [2] mit Erlaubnis von Wilhelm Zwerger. Die Abbildung unterliegt dem Copyright (2016) von der American Physical Society.

Die Gliederung gestaltet sich hierbei wie folgt:

- In Kapitel 2 wird kurz auf den theoretischen Hintergrund eingegangen, welcher zum Verständnis dieser Arbeit gebraucht wird. Hierbei handelt es sich um thermodynamische Zusammenhänge und eine kurze Einführung in das Thema der Suprafluidität, bevor das Bose-Hubbard-Modell selber inklusive einer mikroskopischen Ableitung eingeführt wird. Abschließend wird die allgemeine Form des Phasendiagramms diskutiert werden.
- Im Gegensatz dazu führt Kapitel 3 die Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen ein, welche im Laufe der Arbeit zur numerischen Berechnung des Phasendiagramms des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells gebraucht wird.
- Kapitel 4 widmet sich dann der Anwendung der im vorigen Kapitel eingeführten Entwicklung und ausgehend vom Mott-Isolator wird beispielhaft störungstheoretisch zunächst die Grundzustandsenergie und hierauf folgend die Anregungsenergie der sogenannten Einteilchen- und Einlochanregungen berechnet werden. In diesem Kapitel wird des Weiteren darauf eingegangen werden, welche Ideen zur Verbesserung des geschriebenen Programmes verwirklicht wurden.
- Das Kapitel 5 nutzt die exemplarischen Berechnungen aus dem vorigen Kapitel und verallgemeinert diese, sodass das Phasendiagramm des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells gefunden wird. Im Zuge dessen braucht es eine Padé-Analyse und letztendlich kann auch der kritische Punkt des Quantenphasenübergangs bestimmt werden.



## Theoretischer Hintergrund

### 2.1 Thermodynamische Größen

Im Folgenden soll zunächst auf einige thermodynamische Größen eingegangen werden mit dem Ziel einer alternativen Darstellung der isothermen Kompressibilität. Diese Größe wird im Laufe der Analyse des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells benötigt werden. Gefolgt wird der Darstellung in [15]. Die großkanonische Zustandssumme besitzt die folgende Definition:

$$Z_{\text{Gk}} = \text{Tr} \left[ \exp \left( -\frac{\hat{H} - \mu \hat{N}}{k_B T} \right) \right]$$

Hierbei ist  $\hat{H}$  der Hamiltonian des Systems,  $\hat{N}$  der Teilchenzahloperator,  $\mu$  das chemische Potential,  $k_B$  die Boltzmann-Konstante und  $T$  die absolute Temperatur des Systems. Eng verknüpft mit der Zustandssumme ist das großkanonische Potential  $\Omega$ :

$$\Omega = U - TS - \mu N, \quad d\Omega = -p \cdot dV - S \cdot dT - N \cdot d\mu$$

$S$  ist dabei die Entropie und  $U$  die innere Energie. Für den Zusammenhang zwischen dem großkanonischen Potential und der großkanonischen Zustandssumme gilt dann

$$\Omega = -k_B T \ln(Z_{\text{Gk}}).$$

Aus der infinitesimalen Änderung  $d\Omega$  ergibt sich die durchschnittliche Teilchenzahl  $\langle n \rangle$  pro Gitterplatz in einer Dimension zu

$$\langle n \rangle = \frac{N}{L} = -\frac{1}{L} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}.$$

Hierbei wurde angenommen, dass sich  $N$  Teilchen auf  $L$  Gitterplätze verteilen. Damit ist es nun möglich die isotherme Kompressibilität  $\kappa_T$  auszudrücken als

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T,N} = \frac{V}{N^2} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \frac{V}{L \langle n \rangle^2} \left( \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu} \right)_{T,V} =: \frac{V}{L \langle n \rangle^2} \kappa. \quad (2.1)$$

Für einen ausführlichen Beweis insbesondere des zweiten Schrittes sei auf den Anhang A verwiesen. Die isotherme Kompressibilität ist somit proportional zu der Änderung der Dichte mit dem chemischen Potential bei konstanter Temperatur und konstantem Volumen.

## 2.2 Suprafluidität

Das Phänomen der Suprafluidität wurde zuerst im Jahre 1938 von Kapitza [16] und im gleichen Jahre unabhängig davon von Allen und Misener [17] bei flüssigem  $^4\text{He}$  entdeckt. Hierbei fiel auf, dass unter dem sogenannten  $\lambda$ -Punkt bei 2,18 K (Normaldruck) die Viskosität des flüssigen Heliums beim Fluss durch enge Kapillare vollständig verschwindet.

Dieses Phänomen konnte Landau im Jahre 1941 auf die nun folgende Weise erklären [18, 19]. Nach Landau braucht es für eine Supraflüssigkeit ein Fluid, welches Ladungen ohne Reibung transportieren kann. Nimmt man nun einen allgemeinen Fluss z.B. durch ein Kapillar an, kann es zu Anregungen an der Oberfläche dieses Fluids kommen, welche zur Dissipation führen. Aus dieser simplen Idee kann man eine Bedingung für die elementaren Anregungen herleiten, unter welcher die Suprafluidität möglich ist. Hierzu nehme man eine Supraflüssigkeit an, welche sich mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_s$  bewegt<sup>1</sup>. Im Ruhesystem des Fluids sei nun die Energie einer elementaren Anregung durch  $\epsilon_p$  und der dazu gehörige Impuls durch  $\mathbf{p}$  gegeben. Wechselt man nun zurück in das System der Umgebung, so ist die Energie  $E$  des Fluids durch seine kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  plus die Energie der Anregungen transformiert in das neue System gegeben<sup>2</sup>:

$$E = E_{\text{kin}} + \epsilon_p + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s$$

Das Fluid verliert demnach Energie durch Dissipation, wenn  $\epsilon_p + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s < 0$  gilt. Die linke Seite kann nur negativ sein, wenn sein Minimum negativ ist:

$$\min(\epsilon_p + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_s) = \epsilon_p - p \cdot v_s < 0$$

Hierbei wurde von den Vektoren  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{v}_s$  auf die Beträge  $p$  und  $v_s$  gewechselt.

Hieraus folgt direkt, dass ein Fluid aufgrund der Energie- und Impulserhaltung keine Energie durch Dissipation verliert und somit eine Supraflüssigkeit darstellt, wenn die Geschwindigkeit kleiner als die kritische Geschwindigkeit  $v_c$  ist, welche durch die folgende Gleichung gegeben ist:

$$v_c = \min_p \left( \frac{\epsilon_p}{p} \right) \quad (2.2)$$

Nach Landau braucht es somit für die Existenz einer Supraflüssigkeit eine kritische Geschwindigkeit größer null, damit das Fluid ohne Energieverlust Ladungen transportieren kann. Genau dieses Argument wird später genutzt werden, um zu zeigen, dass das Bose-Hubbard-Modell unter bestimmten Voraussetzungen eine solche Phase liefert.

## 2.3 Bose-Hubbard-Modell

Der Hamiltonian  $\hat{H}$  des Bose-Hubbard-Modells auf einem eindimensionalen Gitter ist gegeben durch

$$\hat{H} = \underbrace{-t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i)}_1 + \underbrace{U \frac{1}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)}_2 - \underbrace{\mu \sum_i \hat{n}_i}_3. \quad (2.3)$$

<sup>1</sup> Wie in der Literatur üblich, denotiert ein fettgedruckter Buchstabe einen Vektor.

<sup>2</sup> Der Einfachheit halber wird hier die Galilei-Transformation und nicht die Lorentz-Transformation genutzt. Für eine relativistische Berechnung sei auf [20] verwiesen.

Hierbei stellen  $b_i^\dagger$  bzw.  $b_i$  die bosonischen Auf- bzw. Absteigeoperatoren dar. Diese erfüllen die folgenden Kommutatorrelationen:

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \quad [b_i, b_j] = 0, \quad [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0 \quad (2.4)$$

Weiterhin sei  $\hat{n}_i = b_i^\dagger b_i$  der Besetzungszahloperator. Sei nun der normierte Zustand  $|n\rangle$  auf einem gewissen Gitterplatz durch die Anzahl  $n$  der sich auf diesem Platz befindlichen Atome beschrieben<sup>3</sup>. Die gerade definierten Operatoren haben auf einen solchen Zustand dann die folgende Wirkung:

$$b^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad b |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad \hat{n}_i |n\rangle = n |n\rangle \quad (2.5)$$

Mithilfe dieser Definitionen wird schnell ersichtlich, welche Bedeutung die drei Terme im Hamiltonian des Bose-Hubbard-Modells aus Gleichung (2.3) besitzen.

1. Die Summe läuft über benachbarte Gitterplätze  $\langle i, j \rangle$  und den Auf- bzw. Absteigeoperatoren kann man entnehmen, dass hier ein Boson vom  $i$ -ten Gitterplatz zum benachbarten Gitterplatz  $j$  wechselt oder vice versa. Hierbei wird die Energie  $t$  gewonnen ( $t > 0$ ). Dieser Term stellt somit die durch die Heisenbergsche Unschärfe getriebene Delokalisierung der Bosonen dar.
2. Hier läuft die Summe über alle Gitterplätze  $i$ . Auf jedem der Gitterplätze wechselwirkt jedes der  $n$  Bosonen mit den  $n - 1$  anderen Bosonen und die abstoßende Wechselwirkung wird mit dem Faktor  $U > 0$  skaliert. Der halbierende Faktor folgt daraus, dass bei der Annahme, dass auf einem Gitterplatz jedes der  $n$  Bosonen mit den  $n - 1$  anderen Bosonen wechselwirkt, jedes wechselwirkende Paar doppelt getroffen wird, was durch diesen Faktor korrigiert wird. Das Bose-Hubbard-Modell in dieser Form behandelt somit eine kurzreichweitige abstoßende Wechselwirkung. Wechselwirkungen zwischen Teilchen auf verschiedenen Gitterplätzen werden in diesem Modell ignoriert.
3. Die Summe zählt die Gesamtzahl der vorliegenden Bosonen und skaliert diese mit dem chemischen Potential  $\mu > 0$ . Dieser Term dient dazu, die Gesamtzahl  $N$  der Bosonen zu fixieren.

Diese Form des Bose-Hubbard-Modells kann mikroskopisch hergeleitet und so mit Experimenten in Zusammenhang gesetzt werden. Experimentell gesehen erzeugt man mithilfe von stehenden optischen Wellen, welche durch Interferenz von Lasern gebildet werden, ein periodisches Potential  $V_p(\mathbf{r})$ , welches natürlich vom Ort  $\mathbf{r}$  abhängt [2]. Die Periodizität des Potentials äußert sich dadurch, dass es mindestens einen Vektor  $\mathbf{R}$  gibt, für welchen  $V_p(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V_p(\mathbf{r})$  gilt<sup>4</sup>. Die regelmäßig auftretenden Potentialminima seien im Folgenden an den Orten  $\mathbf{r}_i$ .

In dieses Potential füllt man nun ein ultrakaltes Gas bestehend aus Bosonen, dessen Wechselwirkung untereinander man durch ein internes Potential  $V_{\text{int}}$ , welches von dem Abstand der Bosonen relativ zueinander abhängt, beschreiben kann. In einem solchen Gas ist die Wechselwirkung dominiert durch elastische Stöße und kann im Rahmen der Streutheorie beschrieben werden. Für sehr niedrige Energien, welche bei  $T \approx 0$  K vorliegen, ist der einzig relevante Wechselwirkungsprozess aufgrund der Zentrifugalbarriere die s-Wellen Streuung und man kann das interne Potential durch ein Kontaktpotential ersetzen [2]:

$$V_{\text{int}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{4\pi\hbar a_s}{m} \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

<sup>3</sup> Für Bosonen sind alle  $n \in \mathbb{N}_0$  erlaubt.

<sup>4</sup> Die Anzahl dieser Vektoren hängt von der Dimension des zu bildenden Gitters ab. Letztendlich sind diese Vektoren die Basisvektoren, welche die Elementarzelle des zu betrachtenden Gitters aufbauen. Somit muss es für ein Gitter in  $d$  Dimensionen auch  $d$  solcher Vektoren geben.

Hierbei beschreibt  $a_s$  die s-Wellen-Streulänge und es wurde die Kopplungskonstante  $g$  eingeführt. Mit diesen Annahmen erhält man in zweiter Quantisierung<sup>5</sup> den folgenden Hamiltonian [22]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_p(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V_{\text{int}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (2.6)$$

Die Feldoperatoren erfüllen hierbei die bosonischen Kommutatorrelationen  $[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  und  $[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = 0$ .  $M$  ist die Masse eines Atomes und  $\hat{\mathbf{p}}$  ist der Impulsoperator.

Das Bloch-Theorem führt dazu, dass im Falle eines periodischen Potentials die Eigenzustände durch die sogenannten Blochfunktionen  $\phi_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  gegeben sind. Diese sind durch den diskreten Bandindex  $n$  und den Quasimpuls  $\mathbf{q}$  charakterisiert<sup>6</sup>. Bei Translation um einen der Gittervektoren  $\mathbf{R}$  wird diese Blochfunktion schlicht mit einem Phasenfaktor  $e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}$  multipliziert, was dazu führt, dass diese Funktionen über das gesamte Gitter ausgedehnt sind. Eine nützlichere Basis, in welche die Feldoperatoren zerlegt werden können, stellen die sogenannten Wannier-Funktionen  $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  dar. Diese hängen mit den Blochfunktionen über eine Fouriertransformation zusammen [2]:

$$\phi_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}_i} w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}$$

Summiert wird hier über die Potentialminima  $\mathbf{r}_i$ , welche die einzelnen Gitterplätze darstellen. Die Wannier-Funktionen hängen weiterhin nur von dem relativen Abstand  $\mathbf{r} - \mathbf{r}_i$  ab und sind zumindest für die niedrigsten Bänder um die einzelnen Gitterplätze  $\mathbf{r}_i$  zentriert. Ist das periodische Potential tief genug, weiterhin die Temperatur klein genug und die externen Felder relativ schwach, so ist die Bandlücke zwischen dem niedrigsten Band und den darüber liegenden Bändern groß genug, sodass diese praktisch nicht besetzt sind. Es genügt also, nur das niedrigste Band zu betrachten, bei welcher die Wannier-Funktion zentriert um einen Gitterplatz algebraisch abfällt [24].

Die Zerlegung der Feldoperatoren in diese Basis, nimmt dann die folgende Form an (der Index  $n$  ist wegen obiger Argumentation weggelassen) [2]:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_i w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) b_i \quad (2.7)$$

Setzt man die Entwicklung der Feldoperatoren aus Gleichung (2.7) in die geforderten Kommutatorrelationen ein, so folgt direkt, dass die Entwicklungskoeffizienten  $b_i$  und  $b_i^\dagger$  die bosonischen Kommutatorrelationen aus Gleichung (2.4) erfüllen. Man kann also den Operator  $b_i$  so interpretieren, dass dieser ein Boson im Zustand  $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  vernichtet. Da diese Wannier-Funktionen in den einzelnen Potentialmulden (Gitterplätzen) lokalisiert sind, sind so die Auf- bzw. Absteigeoperatoren der einzelnen Gitterplätze definiert.

Setzt man nun die Entwicklung aus Gleichung (2.7) in den Hamiltonian in der Form der zweiten Quantisierung ein (2.6), genügt es aufgrund der algebraischen Lokalisierung der Wannier-Funktionen von allen durch die Entwicklung der Feldoperatoren in die Basis der Wannier-Funktionen auftretenden Termen, nur jene zu betrachten, welche das Tunneln zwischen nächsten Nachbarn und die Wechselwirkung auf gleichen Gitterplätzen beschreiben. Führt man weiterhin den Besetzungszahloperator  $\hat{n} = b^\dagger b$  ein und nutzt die bosonischen Kommutatorrelationen aus Gleichung (2.4), so erhält man den folgenden

<sup>5</sup> Für weitere Informationen hierzu sei dem Leser [21] empfohlen. Der Hamiltonian findet sich auf Seite 19.

<sup>6</sup> Siehe z.B. Kapitel 6 in [23].

Hamiltonian [22]:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} b_i^\dagger b_j + \frac{1}{2} \sum_i U_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (2.8)$$

Die erste Summe läuft hierbei über die nächsten Nachbarn, jedoch sei ausdrücklich der Unterschied zu Gleichung (2.3) erwähnt. In Gleichung (2.8) ist die Summe so gedacht, dass jedes Nachbarpaar zweimal getroffen wird, was die Hermitizität von  $\hat{H}$  sicherstellt. In Gleichung (2.3) hingegen soll die Summe jedes Nachbarpaar nur einmal treffen und der hermitesch konjugierte Term wurde aufgrund dessen explizit hingeschrieben. Das Tunnelmatrixelement  $t_{i,j}$  ergibt sich zu

$$t_{i,j} = - \int d^3 \mathbf{r} w^* (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_p (\mathbf{r}) \right] w (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) .$$

Für ein isotropes externes periodisches Potential ist dieser Term für alle benachbarten Paare gleich und der Index kann fallen gelassen [22]. In einer Dimension erhält man so eine lineare Kette mit einzelnen Gitterplätzen, von welchen die Teilchen in beide Richtungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit tunneln können. Diese optimale Annahme wird bei der Behandlung in dieser Arbeit gemacht werden.

Die Stärke der Wechselwirkung  $U_i$  ergibt sich zu

$$U_i = g \cdot \int d^3 \mathbf{r} |w (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4 .$$

Auch hier kann der Index bei einem homogenen periodischen Potential fallen gelassen werden. Weiterhin wurde das chemische Potential  $\mu$  als Lagrange-Multiplikator in dem Hamiltonian eingeführt, was dazu dient, die totale Anzahl der Atome zu kontrollieren [22]. Auf diese Weise betrachtet man ein großkanonisches Ensemble und man erhält den ursprünglichen Bose-Hubbard-Hamiltonian aus Gleichung (2.3). Die in dieser Herleitung genannten Näherungen sind als *tight-binding-Approximation* bekannt und das in dieser Form aufgestellte Bose-Hubbard-Modell stellt wohl die einfachste Form dar. Es ist auch möglich, das Modell um weitere Terme zu ergänzen (siehe z.B. [22, 25, 26]), jedoch kommt es bereits in diesem einfachsten Modell zu höchst interessanten Phänomenen, was im folgenden Abschnitt deutlich werden wird.

## 2.4 Phasendiagramm des Bose-Hubbard-Modells

In diesem Abschnitt soll das Phasendiagramm des Bose-Hubbard-Modells erklärt werden. Inspiriert von [27] wird hierzu zunächst ein Doppelpotential betrachtet, welches als ein eindimensionales Gitter mit zwei Gitterplätzen angesehen werden kann. Für den gesamten Abschnitt waren weiterhin die beiden Quellen [3] und [14] sehr hilfreich. Falls keine andere Quelle explizit angegeben ist, sei hierauf verwiesen.

### 2.4.1 Doppelpotential

Der Hamiltonian des Bose-Hubbard-Modells aus Gleichung (2.3) besitzt abhängig von der Stärke der Wechselwirkung  $U$  im Vergleich zur Tunnelstärke  $t$  zwei Grundzustände. Sehr anschaulich wird dies bei einem Gitter mit zwei Gitterplätzen und einer gleichmäßigen Füllung mit zwei Teilchen, was durch ein Doppelpotential modelliert werden kann.

Bekanntermaßen sind hier die beiden Zustände mit der niedrigsten Energie durch einen symmetrischen

Zustand  $|\psi_S\rangle$  und einen antisymmetrischen Zustand  $|\psi_A\rangle$  gegeben<sup>7</sup>. Der Energieabstand dieser beiden Zustände sei  $E_A - E_S =: 2A$ . Weiterhin ist es möglich, diese beiden Zustände in die Zustände  $\psi_R$  bzw.  $\psi_L$  zu zerlegen, bei welchen sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens fast komplett auf den rechten bzw. linken Topf konzentriert.

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle), \quad |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle)$$

Für den Fall verschwindender Wechselwirkungen  $t \gg U$  ist der Grundzustand  $|\psi\rangle$  des Zweiteilchensystems dadurch gegeben, dass sich jeder der beiden Teilchen im energetisch günstigsten Zustand  $|\psi_S\rangle$  des Doppeltopf-Potentials befindet ( $\otimes$  denotiert das Tensorprodukt):

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle) \\ &= \frac{1}{2} [|\psi_L\rangle \otimes |\psi_L\rangle + |\psi_L\rangle \otimes |\psi_R\rangle + |\psi_R\rangle \otimes |\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle \otimes |\psi_R\rangle] \end{aligned}$$

Das System befindet sich also einer Überlagerung des Zustandes mit beiden Bosonen im linken Topf, beiden Bosonen im rechten Topf und jeweils einem Boson in einem Topf. Jeder Topf ist im Mittel also mit einem Boson besetzt, jedoch ist der Vielteilchenzustand eines Topfes durch eine Superposition von null, einem und zwei Bosonen gegeben.

Wenn man nun eine abstoßende Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen zulässt, wird die Energie eben dieses Zustandes zunehmen, begründet durch die Anteile bei welchen sich beide Teilchen im gleichen Topf befinden. Hier kommt es zu einer Wechselwirkungsenergie von  $U/2$ . Wird dieser Kosten an Energie deutlich größer als der Energieabstand  $2A$  zwischen dem symmetrischen und antisymmetrischen Zustand, so minimiert das System seine Energie, indem jedes Teilchen in einen Superpositionszustand der beiden Grundzustände des Doppeltopf-Potentials wechselt:  $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle \pm |\psi_R\rangle)$ . Der daraus folgende Zweiteilchenzustand kann dann als  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_L\rangle \otimes |\psi_R\rangle + |\psi_R\rangle \otimes |\psi_L\rangle]$  geschrieben werden. Nun besetzt also exakt ein Boson den linken und den rechten Potentialtopf und die Wechselwirkungsenergie verschwindet, da sich die beiden Teilchen nie im gleichen Topf befinden. Dieser Zustand wird sich bei  $U \gg t$  einstellen.

## 2.4.2 Supraflüssigkeit

Diese Überlegungen können nun auf allgemeines Gitter der Länge  $L$  erweitert werden. Dominiert der kinetische Term  $t \gg U$ , so ist jedes Boson über das komplette Gitter delokalisiert und der Vielteilchenzustand kann als Produktzustand von identischen Blochzuständen geschrieben werden. Für  $N$  Bosonen auf  $L$  Gitterplätzen erhält man somit

$$|\psi_{\text{SF}}\rangle \propto \left( \sum_{i=1}^L b_i^\dagger \right)^N |0\rangle.$$

$|0\rangle$  steht hierbei für den Zustand im Vakuum. Das System kann nun durch eine makroskopische Wellenfunktion beschrieben werden, da der Vielteilchenzustand durch ein Produkt über gleiche Einteilchenzustände gegeben ist. Weiterhin ist bei einer Temperatur von  $T = 0$  K ein schwach wechselwirkendes Bose-Gas, womit die Annahme eines Kontaktpotentials gemeint ist, eine Supraflüssigkeit (SF), was mit den elementaren Anregungen begründet werden kann. Diese können nach Bogoliubov [29] genähert

---

<sup>7</sup> Siehe z. B. [28], Kapitel 4.5.

werden zu<sup>8</sup>

$$\epsilon(p) = \left[ \frac{gn}{M} p^2 + \left( \frac{p^2}{2m} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} .$$

Hierbei ist  $n = \frac{N}{V}$  die Dichte des Gases. Setzt man diese Relation in Landaus Bedingung für Suprafluidität aus Gleichung (2.2) ein, so erhält man die folgende kritische Geschwindigkeit:

$$v_c = \frac{gn}{m}$$

Dies ist gerade die Schallgeschwindigkeit im betrachteten Gas [30]. Diese kritische Geschwindigkeit größer null ist somit ein Indiz für die Existenz einer Suprafluidität.

Eine weitere Charakterisierung dieser Phase ist die sogenannte Korrelationsfunktion  $S_j = \langle b_j^\dagger b_0 + b_j b_0^\dagger \rangle$ . Der Fall einer Dimension muss hierbei im Kontrast zu größeren Dimensionen betrachtet werden, wo diese Korrelationen langreichweitig sind. In einer Dimension muss man bei Annahme eines Kontaktpotentials von einer Tomanga-Luttinger-Flüssigkeit ausgehen [32], für welche diese Korrelation algebraisch zerfällt [14]. Für eine ausführliche Diskussion von Tomanga-Luttinger-Flüssigkeiten sei auf das Buch *Quantum Physics in One Dimension* von Giamarchi verwiesen [33]. Hiernach kann man aufgrund des Anregungsspektrums bei  $T = 0$  K auch weiterhin von einer Suprafluidität sprechen, weswegen dies im Folgenden auch so gehalten werden wird.

### 2.4.3 Mott-Isolator

Im Gegensatz dazu steht die Phase bei dominierender Wechselwirkung  $U \gg t$  (atomarer Limes). Fluktuationen der Besetzungszahlen der einzelnen Gitterplätze werden energetisch ungünstig und es wird ein Zustand eingenommen, bei welchen die Wellenfunktionen der Atome auf den Gitterplätzen lokalisiert sind. Der Vielteilchengrundzustand ist dann ein Produkt von lokalen Fockzuständen mit einer bestimmten Anzahl von Bosonen auf jedem Gitterplatz. Die Wechselwirkungsenergie wird minimiert durch eine gleichmäßige Füllung des Gitters. Es liegen also  $n$  Teilchen pro Gitterplatz vor und die Gesamtanzahl  $N$  der Teilchen ergibt sich mit der Anzahl der Gitterplätze bzw. Länge  $L$  des Gitters zu  $N = nL$ . Die Wellenfunktion eines solchen Zustandes ist gegeben durch

$$|\psi_{\text{MI}}\rangle \propto \prod_{i=1}^L (b_i^\dagger)^n |0\rangle .$$

Setzt man  $t = 0$  und lässt den Bose-Hubbard-Hamiltonian aus Gleichung (2.3) auf einen solchen Zustand wirken, ergibt sich die Energie

$$\frac{E_{\text{MI}}(n)}{N} = -\mu n + \frac{U}{2} n(n-1) .$$

Für ein gegebenes chemisches Potential  $\mu$  muss diese Energie über die diskrete Besetzungszahl  $n$  minimiert werden, was dazu führt, dass im Intervall  $n-1 < \mu/U < n$  genau  $n$  Bosonen jeden Gitterplatz besetzen ( $n \geq 1$ ,  $n = 0$  ist die triviale Lösung für negative  $\mu$ ).

Anregungen im atomaren Limes sind durch Anregungen, welche die Anzahl der Teilchen auf einem Gitterplatz ändern, gegeben. Man addiert also ein Extrateilchen auf den  $i$ -ten Gitterplatz und erhält so

<sup>8</sup> Siehe hierzu auch Kapitel 4 in [30] oder [31].

eine Einteilchenanregung oder man subtrahiert ein Teilchen und erhält so eine Einlochanregung:

$$|\psi_{\text{MI}}(n); i\rangle_{\text{Teilchen}} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} b_i^\dagger |\psi_{\text{MI}}(n)\rangle, \quad |\psi_{\text{MI}}(n); i\rangle_{\text{Loch}} = \frac{1}{\sqrt{n}} b_i |\psi_{\text{MI}}(n)\rangle$$

Durch Wirkung des Hamiltonians auf diese Zustände kann man sich leicht erschließen, dass die Energien dieser Anregungen relativ zum Grundzustand durch die folgenden Gleichungen gegeben sind:

$$E_{\text{Teilchen}}(n) - E_{\text{MI}}(n) = Un - \mu, \quad E_{\text{Loch}}(n) - E_{\text{MI}}(n) = -U(n-1) + \mu \quad (2.9)$$

Ist die Anzahl  $N$  der Teilchen erhalten, sind die relevanten Anregungsprozesse die Erzeugung von Teilchen-Loch-Paaren. Die Energie  $\Delta E$ , welche diese Anregungen tragen, erhält man durch Addition der beiden Terme aus Gleichung (2.9):

$$\Delta E = U$$

Aufgrund dieser Lücke im Anregungsspektrum ist die Bewegung der Atome blockiert. Weiterhin führt die starke Lokalisierung der Atome dazu, dass die Kompressibilität  $\kappa$  verschwindet, da  $\langle n \rangle$  konstant ist (siehe Gleichung (2.1)). Das System ist inkompressibel. All diese Eigenschaften führen dazu, dass dieser Zustand Mott-Isolator (MI) genannt wird [3]. Die suprafluide Phase hat keine solche Anregungslücke und ist aufgrund der Fluktuationen der Besetzungszahl der einzelnen Gitterplätze kompressibel.

Alle Erläuterungen für die Phase der Suprafluidität und des Mott-Isolators sind auch für das unendliche Gitter ( $L \rightarrow \infty$ ) und den thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) gültig.

#### 2.4.4 Phasendiagramm

Nachdem die beiden Grenzfälle erklärt werden konnten, soll nun das Phasendiagramm erläutert werden. Bereits bemerkt wurde, dass die auftretenden Phasen nicht von den absoluten Werten von  $t$ ,  $U$  und  $\mu$  abhängen sondern jeweils vom Verhältnis  $t/U$  bzw.  $\mu/U$ . Trägt man diese beiden Größen gegeneinander auf, erhält man das Phasendiagramm des Bose-Hubbard-Modells, welches rein phänomenologisch die in Abbildung 2.1 gezeigte Form annimmt. Die beiden Grenzfälle bei  $t/U = 0$  (Mott-Isolator) und  $t/U \rightarrow \infty$  (Suprafluidität) wurden bereits erläutert. Nun soll im atomaren Limes gestartet werden und hieraus der Rest des Phasendiagramms erklärt werden.

Minimierung der Energie führte dazu, dass es abhängig von  $\mu/U$  Bereiche mit unterschiedlicher Besetzungszahl  $n$  eines Gitterplatzes des Mott-Isolators gibt. Betrachtet man nun kleine Werte von  $t/U$  größer als null, so gewinnt das System zwar Energie, wenn man ein Teilchen (Loch) dem System zuführt und sich dieses über die verschiedene Plätze bewegt, jedoch wird das System für kleine  $t$  deutlich mehr Energie verlieren durch die Wechselwirkung  $U$  der Teilchen untereinander. Es gibt also in der  $\mu/U$ - $t/U$ -Ebene eine endliche Region, in welcher die Zahl der Bosonen pro Gitterplatz auf  $n$  fixiert ist.

Diese Region des Mott-Isolators ist durch die Energielücke charakterisiert, die es braucht eine Einteilchen- oder Einlochanregung herbeizuführen. Sobald diese Lücke verschwindet, kann sich ein Teilchen oder ein Loch ohne Energieverlust durch das System bewegen und der Mott-Isolator wird durch eine Suprafluidität ersetzt werden. Für einen festen Wert von  $t/U$  innerhalb der Mott-Phase gibt es nun zwei Möglichkeiten diese Lücke verschwinden zu lassen. Man erhöht (erniedrigt) das chemische Potential  $\mu/U$  bis es lohnenswert ist, dem System ein Teilchen hinzuzuführen (aus dem System zu entfernen) und dieses Teilchen (Loch) sich durch das System bewegen zu lassen.

Mithilfe von Gleichung (2.9), welche die Anregungsenergien für  $t/U = 0$  angibt, kann das auch quantitativ verstanden werden. Lässt man im Vergleich zu dieser Gleichung mithilfe eines endlichen Wertes von  $t/U$  ein Tunneln zu, so wird die Einteilchen- bzw. Einlochanregung zu einem Dispersionsspektrum



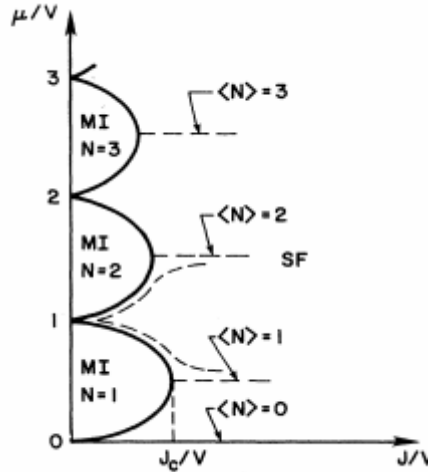


Abbildung 2.1: Phänomenologisches Phasendiagramm des Bose-Hubbard-Modells, welches auf den im Fließtext zu findenden Erläuterungen beruht.  $\mu$  steht für das chemische Potential,  $V$  beschreibt die Wechselwirkung der Bosonen untereinander, welche im Text als  $U$  bezeichnet ist und  $J = t$  steht für das Tunneln der Bosonen auf benachbarte Gitterplätze.  $\langle N \rangle = n$  gibt die Dichte der Teilchen an und die Abkürzung MI bzw. SF stehen für die Phase des Mott-Isolators bzw. der Supraflüssigkeit. Weiterhin ist der kritische Wert  $J_c = t_c$  eingezeichnet, ab welchem die Phase des Mott-Isolators mit der Dichte  $n = 1$  komplett verschwindet. Abbildung aus [3] mit Erlaubnis von Matthew P. A. Fisher.

abhängig vom Quasiimpuls  $\mathbf{k}$  führen. Die jeweiligen Energien relativ zur Grundzustandsenergie ein Teilchen dem System hinzuzuführen (Teilchen) bzw. aus dem System zu entfernen (Loch), ergeben sich dann analog zu

$$E_{\text{Teilchen}}\left(\mathbf{k}; \frac{t}{U}, \frac{\mu}{U}\right) = \epsilon_{\text{Teilchen}}\left(\mathbf{k}; \frac{t}{U}\right) - \frac{\mu}{U}, \quad E_{\text{Loch}}\left(\mathbf{k}; \frac{t}{U}, \frac{\mu}{U}\right) = -\epsilon_{\text{Loch}}\left(\mathbf{k}; \frac{t}{U}\right) + \frac{\mu}{U}. \quad (2.10)$$

Die Phasengrenzen  $(\mu/U)_{\pm}$  in der  $\mu/U$ - $t/U$ -Ebene sind dann durch die Werte von  $\mu/U$  gegeben, bei welchem diese Anregungsenergien verschwinden:

$$\left(\frac{\mu}{U}\right)_{+} = \epsilon_{\text{Teilchen}}\left(\mathbf{k}; \frac{t}{U}\right), \quad \left(\frac{\mu}{U}\right)_{-} = \epsilon_{\text{Loch}}\left(\mathbf{k}; \frac{t}{U}\right) \quad (2.11)$$

Für jeden Punkt innerhalb der Phase des Mott-Isolators ist die Einteilchen-(Einloch-) Anregungsenergie bei fixiertem  $t/U$  somit einfach der Abstand in die  $\mu/U$  Richtung zu der oberen (unteren) Phasengrenze. Die minimale Anregung, welche die Teilchenzahl erhält, ist die Erzeugung von Teilchen-Loch-Paaren und dessen Energie ist als Summe der Einteilchen- und der Einlochenergie einfach durch den Abstand der oberen und unteren Phasengrenze bei fixiertem  $t/U$  gegeben.

Die charakteristische Form des Phasendiagramms ergibt sich dann durch die Tatsache, dass mit steigendem  $t/U$  eine Delokalisierung der Teilchen immer mehr favorisiert ist, das heißt die Reichweite der Mott-Phase in die  $\mu/U$  Richtung wird immer weiter abnehmen und ab einem kritischen Wert  $t_c/U$  sogar komplett verschwinden. Ab diesem Moment liegt unabhängig vom chemischen Potential  $\mu/U$  immer eine Supraflüssigkeit vor.

Weiterhin reicht die suprafluide Phase bis zu  $t/U = 0$  bei ganzzahligen Werten von  $\mu/U$ . Dies liegt daran, dass es hier gleich günstig ist, jeden Gitterplatz mit  $n$  Bosonen oder  $n - 1$  Bosonen zu besetzen. Es gibt also keine Energielücke, um Teilchen zu dem System hinzuzufügen und die Suprafluidität setzt bereits

bei infinitesimalen kleinen  $t/U$  ein.

Beachtenswert sind auch die Linien konstanter Dichte  $n = \langle \hat{N}_i \rangle$ , welche für ganzzahlige Werte in Abbildung 2.1 bereits eingezeichnet sind. Diese Linien treffen die Phase des korrespondierenden Mott-Isolators bei dem Übergangspunkt mit dem maximalen Wert für  $t/U$  (beim kritischen Wert). Begründbar ist dies durch die Tatsache, dass eben nur diese Linie mit ganzzahligen Dichten die korrespondierende Mott-Phase treffen kann, welche im ganzen Gebiet genau diese Dichte besitzt. Dichten knapp darüber oder darunter liegen gerade über oder unterhalb der Mott-Phase und der Linie mit der ganzzahligen Dichte. Würde die Linie mit der ganzzahligen Dichte an einem anderen Punkt als der Spitze auf die Mott-Phase treffen, so würde es in der Nähe der Spitze aufgrund dieser Überlegungen zu negativen Kompressibilitäten kommen, welche schließlich durch die Änderung der Dichte  $n$  in die  $\mu/U$ -Richtung gegeben ist (siehe Gleichung (2.1)). Ein solches Verhalten ist physikalisch unmöglich.

Wie bereits angedeutet liegen die Linien mit Dichten ungleich einer ganzen Zahl komplett in der suprafluiden Phase, um letztendlich zwischen den Mott-isolierenden Phasen auf die  $\mu/U$ -Achse zu treffen. Dies unterstreicht, dass der Phasenübergang an einem beliebigen Punkt außer der Spitze durch die Addition oder Subtraktion von Teilchen zu der inkompressiblen Mott-Phase getrieben ist, das heißt die Dichte  $n$  wird beim Übergang geändert.

An der Spitze der Mott-Phase liegt ein anderer Phasenübergang vor, da hier die Dichte  $n$  konstant ist. Stattdessen sorgt hier ein großer kinetischer Term dafür, dass sich die Bosonen trotz der abstoßenden Wechselwirkung untereinander über das ganze Gitter bewegen können und so die Supraflüssigkeit formen. Fisher et al. [3] leiten hierfür her, dass dieser Übergang für  $d$  Dimensionen dem Verhalten des  $XY$  Modells in  $d + 1$  Dimensionen entspricht. Dies steht im deutlichen Kontrast zum Phasenübergang im sonstigen Diagramm, welcher durch Dichtefluktuationen getrieben ist (für eine ausführliche theoretische Diskussion sei auf [3] verwiesen.).

## Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen

Die in diesem Abschnitt erläuterte Methode der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen folgt der Darstellung einer Arbeit von Martin P. Gelfand, Rajiv R.P. Singh und David A. Huse [34]. Diese Arbeit ist zwar nicht der Ursprung dieser Methode, jedoch wird hier der Ansatz von Singh et al. genutzt, weswegen diese besonders erwähnt sei. Einen ausführlichen historischen Überblick liefert eine Arbeit von Gelfand und Singh aus dem Jahre 2000 [35]. Eine weitere große Hilfe beim Verständnis dieser Methode stellte auch ein Buch von Oitmaa, Hamer und Zheng dar [36].

Grundlegend für die Entwicklung ist ein Modell auf einem Gitter mit einem Hamiltonian der Form, wie er aus der Störungstheorie der Quantenmechanik bekannt ist:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad (3.1)$$

Das Spektrum der Eigenzustände und der Eigenwerte von  $\hat{H}_0$  sei hierbei bekannt und  $\lambda \hat{V}$  stellt eine Störung dar. Gesucht ist nun eine Reihenentwicklung einer extensiven Größe  $P$  nach dem Störungsparameter  $\lambda$ .

In vielen Fällen ist es möglich, die Störung  $\hat{V}$  als eine Summe von lokalen Termen darzustellen. So wäre es im Falle des Bose-Hubbard-Modells zum Beispiel möglich den kinetischen Term, welcher über benachbarte Gitterplätze summiert, als einen solchen lokalen Term zu bezeichnen, was dazu führt, dass die Störung  $\hat{V}$  wie folgt darstellbar wird:

$$\hat{V} = \sum_{\langle i,j \rangle} h_{ij}$$

Zeichnerisch dargestellt, verknüpft der kinetische Term des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells zwei benachbarte Gitterplätze miteinander und ermöglicht einen Austausch der Bosonen zwischen diesen beiden Plätzen. Vereinfacht grafisch darstellen könnte man dies für 4 Gitterplätze wie in Abbildung 3.1 gezeigt.

Nun assoziiert man zunächst jeden Term in dieser Summe mit einem individuellen Koeffizient  $\lambda_k$ . Im

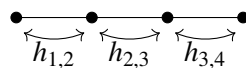


Abbildung 3.1: Grafische Darstellung der lokalen Terme des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen. Die Wirkung des kinetischen Terms ist durch Pfeile angedeutet.

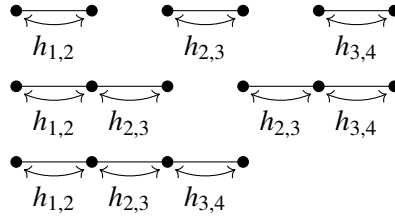


Abbildung 3.2: Grafische Darstellung der relevanten Cluster des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen. Die Wirkung des kinetischen Terms ist durch Pfeile angedeutet.

Falle des Bose-Hubbard-Modells, welches eine Summation über benachbarte Gitterplätze beinhaltet, könnte der Index  $k$  auch als  $\langle i, j \rangle$  dargestellt werden.

Eine extensive Größe  $P$  kann man nun nach diesen Koeffizienten  $\lambda_k$  in einer multivariablen Reihe entwickeln:

$$\begin{aligned}
 P(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots) &= \sum_{n_1}^{\infty} \sum_{n_2}^{\infty} \sum_{n_3}^{\infty} \dots p(n_1, n_2, n_3, \dots) \lambda_1^{n_1} \lambda_2^{n_2} \lambda_3^{n_3} \dots \\
 \Leftrightarrow P(\{\lambda_k\}) &= \sum_{\{n_k\}} p(\{n_k\}) \prod_k \lambda_k^{n_k}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Da  $P$  als extensive Größe proportional zur Teilchenzahl  $N$  ist, wird diese im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  unendlich groß sein. Weiterhin wird  $p(0, 0, 0, \dots)$ , welcher den Wert von  $P$  für den ungestörten Hamiltonian  $H_0$  angibt, auch proportional zu  $N$  sein. Nichtsdestotrotz ist es jedoch immer möglich,  $P$  so zu definieren, dass gerade  $p(0, 0, 0, \dots) = 0$  gilt.

Diese Summanden kann man nun auf die folgende Weise umsortieren und gruppieren:

$$P(\{\lambda_k\}) = \sum_C W_{[P]}(C) \tag{3.3}$$

Hier läuft die Summe nun über alle möglichen Mengen der Indizes  $k$ , die nicht leer sind. Diese Mengen nennt man Cluster  $C$ . Das Gewicht der Cluster  $W_{[P]}(C)$  beinhaltet alle Terme der Entwicklung aus Gleichung (3.2), welche mindestens eine Potenz von  $\lambda_k$  für alle  $k \in C$  enthalten und keine Potenzen von  $\lambda_k$  für alle  $k \notin C$ . Für das Bose-Hubbard-Modell mit 4 Gitterplätzen sind alle relevanten Cluster<sup>1</sup> in Abbildung 3.2 dargestellt.

Diese Umsortierung ist eindeutig, was daran erkennbar ist, dass man Gleichung (3.3) invertieren kann, um die Gewichte der Cluster zu erhalten:

$$W_{[P]}(C) = P(C) - \sum_{C' \subset C} W_{[P]}(C') \tag{3.4}$$

Die Summe läuft nun über alle Untercluster  $C'$ , welche eine echte Teilmenge von  $C$  darstellen und  $P(C)$  ist durch Gleichung (3.2) gegeben, wobei alle  $\lambda_k$  gleich null gesetzt sind, dessen Index  $k$  nicht zum Cluster  $C$  gehört.

Letztendlich ist man daran interessiert, alle  $\lambda_k$  gleich  $\lambda$  zu setzen, um eine Reihenentwicklung der extensiven Größe  $P$  in Abhängigkeit des Störparameters  $\lambda$  des ursprünglich gewählten Ansatzes aus Gleichung (3.1) zu erhalten. Dies macht unter dem Gesichtspunkt Sinn, dass die multivariable Entwicklung in

<sup>1</sup> Disjunkte Cluster werden hier vernachlässigt, worauf im Folgenden noch eingegangen wird.

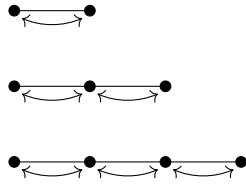


Abbildung 3.3: Grafische Darstellung der relevanten Graphen des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen. Die Wirkung des kinetischen Terms ist durch Pfeile angedeutet.

Gleichung (3.2) nur genutzt wurde, um eine formale Definition der Clustergewichte zu finden. Diesen formellen Trick braucht es nun jedoch nicht mehr.

Hat man alle  $\lambda_k = \lambda$  gesetzt, so ist es klar, dass viele Cluster  $C$  den gleichen Beitrag in der Reihenentwicklung zur Größe  $P$  geben werden, zum Beispiel jene, die über grundlegende Symmetrien wie Translation und Reflexion in Zusammenhang stehen. Solch eine Menge von äquivalenten Clustern  $C$  sei als Graph  $G$  bezeichnet. Für das Bose-Hubbard-Modell mit 4 Gitterplätzen erhält man auf diese Weise die in Abbildung 3.3 gezeigten relevanten Graphen.

Gleichung (3.3) soll nun einerseits in Abhängigkeit von den Gewichten der Graphen dargestellt werden, aber andererseits auf  $N$  skaliert werden, da eine Angabe der extensiven Größe  $P$  im thermodynamischen Limes nur geteilt durch  $N$  endlich bleibt. Beim Übergang von Clustern zu Graphen muss man das Gewicht jedes Graphen mit der Anzahl der äquivalenten Cluster, die den betrachteten Graphen aufbauen, multiplizieren. Beim Dividieren durch die Anzahl der Gitterplätze  $N$  definiert man nun die Gitterkonstante  $L(G)$  als die Anzahl der solchen äquivalenten Cluster pro Gitterplatz und erhält somit

$$\frac{P(\lambda)}{N} = \sum_G L(G) W_{[P]}(G) . \quad (3.5)$$

Die Summe läuft hier nun über alle möglichen Graphen.

Der große Vorteil der Entwicklung von  $P$  in Gleichung (3.5) im Vergleich zur Entwicklung in Gleichung (3.2) (mit  $\lambda_k = \lambda$ ) ist, dass das Gewicht der Graphen ja gerade so konstruiert ist, dass wenn  $G$  genau  $s$  Elemente enthält, in  $W_{[P]}(G)$  die Koeffizienten  $\lambda^0, \lambda^1, \lambda^2, \dots, \lambda^{s-1}$  gerade verschwinden<sup>2</sup>. Will man also ein Entwicklung von  $P/N$  erhalten, welche im thermodynamischen Limes exakt bis zur Ordnung  $\lambda^s$  ist, so muss man nur jene Graphen identifizieren, welche höchstens  $s$  Elemente enthalten und deren Gewichte berechnen.

Im Allgemeinen wäre trotzdem eine Berücksichtigung unendlich vieler Graphen nötig, was jedoch leicht auf eine endliche Menge reduziert werden kann. Betrachtet man nämlich einen Graphen  $G$ , welcher eine disjunkte Vereinigung zweier Untergraphen  $A$  und  $B$  darstellt und eine extensive Größe  $P$ , welche sich dann additiv aus den Untergraphen ergibt, gilt

$$\begin{aligned} P(G) &= P(A) + P(B) , \\ \Rightarrow W_{[P]}(G) &= 0 . \end{aligned}$$

Dass das Gewicht des Graphen  $G$  verschwindet, folgt hierbei aus Gleichung (3.4). Nutzt man die Bedingung, dass sich die extensive Größe  $P$  von  $G$  additiv über die Untergraphen  $A$  und  $B$  zusammensetzt, bemerkt man, dass bei der Subtraktion der Untercluster von  $G$  nach Gleichung (3.4) gerade alle Terme

<sup>2</sup> Man hatte ja angenommen, dass das Gewicht der Graphen alle Terme aus der multivariablen Entwicklung enthält mit mindestens einer Potenz von  $\lambda_k$  für  $k \in G$  und keiner Potenz von  $\lambda_k$  für  $k \notin G$ . Mit  $\lambda_k = \lambda$  und der Annahme von  $s$  Elementen in  $G$ , folgt direkt die Aussage.

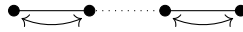


Abbildung 3.4: Grafische Darstellung eines Graphen, welches sich aus zwei disjunkten Graphen zusammensetzt am Beispiel des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen. Die Wirkung des kinetischen Terms ist durch Pfeile angedeutet und die gepunktete Linie deutet hierbei an, dass die Vereinigung der beiden disjunkten Graphen einen neuen Graphen bilden soll.

verschwinden:

$$\begin{aligned}
 W_{[P]}(G) &= P(G) - \sum_{C' \subset G} W_{[P]}(C') \\
 &= P(A) - \underbrace{\sum_{C' \subseteq A} W_{[P]}(C')}_{=P(A)} + P(B) - \underbrace{\sum_{C' \subseteq B} W_{[P]}(C')}_{=P(B)} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Dies begründet, warum in den Abbildungen 3.2 und 3.3 zum Beispiel der in Abbildung 3.4 gezeigte Graph nicht betrachtet wurde.

Die Bedingung der Additivität der Größe  $P$  bei disjunkten Graphen  $G$  kann man auch dadurch ausdrücken, dass man mit  $G$  einen Hamiltonian  $H_G$  assoziiert. Die Additivität von der Größe  $P$  der jeweiligen Hamiltonians stellt dann die folgende Bedingung an die Hamiltonians der Untergraphen  $A$  und  $B$ :

$$H_G = H_A \otimes I_B + I_A \otimes H_B \quad (3.6)$$

$I$  ist hierbei der Identitätsoperator. Für eine extensive Größe  $P$ , welche auf diese Weise additiv über disjunkte Graphen ist, müssen dann bei der Entwicklung in Gleichung (3.5) nur zusammenhängende Graphen betrachtet werden, was das Durchführen dieser Methode überhaupt erst sinnvoll macht.

Extensive Größen  $P$  des Grundzustandes von  $H_G$  erfüllen diese Bedingung der Additivität, das heißt mithilfe der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen kann beispielsweise die Grundzustandsenergie berechnet werden.

## Durchführung der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen

Das Ziel dieser Arbeit ist die Herleitung des Phasendiagramms des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells analog zur Abbildung 2.1. Hierfür beginnt man im atomaren Limes, bei welchem der Grundzustand als Mott-Isolator bekannt ist und man sieht den kinetischen Term als Störung an. Weiterhin skaliert man den Hamiltonian des Bose-Hubbard-Modells auf  $U$ , da die auftretenden Phänomene, wie in Abschnitt 2.4.4 gesehen, nur von den Verhältnissen  $t/U$  und  $\mu/U$  abhängen.

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \frac{\mu}{U} \sum_i \hat{n}_i, \quad \hat{V} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) \quad (4.1)$$

Mit dieser Definition ist der Hamiltonian des Bose-Hubbard-Modells wie für die Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen gewünscht als  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$  dargestellt, wobei  $\lambda = t/U$  eingeführt wurde. Für das Phasendiagramm braucht es nun in Abhängigkeit von  $t/U$  die Phasengrenzen, das heißt ab welchem chemischen Potential  $\mu/U$  die suprafluide Phase einsetzt. Diese Grenzen erhält man über Gleichung (2.11), das heißt man benötigt die Dispersion der Einteilchen- und Einlochanregungen relativ zur Grundzustandsenergie des Mott-Isolators bei  $\mu/U = 0$  in Abhängigkeit von  $t/U$ .

Wie die Grundzustandsenergie als auch die Dispersionen der Anregungen mithilfe der Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen berechnet werden können, wird in diesem Kapitel ausführlich erklärt werden. Da hierbei von dem Mott-Isolator ausgegangen wird, ist diese Art Entwicklung auch als Starkkopplungsentwicklung bekannt.

### 4.1 Berechnung der Grundzustandsenergie

Zunächst einmal braucht es also die Grundzustandsenergie des Mott-Isolators im thermodynamischen Limes bei  $\mu/U = 0$ . Da diese die Bedingung (3.6) erfüllt, kann hier leicht die Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen angewendet werden. Nach dieser Entwicklung ergibt sich die Grundzustandsenergie  $E_{\text{Mott}}/N$  im thermodynamischen Limes zu

$$\frac{E_{\text{Mott}}}{N} = \sum_G L(G) W_{[P]}(G). \quad (4.2)$$

Diese Gleichung liefert eine Reihe in Abhängigkeit von  $\lambda$ , welche abhängig von der Länge des größten betrachteten Graphens im thermodynamischen Limes exakt bis zu einer bestimmten Ordnung von  $\lambda$  ist.

In einer Dimension gestaltet sich das Finden der relevanten Graphen relativ einfach. Es handelt sich einfach um eine Kette von  $1, 2, 3, \dots$  Gitterplätzen, wie es bereits in Abbildung 3.3 angedeutet wurde. Nach der Definition ist die Gitterkonstante  $L(G)$  der einzelnen Graphen in einer Dimension durch eins gegeben [14]. Zur Berechnung der Grundzustandsenergie braucht es somit nur noch die Gewichte der einzelnen Graphen, welche jedoch über Gleichung (3.4) berechnet werden können. Diese sei der Übersichtlichkeit halber hier nochmals wiederholt:

$$\begin{aligned} W_{[P]}(G) &= E_G - \sum_{C' \subset G} W_{[P]}(C') \\ &= E_G - \sum_{G' \subset G} c(G', G) W_{[P]}(G') \end{aligned} \quad (4.3)$$

$E_G$  steht hierbei für die Grundzustandsenergie des Graphen  $G$  und im zweiten Schritt wurde in der Summation von *Unterclustern* auf *Untergraphen* gewechselt und damit der Einbettungsfaktor  $c(G', G)$  eingeführt. Dies ist aufgrund der Unterschiedlichkeit von Clustern und Graphen notwendig, da bei den Clustern noch nicht ausgenutzt wurde, dass viele den gleichen Beitrag liefern (siehe Abbildung 3.2). Für das Gewicht des Graphen der Länge drei, müsste man die beiden Cluster abziehen, welche den ersten und zweiten bzw. den zweiten und dritten Gitterplatz verknüpfen. Diese beiden Cluster werden durch den gleichen Graphen der Länge zwei beschrieben, jedoch muss man dann bedenken, dass man somit zweimal das Gewicht des Graphen der Länge zwei abziehen muss, um das Gewicht des Graphen der Länge drei zu erhalten.

Mithilfe dieser Überlegungen kann man sich relativ leicht erschließen, wie der Einbettungsfaktor  $c(G'_m, G_n)$  für einen Untergraphen  $G'$  der Länge  $m$  in einen Graphen  $G$  der Länge  $n$  aussehen muss [36]:

$$c(G'_m, G_n) = n - m + 1 \quad (4.4)$$

Nun braucht es nur noch die Berechnung der Grundzustandsenergie  $E_G$  für einen Graphen  $G$ . Hier kann man ausnutzen, dass die Anzahl der erlaubten Zustände für einen gegebenen endlichen Graphen  $G$  endlich ist und somit der Hamiltonian  $\hat{H}$  durch eine endliche quadratische Matrix gegeben ist. Das Aufsetzen der Matrizen  $\hat{H}_0$  und  $\hat{V}$  und wie man daraus die Grundzustandsenergie erhält, wird in den folgenden Abschnitten erläutert werden.

#### 4.1.1 Aufsetzen der Matrixdarstellung von $\hat{H}_0$

Zunächst gilt es nun die Matrixdarstellung von  $\hat{H}_0$  mit  $\mu/U = 0$  aus Gleichung (4.1) für einen Graphen der Länge  $L$  mit  $N$  Teilchen herzuleiten. Hierbei braucht es für den Mott-Isolator die Nebenbedingung  $N = nL$ , wobei  $n$  die ganzzahlige Dichte des Mott-Isolators darstellt.

$\hat{H}_0$  vertauscht offensichtlich mit dem Anzahloperator  $\hat{n}_i$  eines Gitterplatzes, weswegen man die Eigenzustände eindeutig durch die Anzahl der Bosonen auf den einzelnen Gitterplätzen beschreiben kann. Alle möglichen Zustände im atomaren Limes sind durch die möglichen Verteilungen der  $N$  Bosonen auf die  $L$  Gitterplätze gegeben. Die Frage ist nun, wie man diese Basis möglichst effektiv erzeugt. Eine schnelle Möglichkeit liefert hierbei eine Methode aus [37, 38].

Alle  $N = nL$  Teilchen werden auf den ersten Gitterplatz gegeben und solange Schritt für Schritt auf den zweiten Gitterplatz gefüllt, bis keine Teilchen mehr auf dem ersten Platz vorliegen. Hierauffolgend wird vom ersten Gitterplatz aus derjenige Platz gesucht, auf welchem sich als erstes mindestens ein Teilchen befindet<sup>1</sup>. Die Anzahl der Teilchen auf diesem Gitterplatz sei durch  $i$  gegeben. Auf den Gitterplatz rechts

---

<sup>1</sup> Am Anfang wird dies trivialerweise der zweite Platz sein, später sind aber durchaus auch andere denkbar.



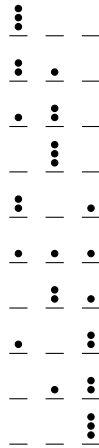


Abbildung 4.1: Veranschaulichung des Algorithmus zum Aufsetzen der Basis des ungestörten Hamiltonians  $\hat{H}_0$  mit  $N = L = 3$ . Die Striche stellen die 3 Gitterplätze dar und die Punkte stehen jeweils für ein Boson.

von diesem wird dann ein Teilchen gelegt, während auf den ersten Platz  $i - 1$  Teilchen kommen. Dann beginnt das Verfahren von vorn. Dieses Vorgehen wiederholt man, bis alle Teilchen schließlich auf dem letzten Gitterplatz liegen. Beispielhaft sei dieses Vorgehen in Abb. 4.1 für  $N = L = 3$  gezeigt.

Die Dimension des so entstehenden Hilbertraumes von  $N$  Teilchen auf  $L$  Gitterplätzen kann man sich leicht erschließen. Das analoge Problem aus der Kombinatorik ist hierbei das Verteilen von  $N$  ununterscheidbaren Kugeln auf  $L$  unterscheidbare Urnen. Die Anzahl der Möglichkeiten und damit die gesuchte Dimension des Hilbertraumes ist gegeben durch [14]

$$D(N, L) = \binom{N + L - 1}{N} = \frac{(N + L - 1)!}{N! (L - 1)!}. \quad (4.5)$$

Sei nun ein normierter Zustand  $|k\rangle$  eindeutig durch die Menge seiner Besetzungszahlen auf den einzelnen Gitterplätzen beschrieben  $|k\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$ . Für die Berechnung von Matrixelementen und die nachfolgende Speicherung braucht es nun eine eindeutige Zuweisung der Basiszustände auf ganze Zahlen  $k$ . Um die Menge der Besetzungszahlen  $\{n_i\}$  auf eine Zahl  $k$  abzubilden, wird eine Hashfunktion von Elstner und Monien genutzt [14]. Hierfür wird  $\theta_i := \sum_{j=1}^i n_j$  und  $\theta_0 := 0$  definiert. Diese Größe hängt über  $n_i = \theta_i - \theta_{i-1}$  mit der Besetzungszahl eines Gitterplatzes zusammen. Die Hashfunktion ist dann gegeben durch

$$Hf(\{n_i\}) = \sum_{j=1}^L [D(\theta_j, j) - D(\theta_{j-1}, j)]. \quad (4.6)$$

Hierbei wurde die Formel für die Dimension des Hilbertraumes (4.5) genutzt. Diese Hashfunktion hat den großen Vorteil, dass die Zustände in der Reihenfolge, wie sie mit dem erläuterten Vorgehen gebildet werden, schlicht von 0 bis  $d - 1$  durchnummeriert werden, wobei  $d$  die Dimension darstellt.

Nachdem nun wie gewünscht jedem Zustand eine eindeutige ganze Zahl zugeordnet wurde, kann die Matrixdarstellung von  $\hat{H}_0$  gefunden werden, indem man die einzelnen Matrixelemente berechnet. Diese sind gegeben durch  $\langle k | \hat{H}_0 | j \rangle = \langle n_1, n_2, \dots, n_L | \hat{H}_0 | n'_1, n'_2, \dots, n'_L \rangle$ . Da in  $\hat{H}_0$  nur der Operator  $\hat{n}_i$  vorkommt, für welchen  $\hat{n}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle$  gilt, wird dessen Matrixdarstellung eine Diagonalf orm einnehmen. Die numerischen Werte auf der Diagonalen können dann mit der expliziten Form von  $\hat{H}_0$  berechnet werden. Bereits hier sollen dabei jedoch die Zustände, wie in der zweiten Quantisierung üblich, mithilfe der bosonischen Aufsteigeoperatoren aus dem Vakuumzustand  $|0\rangle$  erzeugt werden. Anstelle des normierten

Zustandes  $|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$  wird nun also der Zustand  $|k\rangle = (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle$  genutzt, was später nochmal von entscheidender Wichtigkeit sein wird.

Dieser Zustand ist aufgrund der Definition der bosonischen Aufsteigeoperatoren offensichtlich nicht normiert. Dies löst man, indem man vom bisherigen Eigenwertproblem  $\hat{H}_0 |\psi\rangle = E |\psi\rangle$  zum verallgemeinerten Eigenwertproblem  $\hat{H}_0 |\psi\rangle = E \hat{A} |\psi\rangle$  übergeht. Die Einträge  $\hat{A}_{ij}$  der Matrix sind gegeben durch das zugehörige Skalarprodukt  $\langle i|j\rangle$  der gewählten Basisvektoren [39]. Seien die Zustände mithilfe der Hashfunktion über  $|Hf = 0\rangle, \dots, |Hf = d - 1\rangle$  denotiert, so gilt für die Matrix  $\hat{A}$ , da die Basiszustände zwar nicht normiert aber trotzdem orthogonal zueinander sind,

$$\hat{A} = \text{diag}(\langle Hf = 0|Hf = 0\rangle, \langle Hf = 1|Hf = 1\rangle, \dots, \langle Hf = d - 1|Hf = d - 1\rangle).$$

Sei nun  $|k\rangle = (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle$  ein allgemeiner Zustand, so erhält man für diese Einträge

$$\begin{aligned} \langle k|k\rangle &= \langle 0|(b_1)^{n_1} (b_2)^{n_2} \dots (b_L)^{n_L} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle \\ &= \langle 0|(b_1)^{n_1} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2)^{n_2} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L)^{n_L} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle \\ &= n_1! n_2! \dots n_L!. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Hierbei wurde die Wirkung der bosonischen Operatoren aus Gleichung (2.5) auf einen Zustand  $|n\rangle$  ausgenutzt, woraus  $\langle 0|(b)^n (b^\dagger)^n |0\rangle = \langle 0|(b)^n \sqrt{n!} |n\rangle = \langle 0|n! |0\rangle = n!$  folgt. Dass die Operatoren, welche unterschiedliche Gitterplätze betreffen, vertauschen, folgt aus den Kommutatorrelationen in Gleichung (2.4).

Die Fakultäten in Gleichung (4.7) sorgen dafür, dass auf der Diagonalen von  $\hat{A}$  nur Werte  $> 0$  stehen. Die Matrix ist regulär und die invertierte Matrix  $\hat{A}^{-1}$  ist auch durch eine Diagonalmatrix gegeben, jedoch sind alle Diagonaleinträge im Vergleich zu  $\hat{A}$  invertiert. Das verallgemeinerte Eigenwertproblem reduziert sich auf  $\hat{A}^{-1} \hat{H}_0 |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ . Daraus folgt direkt, dass bei der Berechnung eines Matrixelementes von  $\hat{H}_0$  aus der  $k$ -ten Zeile, dieses mit dem Skalarprodukt  $1/\langle k|k\rangle$  multipliziert werden muss. Im Folgenden sei mit  $\hat{H}_0$  die Matrix nach der Matrixmultiplikation  $\hat{A}^{-1} \hat{H}_0$  bezeichnet.

Die Einträge auf der Diagonalen von  $\hat{H}_0$  kann man also über die folgende Gleichung für die Matrixelemente  $(\hat{H}_0)_{kk}$  berechnen:

$$(\hat{H}_0)_{kk} = \frac{\langle k|\hat{H}_0|k\rangle}{\langle k|k\rangle} = \frac{\langle 0|(b_1)^{n_1} (b_2)^{n_2} \dots (b_L)^{n_L} \hat{H}_0 (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle}{n_1! n_2! \dots n_L!}$$

Der Zähler ergibt (die Summe über die Gitterplätze läuft bei einem endlichen Graphen von  $i = 1$  bis  $L$ )

$$\begin{aligned} &\langle 0|(b_1)^{n_1} (b_2)^{n_2} \dots (b_L)^{n_L} \hat{H}_0 (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle \\ &= \langle 0|(b_1)^{n_1} (b_2)^{n_2} \dots (b_L)^{n_L} \left( \frac{1}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \right) (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle \\ &= \sum_i \langle 0|(b_1)^{n_1} (b_2)^{n_2} \dots (b_L)^{n_L} \left[ \frac{1}{2} (b_i b_i^\dagger - 1) (b_i b_i^\dagger - 2) \right] (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Eine kurze Nebenrechnung ergibt nun

$$\begin{aligned} \langle 0 | (b_i)^{n_i} (b_i b_i^\dagger - 1) (b_i b_i^\dagger - 2) (b_i^\dagger)^{n_i} | 0 \rangle &= \langle 0 | \left[ (b_i)^{n_i} b_i b_i^\dagger b_i b_i^\dagger (b_i^\dagger)^{n_i} - 3 (b_i)^{n_i+1} (b_i^\dagger)^{n_i+1} + 2 (b_i)^{n_i} (b_i^\dagger)^{n_i} \right] | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | (b_i)^{n_i+1} (b_i b_i^\dagger - 1) (b_i^\dagger)^{n_i+1} | 0 \rangle - 3 (n_i + 1)! + 2 n_i! \\ &= (n_i + 2)! - 4 (n_i + 1)! + 2 n_i!. \end{aligned}$$

Gleichung (4.8) kann somit fortgeführt werden zu

$$\sum_i n_1! n_2! \dots \left[ \frac{1}{2} ((n_i + 2)! - 4 (n_i + 1)! + 2 n_i!) \right] \dots n_L!.$$

Somit erhält man letztendlich das Matrixelement  $(\hat{H}_0)_{kk}$ :

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0)_{kk} &= \sum_i \frac{n_1! n_2! \dots \left[ \frac{1}{2} ((n_i + 2)! - 4 (n_i + 1)! + 2 n_i!) \right] \dots n_L!}{n_1! n_2! \dots n_L!} \\ &= \sum_i \frac{\frac{1}{2} ((n_i + 2)! - 4 (n_i + 1)! + 2 n_i!)}{n_i!} \\ &= \sum_i \frac{1}{2} (n_i + 2)(n_i + 1) - 2(n_i + 1) + 1 \\ &= \sum_i \frac{1}{2} n_i (n_i - 1) \end{aligned} \tag{4.9}$$

Dieses Ergebnis des verallgemeinerten Eigenwertproblems führt somit zum gleichen Ergebnis, welches die Wahl der normierten Basis  $|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$  relativ leicht ersichtlich geliefert hätte. Dies ist mit der Diagonalform von  $\hat{H}_0$  begründbar. Beim Aufsetzen der Matrixelemente von  $\hat{V}$  in der unnormierten Basis wird diese Methode jedoch einen Vorteil bieten, weswegen diese bereits hier eingeführt wurde.

Mit diesem Vorgehen erhält man als Matrixdarstellung von  $\hat{H}_0$  für das Beispiel von  $N = L = 3$  und somit  $n = 1$

$$\hat{H}_0 = \text{diag}(3, 1, 1, 3, 1, 0, 1, 1, 1, 3).$$

Wie gewünscht besitzt somit in Abbildung 4.1 der sechste Zustand von oben die niedrigste Energie<sup>2</sup>, welcher in der Tat der Mott-Isolator mit einem Teilchen pro Gitterplatz ist.

### 4.1.2 Aufsetzen der Matrixdarstellung von $\hat{V}$

Auch die Störmatrix  $\hat{V}$  braucht es als Matrixdarstellung in der ungestörten Basis, das heißt es werden die Matrixelemente  $\hat{V}_{jk} = \langle j | \hat{V} | k \rangle$  gesucht, wobei  $|k\rangle$  bzw.  $|j\rangle$  erneut die unnormierten Eigenzustände von  $\hat{H}_0$  darstellen, welche durch die Erzeugung der Besetzungszahlen  $\{n_i\}$  der einzelnen Gitterplätze mithilfe der bosonischen Aufsteigeoperatoren  $|k\rangle = (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle$  beschreibbar sind. Es muss somit weiterhin das verallgemeinerte Eigenwertproblem gelöst werden, das heißt für ein Matrixelement in der  $k$ -ten Zeile muss das Matrixelement mit  $1/\langle k | k \rangle$  multipliziert werden (siehe Gleichung (4.7)).

<sup>2</sup> Das Vorgehen wurde einheitenlos, als der Hamiltonian auf  $U$  skaliert wurde.

Somit erhält man für die Matrixelemente  $\hat{V}_{kj}$  (auch hier steht  $\hat{V}$  für  $\hat{A}^{-1}\hat{V}$ ):

$$\hat{V}_{kj} = \frac{\langle k|\hat{V}|j\rangle}{\langle k|k\rangle} = \frac{\langle 0|(b_1)^{n_1}(b_2)^{n_2}\dots(b_L)^{n_L}[-\sum_{\langle i,j\rangle}(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i)](b_1^\dagger)^{n'_1}(b_2^\dagger)^{n'_2}\dots(b_L^\dagger)^{n'_L}|0\rangle}{n_1!n_2!\dots n_L!}$$

Das Skalarprodukt im Zähler wird nur einen Beitrag liefern wenn für jeden Gitterplatz exakt die gleiche Anzahl an Absteigeoperatoren  $b_i$  wie Aufsteigeoperatoren  $b_i^\dagger$  vorliegt. Für zwei gegebene Zustände  $|k\rangle$  und  $|j\rangle$  mit den Besetzungszahlen  $n_1, n_2, \dots, n_L$  und  $n'_1, n'_2, \dots, n'_L$  wie es in obiger Gleichung angenommen wurde, wird es somit nur ein Matrixelement ungleich null von  $\hat{V}$  geben, falls vom Zustand  $|k\rangle$  ein Teilchen vom Gitterplatz  $i$  auf einen benachbarten Gitterplatz  $j$  bewegt wird. Mithilfe der Besetzungszahlen lässt sich das leicht ausdrücken. Es gibt nur dann einen Eintrag in der Matrixdarstellung von  $\hat{V}$ , falls für die Besetzungszahlen von den Zuständen  $|j\rangle$  und  $|k\rangle$  eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:

$$n_1, n_2, \dots, n_m, n_p, \dots, n_L \begin{cases} \rightarrow n_1, n_2, \dots, n_m - 1, n_p + 1, \dots, n_L \\ \rightarrow n_1, n_2, \dots, n_m + 1, n_p - 1, \dots, n_L \end{cases}$$

Im Folgenden wird nur das Matrixelement des oberen Falls berechnet werden, jedoch lässt sich das Vorgehen leicht auf den zweiten Fall anwenden, was letztendlich zum gleichen Ergebnis führt.

$$\begin{aligned} \hat{V}_{kj} &= \frac{\langle 0|(b_1)^{n_1}\dots(b_m)^{n_m}(b_p)^{n_p}\dots(b_L)^{n_L}[-\sum_{\langle i,j\rangle}(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i)](b_1^\dagger)^{n_1}\dots(b_m^\dagger)^{n_m-1}(b_p^\dagger)^{n_p+1}\dots(b_L^\dagger)^{n_L}|0\rangle}{n_1!n_2!\dots n_L!} \\ &= \frac{-\langle 0|(b_1)^{n_1}\dots(b_m)^{n_m}(b_p)^{n_p}\dots(b_L)^{n_L}[b_m^\dagger b_p + b_p^\dagger b_m](b_1^\dagger)^{n_1}\dots(b_m^\dagger)^{n_m-1}(b_p^\dagger)^{n_p+1}\dots(b_L^\dagger)^{n_L}|0\rangle}{n_1!n_2!\dots n_L!} \\ &= \frac{-\langle 0|(b_1)^{n_1}\dots(b_m)^{n_m}(b_p)^{n_p}\dots(b_L)^{n_L}b_m^\dagger b_p(b_1^\dagger)^{n_1}\dots(b_m^\dagger)^{n_m-1}(b_p^\dagger)^{n_p+1}\dots(b_L^\dagger)^{n_L}|0\rangle}{n_1!n_2!\dots n_L!} \\ &= \frac{-\langle 0|(b_1)^{n_1}(b_1^\dagger)^{n_1}\dots(b_m)^{n_m}(b_m^\dagger)^{n_m}(b_p)^{n_p+1}(b_p^\dagger)^{n_p+1}\dots(b_L)^{n_L}(b_L^\dagger)^{n_L}|0\rangle}{n_1!n_2!\dots n_L!} \\ &= -\frac{n_1!\dots n_m!(n_p+1)!\dots n_L!}{n_1!\dots n_m!n_p!\dots n_L!} \\ &= -(n_p+1) \end{aligned} \tag{4.10}$$

Für das gewünschte Matrixelement vergleicht man also die Besetzungszahlen vorher und nachher. Ist zwischen diesen beiden Zuständen lediglich ein Teilchen von einem Gitterplatz auf einen benachbarten gewechselt, so ist das Matrixelement durch die Besetzungszahl desjenigen Gitterplatzes gegeben, auf welchen das Teilchen gewechselt ist. Alle sonstigen Matrixelemente von  $\hat{V}$  verschwinden.

Der große Vorteil der gewählten Basis wird hier deutlich. Man erhält als Einträge in der Matrix  $\hat{V}$  auf diese Weise ganze Zahlen. Hätte man die normierte Basis der Besetzungszahlen  $|n_1, \dots, n_L\rangle$  gewählt, so hätte dies zu Einträgen bestehend aus Wurzeln (siehe Gleichung (2.5)) und somit teilweise irrationaler Zahlen geführt. In den folgenden Gleichungen für die Grundzustandsenergie wird klar werden, dass die ganzen Zahlen in der Matrix letztendlich zu rationalen Vorfaktoren der Reihenentwicklung führen, weswegen es sich anbietet alle Zahlen im rationalen Format zu speichern. Bei der normierten Basis der Besetzungszahlen wären die Wurzelfaktoren zwar später wieder weggefallen, da ja das Ergebnis

letztendlich das gleiche sein muss, jedoch verhindern die zwischendurch auftretenden irrationalen Zahlen eine Möglichkeit der Speicherung der Zahlen als rationale Zahlen.

Somit ergibt sich für das Beispiel mit  $N = L = 3$  die folgende Matrixdarstellung von  $\hat{V}$ :

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & -2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & -3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & -2 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -1 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Diese Matrix hat zwar wie erwartet symmetrische Einträge, ist jedoch aufgrund der Wahl der unnormierten Basis nicht mehr hermitesch!

### 4.1.3 Grundzustandsenergie der einzelnen Graphen

Nachdem nun sowohl  $\hat{H}_0$  als auch  $\hat{V}$  in Matrixdarstellung vorliegen, braucht es für die Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen die Kenntnis der Grundzustandsenergie der einzelnen Graphen. Aus den Matrixdarstellungen von  $\hat{H}_0$  und  $\hat{V}$  und somit natürlich auch des kompletten Hamiltonians  $\hat{H}$  könnte diese numerisch durch Diagonalisierung oder bei größeren Matrizen zum Beispiel durch das Lanczos-Verfahren gewonnen werden, jedoch wird die Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen letztendlich eine Reihenentwicklung der Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes nach der Variablen  $\lambda = t/U$  liefern. Man kann also auch direkt die Grundzustandsenergien der endlichen Matrizen in einer solchen Reihenentwicklung störungstheoretisch berechnen.

Die technischen Details einer solchen Störungstheorie sind bekannt und können zum Beispiel [36] entnommen werden. Eine ausführliche Herleitung der folgenden Gleichungen findet sich jedoch auch im Anhang (Abschnitt B).

Erneut sei der Hamiltonian gegeben durch  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$  und gesucht ist die Grundzustandsenergie  $E$  in einer Reihenentwicklung bzgl.  $\lambda$ , wofür auch die zugehörige Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  in einer Reihe entwickelt werden muss:

$$E = \sum_{r=0}^{\infty} E_r \lambda^r, \quad |\psi\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r |\psi_r\rangle$$

Mit diesem Ansatz erhält man letztendlich die folgenden beiden zentralen Gleichungen:

$$E_r = \sum_j \hat{V}_{0j} c_{j,r-1}, \quad c_{k,r} = \frac{1}{e_k - e_0} \left[ - \sum_j \hat{V}_{kj} c_{j,r-1} + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} c_{k,s} \right] \quad (4.12)$$

Hier sind  $\hat{V}_{kj} = \langle k|\hat{V}|j\rangle$  die Matrixelemente der ungestörten Basis von  $\hat{H}_0$ ,  $c_{k,r} = \langle k|\psi_r\rangle$  ist das Skalarprodukt des ungestörten Basisvektors  $|k\rangle$  mit der Korrektur der Grundzustandswellenfunktion der  $r$ -ten Ordnung, die Summe über  $j$  steht für die Summe über die ungestörte Basis von  $\hat{H}_0$  und  $e_k$  bzw.  $e_0$  bezeichnen die Energie des ungestörten Zustandes  $|k\rangle$  bzw. des Grundzustandes von  $\hat{H}_0$ . Weiterhin ist klar, dass  $E_0$  gerade der Grundzustandsenergie  $e_0$  von  $\hat{H}_0$  entspricht und  $|\psi_0\rangle$  somit der zugehörigen Grundzustandswellenfunktion. Weiterhin werden die Korrekturen der Grundzustandswellenfunktion  $|\psi_r\rangle$

für  $r > 0$  allesamt orthogonal zur ungestörten Grundzustandswellenfunktion gewählt  $c_{0,r} = 0$  ( $r > 0$ ). Mithilfe der bereits aufgesetzten Matrizen von  $\hat{H}_0$  bzw.  $\hat{V}$  sind diese Gleichungen vom Prinzip her sehr leicht anwendbar. Bedenken muss man lediglich, dass der Grundzustand von  $\hat{H}_0$  über die Hashfunktion nicht unbedingt die Zahl 0 zugewiesen bekommt, sondern zum Beispiel im Falle  $N = L = 3$  die 5. In den Gleichungen (4.12) müssen somit statt  $\hat{V}_{0j}$  die Matrixelemente  $\hat{V}_{5j}$  genutzt werden. Die Energien  $e_k$  sind jeweils durch das Matrixelement  $(\hat{H}_0)_{kk}$  gegeben, womit  $e_0$  in diesem Falle durch  $e_5$  ersetzt werden muss. Auch werden statt die  $c_{0,r}$  ( $r > 0$ ) alle  $c_{5,r} = 0$  gesetzt. Den Hash des Grundzustandes rauszufinden gestaltet sich jedoch insofern relativ einfach, da die Form des Grundzustandes bekannt ist (Mott-Isolator). Die Summe über  $j$  läuft aufgrund der Hashfunktion schlicht von 0 bis  $d - 1$  und man erhält in Gleichung (4.12), wenn man  $c_{j,r}$  gleichermaßen als Matrix speichert das bildliche Zeile mal Spalte-Prinzip der Matrixmultiplikation.

Für das gewählte Beispiel  $N = L = 3$  erhält man mithilfe dieser Methode bis zur Ordnung  $r = 6$  (die Matrix  $c_{j,r}$  benötigt man dann nur bis  $r = 5$ ):

$$E_3 = -8\lambda^2 + 20\lambda^4 + \frac{40}{3}\lambda^6, \quad c = \begin{matrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{34}{3} \\ 0 & 0 & 3 & 0 & -26 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{112}{3} \\ 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & -\frac{16}{9} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -5 & 0 & 34 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{112}{3} \\ 0 & 1 & 0 & -5 & 0 & 34 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & -26 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{34}{3} \end{pmatrix} \\ \begin{matrix} \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \end{matrix} \\ \begin{matrix} j = 0, \dots, 9 \end{matrix} \end{matrix} \quad (4.13)$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{r = 0, \dots, 5}$$

#### 4.1.4 Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes

Mittels der gerade eräuterten Methoden ist es nun also möglich die Grundzustandsenergie der einzelnen Graphen zu berechnen. Die ersten drei relevanten Graphen haben für die Dichte  $n = 1$  hierbei die folgende Grundzustandsenergie:

$$\begin{array}{ll} \bullet \text{---} \bullet & E_2 = -4\lambda^2 + 16\lambda^4 - 128\lambda^6 \\ \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet & E_3 = -8\lambda^2 + 20\lambda^4 + \frac{40}{3}\lambda^6 \\ \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet & E_4 = -12\lambda^2 + 24\lambda^4 + \frac{392}{9}\lambda^6 \end{array}$$

Für  $n = 1$  mit  $\mu/U = 0$  verschwindet  $E_1$ , da es bei einem Graphen der Länge eins nicht zu Korrekturen über den kinetischen Term kommen kann. Für alle größeren Dichten kommt es somit auch nur zu einem Term in der nullten Ordnung.

Nun können die Gewichte der einzelnen Graphen berechnet werden, welche hier abgekürzt durch  $\epsilon_i$  mit  $i$  der Länge der Graphen denotiert seien. Dies geschieht über die Gleichung (4.3), wobei der

Einbettungsfaktor über Gleichung (4.4) gegeben ist.

$$\begin{aligned}
 \epsilon_2 = E_2 &= -4\lambda^2 + 16\lambda^4 - 128\lambda^6 \\
 \epsilon_3 = E_3 - 2\epsilon_2 &= -12\lambda^4 + \frac{808}{3}\lambda^6 \\
 \epsilon_4 = E_4 - 3\epsilon_2 - 2\epsilon_3 &= -\frac{1000}{9}\lambda^6
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Hieraus erhält man mit Gleichung (4.2) die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes bis zur sechsten Ordnung:

$$\frac{E_{\text{Mott}}}{N} = \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 = -4\lambda^2 + 4\lambda^4 + \frac{272}{9}\lambda^6$$

All diese Ergebnisse aus diesem Kapitel stehen im Einklang mit den Ergebnissen von Elstner und Monien [14]. Des Weiteren fallen zwei Dinge auf:

1. Der Term der höchsten Ordnung in den Gewichten der einzelnen Graphen aus Gleichung (4.14) ist proportional zu  $\lambda^{2b}$ , wobei  $b$  die Anzahl der Bindungen der Graphen ist. Dies liegt daran, dass der Störoperator  $\hat{V}$  startend von einem Zustand mindestens zweimal wirken muss, um wieder beim ungestörten Grundzustand zu landen und zwar indem ein Teilchen eines Gitterplatzes auf einen benachbarten Platz bewegt wird und direkt danach wieder zurück. Somit kann der Term der höchsten Ordnung in den Grundzustandsenergien nur proportional zu  $\lambda^2$  sein. Die führenden Terme müssen dann bei dem Abziehen der Untergraphen gerade verschwinden, was zu dem gewünschten Verhalten der Gewichte der einzelnen Graphen führt.

Dies kann man auch sehr gut anhand der Gleichungen (4.12) belegen. Setzt man in die Gleichung für  $E_r$  die  $c_{j,r-1}$  immer wieder ein, so erhält man Terme der folgenden Form innerhalb der Gleichung [35]:

$$\begin{aligned}
 E_r &\propto \sum_{j_1, j_2, \dots, j_r} \langle 0 | \hat{V} | j_1 \rangle \langle j_1 | \hat{V} | j_2 \rangle \dots \langle j_{r-1} | \hat{V} | j_r \rangle \langle j_r | 0 \rangle \\
 &= \sum_{j_1, j_2, \dots, j_{r-1}} \langle 0 | \hat{V} | j_1 \rangle \langle j_1 | \hat{V} | j_2 \rangle \dots \langle j_{r-1} | \hat{V} | 0 \rangle
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Man beginnt also quasi beim ungestörten Zustand  $|0\rangle$ , welcher dem Mott-Isolator entspricht und mit jeder Anwendung des kinetischen Terms  $\hat{V}$  kann man sich um einen Schritt von diesem Zustand entfernen. Damit es aber zu einem Beitrag zu der Energie  $E_r$  kommt, muss man nach  $r$  Schritten wieder beim Grundzustand angekommen sein. Dies ist für die gegebene Wirkung von  $\hat{V}$  bei dem bekannten Grundzustand  $|0\rangle$  nur für eine gerade Anzahl von Anwendungen von  $\hat{V}$  möglich, weswegen nur gerade Potenzen der Grundzustandsenergie auftreten.

Anhand der Ergebnisse der Gewichte der Graphen kann man also sehr gut sehen, dass die Methode wie gewünscht funktioniert.

2. Der zweite Punkt folgt direkt aus dem 1. Punkt. Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz im thermodynamischen Limes  $E_{\text{Mott}}/N$  kann somit nur gerade Terme von  $\lambda$  enthalten, was auch jeweils zur Prüfung der Richtigkeit des Ergebnisses genutzt werden kann.

### 4.1.5 Optimierungen des Programmes

Nachdem die Grundprinzipien des Programmes erklärt wurden, soll in diesem Abschnitt kurz darauf eingegangen werden, wie man das Programm effizienter gestalten kann.

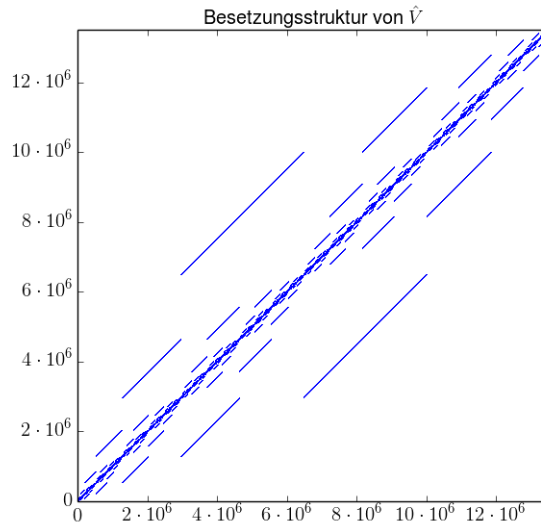


Abbildung 4.2: Besetzungsstruktur von  $\hat{V}$  für  $N = L = 12$ . Jeder Eintrag der Matrix ungleich null wurde mit einem blauen Punkt gekennzeichnet und der weiße Bereich zeigt somit die Einträge gleich null an. Die Dimension des Hilbertraumes ist  $D = 1\,352\,078$  und von den  $1\,828\,114\,918\,084$  möglichen Einträgen der Matrix sind nur  $15\,519\,504$  ungleich null, was  $0,0008$  Prozent entspricht.

Zunächst einmal muss die Basis selber (siehe Abbildung 4.1) nicht gespeichert werden, da man für alle folgenden Gleichungen nur die Matrixdarstellungen von  $\hat{H}_0$  bzw.  $\hat{V}$  braucht. Wenn nach und nach die einzelnen Basiszustände erzeugt werden, kann über Gleichung (4.9) zunächst das zugehörige Matrixelement  $(\hat{H}_0)_{kk}$  berechnet werden.

Für die Matrixelemente von  $\hat{V}$  nutzt man aus, dass man die Wirkung von  $\hat{V}$  genau kennt. Man nimmt somit den Zustand, subtrahiert nacheinander von jedem Gitterplatz, auf welchem sich mindestens ein Teilchen befindet, ein Teilchen und addiert dieses auf die benachbarten Gitterplätze. So hat man einen neuen Zustand erzeugt und kann dann mit Gleichung (4.10) das korrespondierende Matrixelement von  $\hat{V}$  der beiden Zustände berechnen. Dies hat auch den großen Vorteil, dass man letztendlich nicht jedes Matrixelement von  $\hat{V}$  berechnet, sondern nur diejenigen, welche einen Eintrag ungleich null haben.

Das führt direkt zum nächsten Punkt, welchen man berücksichtigen sollte: Gleichung (4.11) und Gleichung (4.13) zeigen bereits exemplarisch, dass sowohl die Matrix  $\hat{V}$  als auch die Matrixdarstellung von  $c$  sehr viele Einträge gleich null besitzen. Dies sei in der Abbildung 4.2 nochmals für  $N = L = 12$  am Beispiel der Matrix  $\hat{V}$  verdeutlicht. Für beide Matrizen lohnt es sich somit, mit sogenannten dünnbesetzten Matrizen zu arbeiten, welche die Einträge gleich null nicht speichern. Beide Matrizen werden hierbei Spalte für Spalte aufgebaut, weswegen sich besonders die Speicherung im sogenannten CCS-Format anbietet, da es für dieses Format auch einen effizienten Algorithmus von Gustavson für die nötige Matrixmultiplikation in Gleichung (4.12) gibt [40]. Das Speicherformat, welches einen sehr wichtigen Teil des geschriebenen Programmes darstellt, wird aufgrund dessen im Anhang erklärt. (Abschnitt C).

Während des Aufsetzens der beiden Matrizen  $\hat{H}_0$  und  $\hat{V}$  ist es sehr häufig notwendig, die Hashfunktion aus Gleichung (4.6) zu nutzen, in welcher immer wieder Binomialkoeffizienten berechnet werden müssen (siehe Gleichung (4.5)). Statt die dort auftretenden Fakultäten zu berechnen, ist es deutlich effizienter, einmal das Pascalsche Dreieck aufzusetzen und zu speichern, welches die benötigten Binomialkoeffizienten beinhaltet. Von diesem Dreieck muss aufgrund der Symmetrie außerdem nur eine Hälfte gespeichert



werden.

Bereits diese einfachen Tricks sparen eine Menge an Speicherplatz und Rechenzeit. Ein weiterer Kniff, welcher in der Literatur Anklang findet [35, 36], folgt aus Gleichung (4.15). Bei der Berechnung der Grundzustandsenergie der  $r$ -ten Ordnung  $E_r$  wendet man im Prinzip  $r$  mal den Störungsterm  $\hat{V}$  an, muss dann jedoch wieder bei Grundzustand  $|0\rangle$  angekommen sein. Der Zustand, welcher vom Grundzustand aus die meisten Anwendungen von  $\hat{V}$  braucht, muss somit in der Mitte liegen, das heißt es sind nur die Zustände  $|k\rangle$  wirklich relevant, für welche  $\langle k|\hat{V}^q|0\rangle \neq 0$  mit  $q = \frac{r}{2}$  für gerade  $r$  bzw.  $q = \frac{r-1}{2}$  für ungerade  $r$  gilt.

Programmiertechnisch beginnt man für eine gewünschte Ordnung  $r$  beim Grundzustand (der Mott-Isolator), wendet  $q$  mal den Term  $\hat{V}$  an und speichert welche Zustände entstanden sind. Nur für diese Zustände müssen dann die Größen  $\langle k|\psi_i\rangle = c_{k,i}$  für alle Ordnungen  $i$  berechnet werden. Dies verspricht zunächst einmal erneut einen großen Vorteil bezüglich des Speichers und der Rechenzeit, jedoch kam es in der finalen Version des Codes zum Konflikt mit der Speicherung der Matrizen im CCS-Format bzw. der Matrixmultiplikation nach Gustavson. Hier kam es zu einem Zeitverlust, da letztendlich die Liste der relevanten Zuständen immer wieder durchsucht werden musste. Selbst mit einer binären Suche verlangsamte dies das Programm und auf die Gewinne bzgl. des Speichers wurde aufgrund dessen verzichtet.

Ein weiterer sehr wichtiger Punkt des geschriebenen Programms beruht auf der Erklärung in Abschnitt 4.1.2, dass auf dem ganzen Rechenweg und insbesondere im Ergebnis nur rationale Zahlen auftreten. Zur Speicherung dieser wurde die *GNU Multiple Precision Arithmetic Library* genutzt. Das sonstige Programm ist nur mithilfe der Standardbibliothek von C++ entworfen.

## 4.2 Berechnung der Einteilchen- und Einlochanregungsenergie

In diesem Abschnitt soll nun beschrieben werden, wie man mithilfe der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen die Dispersion der Einteilchen- bzw. Einlochanregungen relativ zur Grundzustandsenergie erhält, welche man letztendlich für die Phasengrenzen des Bose-Hubbard-Modells benötigt.

### 4.2.1 Berechnung des effektiven Hamiltonians

Wie zuvor betrachtet man zunächst einen Hamiltonian der Form  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$ . Bei der Betrachtung von endlichen Graphen wie im vorigen Abschnitt fällt zunächst auf, dass bei der Verteilung der  $nL \pm 1$  Teilchen auf  $L$  Gitterplätze für die Einteilchen- bzw. Einlochanregung der Grundzustand von  $\hat{H}_0$  (Mott-Isolator mit einem Teilchen mehr/weniger) entartet ist. Das führt dazu, dass die im Abschnitt 4.1 aus der Störungstheorie erlangten Gleichungen hier nicht genutzt werden können.

Nach Gelfand ist die Schlüsselidee nun, einen Hamiltonian  $\tilde{H}$  der endlichen Graphen zu finden, sodass die Matricelemente zwischen den entarteten Einteilchen- bzw. Einlochzuständen und allen übrigen Zuständen verschwinden [41]. Nimmt man also an, dass es insgesamt  $d$  Zustände des Hamiltonians  $\hat{H}_0$  gibt und dass die ersten  $L$  Zustände gerade die entarteten Anregungszustände sind<sup>3</sup>, so soll  $\tilde{H}$  in einen Block der Größe  $L \times L$  in der oberen linken Ecke, welcher die Wechselwirkung zwischen den Anregungszuständen beschreibt und einen  $(d-L) \times (d-L)$  Block zerfallen, welcher die sonstige für diesen Fall irrelevante Physik des Graphen beinhaltet. Der relevante Block sei im Folgenden als effektiver

<sup>3</sup> Von diesen gibt es gerade  $L$  Stück, da ausgehend vom Mott-Isolator auf jeden der  $L$  Gitterplätze ein Teilchen addiert werden kann.

Hamiltonian  $h_{\text{eff}}$  bezeichnet. Eine solche Darstellung erhält man über eine Ähnlichkeitstransformation:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= O^{-1} \hat{H} O \\ \Rightarrow \tilde{H} &= \begin{pmatrix} h_{\text{eff}} & | & 0 \\ \hline 0 & | & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Aus diesen effektiven Hamiltonians der endlichen Graphen kann dann mittels der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen auf den effektiven Hamiltonian des unendlichen Gitters geschlossen werden. Dieser beschreibt dann vollständig die Physik der Einteilchen- bzw. Einlochanregungen und man kann hieraus die gesuchten Dispersionsrelationen ableiten. Zunächst sei jedoch erklärt, wie man die effektiven Hamiltonians für endliche Graphen bestimmt und hiermit die Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen durchführt, um den effektiven Hamiltonian im thermodynamischen Limes zu erhalten.

Für einen endlichen Graphen kann eine solche Ähnlichkeitstransformation Ordnung für Ordnung des Störungsparameters  $\lambda$  durchgeführt werden [36, 41]. Für eine Herleitung dieser Entwicklung sei auf Abschnitt D verwiesen. Hier seien nur die Gleichungen aufgelistet, mit welchem man die Matrixelemente der ungestörten Basis  $|i\rangle$  von  $\hat{H}_0$  der  $r$ -ten Ordnung von  $h_{\text{eff}}$  und  $O$  erhält:

$$\begin{aligned} (h_{\text{eff}})_{ij}^{(r)} &= X_{ij}^{(r)}, & e_i &= e_j \\ O_{ij}^{(r)} &= \frac{1}{e_i - e_j} X_{ij}^{(r)}, & e_i &\neq e_j \end{aligned} \quad (4.16)$$

Hierbei ist  $e_i = \langle i | \hat{H} | i \rangle$  nach wie vor die Energie des ungestörten Zustandes  $|i\rangle$  ( $e_j$  analog) und die Matrix  $X^{(r)}$  ist vollständig durch  $h_{\text{eff}}$  und  $O$  bei kleineren Ordnungen als  $r$  bestimmt:

$$X^{(r)} = \hat{V} O^{(r-1)} - \sum_{s=1}^{r-1} O^{(r-s)} \tilde{H}^{(s)}.$$

Mit  $O^{(0)} = I$  (Identitätsmatrix) und  $\tilde{H}^{(0)} = \hat{H}_0$  kann man mit Gleichung (4.16) den effektiven Hamiltonian bis zur gewünschten Ordnung  $r$  und die Blöcke neben der Diagonalen von der Transformationsmatrix  $O$  berechnen. Die Einträge von  $O$  innerhalb der Blöcke auf der Diagonalen können abhängig von der genutzten Methode gewählt werden. In diesem Fall genügt es, diese wie Gelfand im Jahre 1996 auf null zu setzen [41], was zu einer nicht orthogonalen Matrix führt. Eine kurze Diskussion, wann dies suboptimal sein könnte, findet sich nach [36] im Anhang D. Der große Vorteil dieser Methode ist, dass man von der Transformationsmatrix nur den linken Block der Größe  $d \times L$  speichern muss, was sehr viel Speicherplatz spart.

Für die Durchführung dieser Entwicklung braucht es auch hier wieder das Aufsetzen der ungestörten Basis von  $\hat{H}_0$ , dessen Matrixdarstellung und auch die Matrixdarstellung von  $\hat{V}$  in dieser Basis. Hier können jedoch all die Ideen aus dem vorigen Abschnitt 4.1 einfach übertragen werden. Zum Aufsetzen der Basis werden alle Teilchen, das heißt  $n \cdot L + 1$  für die Einteilchenanregung und  $n \cdot L - 1$  für die Einlochanregung, auf den ersten Gitterplatz gefüllt und der gleiche Algorithmus angewendet wie zuvor. Die Dimension  $d$  des so entstehenden Hilbertraumes ist durch Gleichung (4.5) gegeben und die Hashfunktion von Elstner und Monien aus Gleichung (4.6) nummeriert diese weiterhin von 0 bis  $d - 1$ . Die Matrixdarstellung von  $\hat{H}_0$  folgt daraus mit Gleichung (4.9). Die Matrixdarstellung von  $\hat{V}$  erhält man bei der Erzeugung der Basiszustände durch die Wirkung von  $\hat{V}$  auf jeden Zustand, die darauffolgende Betrachtung welcher Zustand entsteht und die Berechnung des Matrixelements mithilfe von Gleichung (4.10).

### 4.2.2 Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen

Das nächste auftretende Problem ist die Durchführung der Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen für die Einteilchen- bzw. Einlochanregungen. Hierfür seien im Folgenden exemplarisch die Einteilchenanregungen betrachtet, das Verfahren kann jedoch leicht auf die Einlochanregungen übertragen werden. Die hier beschriebene Methode beruht vor allem auf einer Behandlung dieses Themas von Gelfand aus dem Jahre 1996 [41].

Das Problem bei diesen Anregungen ist, dass die Bedingung für das Verschwinden der Gewichte disjunkter Graphen aus Gleichung (3.6) nicht greift. Anschaulich stelle man sich hierfür einen Graphen  $G$  aus zwei getrennten Graphen  $A$  und  $B$  vor. Die Einteilchenanregung liegt dann entweder in  $A$  oder  $B$ , während im jeweils anderen Graphen keine Anregung vorliegt. Wendet man auf diesen Zustand die Störung  $\hat{V}$  an, so wird es, egal wie oft man dies tut, nie dazu kommen, dass die Einteilchenanregung auf den anderen Graphen springt. Der Graph, welcher zum Beginn ein Teilchen mehr als der Mott-Isolator besaß, wird dies auch immer besitzen. Somit gibt es keinen Überlapp mit dem Zustand, wo die Einteilchenanregung auf dem anderen Graphen vorliegt und der jeweils andere Graph liegt im Grundzustand vor. Daraus folgt, dass der effektive Hamiltonian  $h_{\text{eff}}^G$  des Graphen  $G$  die folgende Form hat:

$$h_{\text{eff}}^C = [h_{\text{eff}} + E_B I]_A \otimes [h_{\text{eff}} + E_A I]_B$$

Hierbei ist  $E_{A,B}$  die Grundzustandsenergie des Graphen  $A, B$  und  $I$  der Identitätsoperator. Somit kann man für den effektiven Hamiltonian  $h_{\text{eff}}$  keine Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen durchführen, da dieser nicht schlicht additiv für disjunkte Graphen ist. Zieht man jedoch  $E_C = E_A + E_B$  von obiger Gleichung ab, so erhält man

$$[h_{\text{eff}} - E_C I]_C = [h_{\text{eff}} - E_A I]_A \otimes [h_{\text{eff}} - E_B I]_B .$$

Für  $h_{\text{eff}} - EI$  kann man also sehr wohl eine Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen durchführen, da hier die Bedingung der Additivität bei disjunkten Graphen erfüllt ist und somit die Gewichte der disjunkten Graphen verschwinden. Wie man diese Entwicklung nun durchführt, wird exemplarisch im folgenden Abschnitt erklärt sein.

### 4.2.3 Einteilchenanregungsenergie bis zur 3. Ordnung

In diesem Kapitel sei exemplarisch bis zur dritten Ordnung die Herleitung der Einteilchenanregungsenergie beschrieben. Auf das Aufsetzen der Basis, die Hashfunktion und das Finden der Matrixdarstellungen von  $\hat{V}$  und  $\hat{H}_0$  wird hierbei nicht weiter eingegangen.

Wichtig ist hierbei nur, dass beim Aufsetzen der Basis und des effektiven Hamiltonians die Einteilchenanregungszustände in der Reihenfolge entstehen, dass die Einteilchenanregung zunächst auf dem ganz linken Gitterplatz vorliegt und diese dann Schritt für Schritt nach rechts wandert. Bei der Matrixdarstellung des effektiven Hamiltonians entspricht also das Element 1 dem Zustand  $|2, 1, 1, \dots\rangle$ , das Element 2 dem Zustand  $|1, 2, 1, \dots\rangle$  und so weiter. Sei nun angenommen, dass die Gleichungen (4.16) gelöst sind und man damit für die ersten vier Graphen die folgenden effektiven Hamiltonians erhält:

•	$h_{\text{eff}} = (1)$
• — •	$h_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{3}{2}\lambda^2 & -2\lambda + \frac{3}{2}\lambda^3 \\ -2\lambda + \frac{3}{2}\lambda^3 & 1 - \frac{3}{2}\lambda^2 \end{pmatrix}$
• — • — •	$h_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{11}{2}\lambda^2 & -2\lambda + \frac{21}{2}\lambda^3 & -2\lambda^2 \\ -2\lambda & 1 - 3\lambda^2 & -2\lambda \\ -2\lambda^2 & -2\lambda + \frac{21}{2}\lambda^3 & 1 - \frac{11}{2}\lambda^2 \end{pmatrix}$
• — • — • — •	$h_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{19}{2}\lambda^2 & -2\lambda + \frac{21}{2}\lambda^3 & -2\lambda^2 & -6\lambda^3 \\ -2\lambda & 1 - 7\lambda^2 & -2\lambda + 9\lambda^3 & -2\lambda^2 \\ -2\lambda^2 & -2\lambda + 9\lambda^3 & 1 - 7\lambda^2 & -2\lambda \\ -6\lambda^3 & -2\lambda^2 & -2\lambda + \frac{21}{2}\lambda^3 & 1 - \frac{19}{2}\lambda^2 \end{pmatrix}$

Hier fallen nun mehrere Dinge auf. Erstens ergeben die auftretenden Ordnungen in den einzelnen Matrixelementen Sinn, wenn man die obige Erklärung bedenkt, welches Matrixelement welchem Übergang entspricht. Als Beispiel sei die erste Reihe des effektiven Hamiltonians des Graphen der Länge vier betrachtet. Das erste Element  $(h_{\text{eff}})_{11}$  entspricht dem Übergang  $|2, 1, 1, 1\rangle \rightarrow |2, 1, 1, 1\rangle$ . Nur eine gerade Anzahl von Anwendungen von  $\hat{V}$  können hier zu einem Beitrag führen, weswegen nur gerade Ordnungen von  $\lambda$  auftauchen. Bei dem Übergang  $|2, 1, 1, 1\rangle \rightarrow |1, 2, 1, 1\rangle$ , welcher dem Matrixelement  $(h_{\text{eff}})_{12}$  entspricht, braucht es eine ungerade Zahl von Anwendungen von  $\hat{V}$ . Diese Überlegungen kann man auf diese Weise für alle Matrixelemente durchführen und somit auch die erhaltenen Ergebnisse überprüfen. Weiterhin fällt auf, dass der effektive Hamiltonian nicht in allen Ordnungen hermitesch ist. Dies wurde von Elstner und Monien [14] damit begründet, dass die endlichen Graphen nicht die Translationssymmetrie des Gitters im thermodynamischen Limes besitzen. Die Gitterplätze des endlichen Graphen sind nicht alle gleich und die Einträge des effektiven Hamiltonians hängen auch von der Reihenfolge der entstandenen Zwischenzustände ab und nicht nur von dem Anfangs- und Endzustand. Dies kann man sehr gut an dem Graphen der Länge drei betrachten. Zu dem Matrixelement  $(h_{\text{eff}})_{12}$  trägt in dritter Ordnung unter anderem die Abfolge  $|2, 1, 1\rangle \rightarrow |2, 2, 0\rangle \rightarrow |1, 3, 0\rangle \rightarrow |1, 2, 1\rangle$  bei. Für das Matrixelement  $(h_{\text{eff}})_{21}$  wird diese Abfolge in umgedrehter Reihenfolge beitragen, was letztendlich dazu führt, dass die Hermitizität verloren geht.

Dies wird später rückgängig gemacht werden, wenn über die Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen der effektive Hamiltonian des unendlich langen Gitters berechnet wird, was die Translationssymmetrie und somit die Hermitizität wieder herstellt. Die Inversionssymmetrie der endlichen Graphen sieht man den effektiven Hamiltonians jedoch an, was auch gut zum Überprüfen der Richtigkeit der Ergebnisse genutzt werden kann.

Bevor man nun für die Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen mit der Subtraktion der Untercluster fortfahren kann, muss man von dem effektiven Hamiltonian jeweils die Grundzustandsenergie der Graphen auf der Diagonalen abziehen, da nur dann das Gewicht disjunkter Graphen verschwindet (siehe Abschnitt 4.2.2). Wie man die Grundzustandsenergien der endlichen Graphen berechnet, wurde bereits in Abschnitt 4.1.4 erläutert. Die daraus entstehenden effektiven Hamiltonians seien hier nicht noch einmal explizit hingeschrieben.

Nun muss man die Untercluster abziehen, was sich hier etwas schwieriger gestaltet als bei der Berechnung der Grundzustandsenergie. Hier gilt es nun Matrixelemente voneinander abziehen, das heißt man muss sich bewusst sein, welche Gitterplätze des Graphen mit welchen Gitterplätzen des Unterclusters korrespondieren. Dies sei in der Abbildung 4.3 am Beispiel des Gewichtes des Graphen der Länge drei verdeutlicht, wobei schwarze Punkte die Graphen selber darstellen sollen und rote Dreiecke die Gewichte.

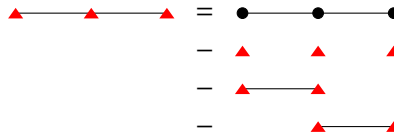


Abbildung 4.3: Verbildlichung des Abziehens der Untercluster um das Gewicht des Graphen der Länge drei zu erhalten. Die Punkte denotieren einen Graphen selber, während die roten Dreiecke für die Gewichte stehen.

$$\begin{aligned}
 W_1 &= \begin{pmatrix} 11 \end{pmatrix} =: \boxed{11} \\
 W_2 &= \begin{pmatrix} 11 & 12 \\ 21 & 22 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \boxed{11} & \\ & \boxed{11} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} 11 & 12 \\ 21 & 22 \end{pmatrix} \\
 W_3 &= \begin{pmatrix} 11 & 12 & 13 \\ 21 & 22 & 23 \\ 31 & 32 & 33 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \boxed{11} & & \\ & \boxed{11} & \\ & & \boxed{11} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 11 & 12 & \\ 21 & \boxed{22/11} & 12 \\ & 21 & 22 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Abbildung 4.4: Verbildlichung des Abziehens der Untercluster um die Gewichte  $W_i$  der Graphen der Länge  $i$  zu erhalten. Dargestellt sind die effektiven Hamiltonians als Matrix mit allgemeinem Matrixelementen. Die daraus erhaltenen Gewichte, welche auch eine Matrix darstellen, werden als allgemeine Elemente in einem farbigen Viereck dargestellt. Welche Matrixelemente voneinander abgezogen werden müssen, ergibt sich aus Abbildung 4.3 und dem Wissen, welches Matrixelement der effektiven Hamiltonians welchen Übergängen entspricht.

Bei der gewählten Reihenfolge der Zustände, die den effektiven Hamiltonian aufspannen, gestaltet sich damit das Berechnen der Gewichte der Graphen, wie in Abbildung 4.4 mithilfe allgemeiner Matrixelemente bildlich dargestellt.

Mit diesem Vorgehen erhält man dann die folgenden Gewichte  $W_i$  der Graphen der Länge  $i$ :

$$\begin{aligned}
 &\begin{array}{c} \blacktriangle \\ \blacktriangle \longrightarrow \blacktriangle \\ \blacktriangle \longrightarrow \blacktriangle \longrightarrow \blacktriangle \\ \blacktriangle \longrightarrow \blacktriangle \longrightarrow \blacktriangle \longrightarrow \blacktriangle \end{array} \\
 W_1 &= (1) \\
 W_2 &= \begin{pmatrix} \frac{5}{2}\lambda^2 & -2\lambda + \frac{3}{2}\lambda^3 \\ -2\lambda + \frac{3}{2}\lambda^3 & \frac{5}{2}\lambda^2 \end{pmatrix} \\
 W_3 &= \begin{pmatrix} O(\lambda^4) & 9\lambda^3 & -2\lambda^2 \\ -\frac{3}{2}\lambda^3 & O(\lambda^4) & -\frac{3}{2}\lambda^3 \\ -2\lambda^2 & 9\lambda^3 & O(\lambda^4) \end{pmatrix} \\
 W_4 &= \begin{pmatrix} O(\lambda^6) & O(\lambda^5) & O(\lambda^4) & -6\lambda^3 \\ O(\lambda^5) & O(\lambda^6) & O(\lambda^5) & O(\lambda^4) \\ O(\lambda^4) & O(\lambda^5) & O(\lambda^6) & O(\lambda^5) \\ -6\lambda^3 & O(\lambda^4) & O(\lambda^5) & O(\lambda^6) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Wie von der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen gewünscht, verschwinden bei einem Gewicht mit  $b$  Verbindungen alle Terme bis zur Ordnung  $\lambda^{b-1}$ , was ebenfalls zur Prüfung der Richtigkeit der Rechnungen genutzt werden kann. Für eine Dispersion welche im thermodynamischen

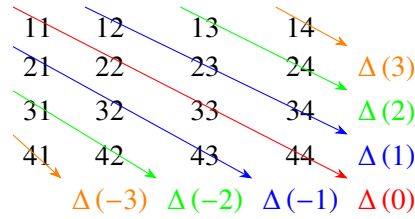


Abbildung 4.5: Veranschaulichung der Addition der Matrixelemente, um die Einträge  $\Delta(r)$  des effektiven Hamiltonians des unendlichen Gitters zu erhalten am Beispiel eines Gewichtes eines Graphen der Länge vier mit allgemeinen Matrixelementen. Die Pfeile markieren die Einträge, welche addiert werden müssen.

Limes korrekt bis zur Ordnung  $b$  ist, muss man somit Graphen mit bis zu  $b$  Verbindungen betrachten, was  $b + 1$  Gitterplätzen entspricht.

Nun sind somit die Gewichte aller Graphen bis zur gewünschten Ordnung von  $\lambda$  bekannt und nach Gelfand [41] ist es nun leicht die Dispersion des Anregungszustandes zu finden. Jedes Matrixelement in den Gewichten der einzelnen Graphen ist mit einem Vektor auf dem unendlichen Gitter verknüpft. Für den effektiven Hamiltonian des unendlichen Gitters müssen somit alle Matrixelemente aufsummiert werden, welche mit dem gleichen Gittervektor assoziiert sind.

Aufgrund der Wahl der Basis der effektiven Hamiltonians der endlichen Graphen und somit auch der Gewichte, muss man bei den einzelnen Gewichten über die einzelnen Diagonalen und Nebendiagonalen summieren, um die Einträge des effektiven Hamiltonians des unendlichen Gitters zu erhalten. Diese seien mit  $\Delta(r)$  bezeichnet und Abbildung 4.5 verdeutlicht das eben Gesagte am Beispiel des Gewichtes des Graphen der Länge vier mit allgemeinen Matrixelementen. Dieses Vorgehen wiederholt man dann für alle Gewichte und addiert die jeweiligen  $\Delta(r)$ .

Die Summe kann alternativ auch als Summe über alle Positionen eines Graphen relativ zu einem fixierten Gitterplatz des unendlichen Gitters verstanden werden [14, 36]. Letztendlich erhält man dann das folgende Ergebnis:

$$\begin{aligned}\Delta(-3) &= -6\lambda^3 \\ \Delta(-2) &= -2\lambda^2 \\ \Delta(-1) &= -2\lambda + 9\lambda^3 \\ \Delta(0) &= 1 + 5\lambda^2 \\ \Delta(1) &= -2\lambda + 9\lambda^3 \\ \Delta(2) &= -2\lambda^2 \\ \Delta(3) &= -6\lambda^3\end{aligned}$$

Mit diesen Einträgen  $\Delta(r)$  des effektiven Hamiltonians des unendlichen Gitters kann man nun auf die Dispersion schließen. So gilt aufgrund der Translationsinvarianz für alle  $r'$  [36] ( $H_{\text{eff}}$  ist der effektive Hamiltonian des unendlichen Gitters):

$$\langle r + r' | H_{\text{eff}} | r' \rangle = \Delta(r)$$

Die Einteilchenanregungszustände sind dann analog zum Bloch-Theorem Eigenzustände des Quasiimpulses  $k$ :

$$|k\rangle \propto \sum_r e^{ikr} |r\rangle$$

Hieraus ergibt sich dann die Dispersion zu

$$\epsilon(k) = \langle k | H_{\text{eff}} | k \rangle = \sum_r e^{ikr} \Delta(r) .$$

Diese Dispersion ist relativ zur Grundzustandsenergie berechnet, da der effektive Hamiltonian des unendlichen Gitters zur Durchführung der Entwicklung nach zusammenhängenden Graphen relativ zur Grundzustandsenergie betrachtet wurde.

Für die Einteilchenanregungsenergie des Mottisolators mit einem Teilchen pro Gitterplatz relativ zur Grundzustandsenergie erhält man somit bis zur dritten Ordnung in  $\lambda = t/U$  die folgende Dispersionsrelation:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{Teilchen}}(k) &= 1 + 5\lambda^2 + \left[ -4\lambda + 18\lambda^3 \right] \cos(k) - 4\lambda^2 \cos(2k) - 12\lambda^3 \cos(3k) \\ &= 1 - 4 \cos(k) \lambda + [5 - 4 \cos(2k)] \lambda^2 + [18 \cos(k) - 12 \cos(3k)] \lambda^3 \end{aligned}$$

All die Ergebnisse dieses Abschnittes stehen im wunderbaren Einklang mit [14]<sup>4</sup>.

Das beschriebene Verfahren kann leicht zur Berechnung der Dispersion der Einlochanregung  $\epsilon_{\text{Loch}}(k)$  genutzt werden, da der wesentliche Unterschied nur bei dem Aufsetzen der Basis vorliegt. Alle sonstigen Ideen kann man analog auf die Einlochanregung übertragen. Bei der Berechnung der Dispersion mithilfe der Werte von  $\Delta(r)$  muss man nur bedenken, dass man nach Gleichung (2.10) die negative Dispersion  $-\epsilon_{\text{Loch}}(k)$  erhält.

#### 4.2.4 Optimierungen des Programmes

Zunächst einmal übertragen sich alle Ideen zur Verbesserung des geschriebenen Programmes bei der Berechnung der Grundzustandsenergie aus Abschnitt 4.1.5 direkt auf diesen Teil. Es lohnt sich also auch hier, sowohl  $\hat{V}$  als auch den effektiven Hamiltonian  $h_{\text{eff}}$  und die Transformationsmatrix  $O$  im CCS-Format zu speichern. Das CCS-Format kann hierbei leicht auf die Speicherung mehrerer Ordnungen verallgemeinert werden, da im Vorhinein bekannt ist, wie viele Spalten diese beiden Matrizen besitzen und man in diesem Speicherformat leicht sagen kann, wo eine neue Ordnung beginnt (für mehr Infos zu diesem Format sei auch hier auf den Anhang C verwiesen).

Weiterhin werden die Binomialkoeffizienten über das Pascalsche Dreieck berechnet und gespeichert und für die rationalen Zahlen wird die *GNU Multiple Precision Arithmetic Library* genutzt.

Außerdem kann man von vornherein die Inversionssymmetrie  $\Delta(r) = \Delta(-r)$  ausnutzen, was zum Beispiel in den in Kapitel 4.5 im Buch [36] gelisteten Gleichungen bereits geschehen ist.

Weiterhin fällt auf, dass in den Gewichten in Gleichung (4.17) die niedrigste Ordnung auf den Ecken der effektiven Hamiltonians vorliegt, was anschaulich bedeutet, dass die Anregung von dem einen Ende des Graphen zum anderen Ende wandert. Alle sonstigen Einträge besitzen eine höhere Ordnung aufgrund der Subtraktion der Untercluster. Daraus folgt, dass wenn man diese Einträge auf den Ecken im Vorhinein wissen würde, man für die Dispersion bis zur  $b$ -ten Ordnung nur die Graphen mit bis zu  $b - 1$  Verbindungen bzw.  $b$  Gitterplätzen betrachten müsste. Für die Anregungen des Mott-Isolators mit einer gleichmäßigen Füllung von  $n = 1$  fiel dies bereits Varma und Monien auf [25], im Laufe dieser Arbeit konnte dies jedoch auf allgemeine Dichten  $n$  des Mott-Isolators verallgemeinert werden. Die erzeugende

<sup>4</sup> Beachte lediglich die unterschiedliche Definition von  $x = -\frac{t}{U}$ , was zu umgedrehten Vorzeichen bei den ungeraden Ordnungen von  $x$  führt.

Funktion der negativen Einträge ist gegeben durch:

$$G(x) = \frac{1 - x - \sqrt{1 - 2(2n + 1)x + x^2}}{2x} \quad (4.18)$$

Entwickelt man diese Funktion um null, so liefert der  $b$ -te Koeffizient den negativen ECKEINTRAG des effektiven Hamiltonians mit  $b + 1$  Verbindungen. Bereits in [25] fiel auf, dass für  $n = 1$  die Funktion (4.18) gerade die Erzeugende der großen Schröder-Zahlen ist [42] und dass diese Gleichung unabhängig von der Art der Anregung ist.

Mithilfe dieser Tatsache kann man sich also die Berechnung des effektiven Hamiltonians der größten Ordnung sparen. Da dieser die größte Dimension des Hilbertraumes besitzt, wird auf diese Weise eine große Menge an Speicherplatz gespart und die Berechnung einer zusätzlichen Ordnung ist möglich.



## Phasendiagramm des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells

Mittels der im Kapitel 4 erläuterten Methoden war es nun zunächst möglich die Grundzustandsenergie des Mott-Isolators im thermodynamischen Limes für verschiedene gleichmäßige Füllungen zu berechnen. Mit den zur Verfügung stehendem Arbeitsspeicher von 32 GB konnte für  $n = 1$  die 24. Ordnung, für  $n = 2$  die 18. Ordnung und für  $n = 3$  die 14. Ordnung erreicht werden. Bei  $n = 1$  hatte der längste betrachtete Graph somit 13 Gitterplätze, bei  $n = 2$  noch 10 Plätze und bei  $n = 3$  schließlich 8 Plätze. Der begrenzende Faktor ist hierbei nicht die Laufzeit des Programmes ( $\approx 10$  Minuten), sondern der Speicherplatz.

Länge des Graphen $L$	Dimension bei $n = 1$
11	352 716
12	1 352 078
13	5 200 300
14	20 058 300

Tabelle 5.1: Mithilfe von Gleichung (4.5) berechnete Dimensionen der Hilberträume von Graphen der Länge  $L$  mit einer gleichmäßigen Füllung von  $n = 1$ .

Die Dimension des Hilbertraumes steigt sehr stark mit zunehmender Länge der endlichen Graphen an, was Tabelle 5.1 verdeutlicht. Dies führt dazu, dass insbesondere die Speicherung der Matrixdarstellung von  $\hat{V}$  viel Speicherplatz braucht. Betrachtet man die Größe der Dimensionen, bis zu welchen es noch möglich war, die Grundzustandsenergie zu berechnen, so scheint die grobe Grenze, ab welcher der Speicher nicht mehr genügt, bei einer Dimension von ca. 20 000 000 zu liegen.

Erfreulicherweise stimmen die erhaltenen Ergebnisse für  $n = 1$  mit dem Ergebnis von Elstner und Monien aus dem Jahre 1999 bis zur privat übermittelten 12. Ordnung überein [14] und auch Ergebnisse von Damski und Zakrzewski aus dem Jahre 2015 konnten für  $n = 1$  bis zur

veröffentlichten 16. Ordnung und für  $n = 2$  und  $n = 3$  bis zur 12. Ordnung bestätigt werden [43]. Die erhaltenen Reihen dieser Arbeit finden sich im Anhang E.

Mithilfe der Grundzustandsenergien ist es nun möglich die Einteilchen- bzw. Einlochanregungsenergien zu berechnen. Für die Einteilchenanregung nimmt die Dimension des Hilbertraumes zwar zu, jedoch nicht in dem Maße wie es bei einer Vergrößerung der Graphen der Fall ist. Als Faustregel hat sich somit herausgestellt, dass die Länge des Graphen, welche bei der Grundzustandsenergie berücksichtigt werden konnte, auch bei der Einteilchenanregung berücksichtigt werden kann. Für die Einlochanregung gilt dies offensichtlich, da hier die Dimension des Hilbertraumes im Vergleich zum Mott-Isolator kleiner wird.

Somit können beispielsweise für die Dichte  $n = 1$  Graphen bis zur Länge 13 berücksichtigt werden, was die Anregungsenergien bis zur 12. Ordnung liefern würde, jedoch liefert Gleichung (4.18) eine Ordnung geschenkt, das heißt es wird sogar eine Berechnung bis zur 13. Ordnung möglich. Für  $n = 2$  ist somit

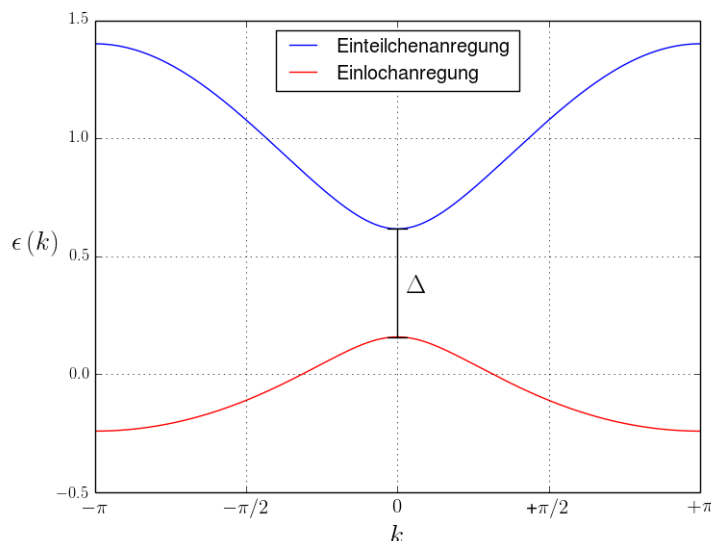


Abbildung 5.1: Dispersion der Einteilchenanregung  $\epsilon_{\text{Teilchen}}(k)$  (blau) und der Einlochanregung  $\epsilon_{\text{Loch}}(k)$  (rot) für  $\lambda = t/U = 0,1$  und  $n = 1$ . Weiterhin ist schematisch die Anregungslücke  $\Delta$  eingezeichnet, welche für den Mott-Isolator größer null ist und in der suprafluiden Phase verschwindet.

eine Berechnung bis zur 10. Ordnung und für  $n = 3$  bis zur 8. Ordnung im Rahmen. Die erhaltenen Dispersionsrelationen finden sich auch hier im Anhang E.

Für  $n = 1$  kann man die erhaltenen Ergebnisse mit den privat übermittelten Ergebnissen von Elstner und Monien [14] bis zur 12. Ordnung vergleichen, was keine Abweichung liefert. Bis zur 6. Ordnung liefert auch eine Arbeit von Ejima et. al einen Vergleich [44], jedoch kommt es hier bei beiden Dispersionsrelationen in der sechsten Ordnung zu einer kleinen Abweichung. Diese kann ohne deren Programm nicht nachvollzogen werden und da die Abweichung einen der Werte betrifft, welcher mit der Erzeugenden aus Gleichung (4.18) berechnet werden kann, welche für  $n = 1$  schon von [25] bestätigt wurde, wird im Folgenden angenommen, dass die in dieser Arbeit erhaltene Reihe die richtige ist.

Die erhaltenen Ergebnisse für die Dispersionsrelationen  $\epsilon_{\text{Teilchen}}(k)$  und  $\epsilon_{\text{Loch}}(k)$  sind für den exemplarischen Wert von  $\lambda = t/U = 0,1$  bei der Dichte  $n = 1$  in Abbildung 5.1 dargestellt. Man erkennt, dass der kleinste (größte) Eigenwert der Einteilchen- (Einloch-) Anregung jeweils beim Quasiimpuls  $k = 0$  gegeben ist. Nach [14] gilt dies immer für Werte von  $t > 0$ . Damit ist klar, dass die Phasengrenzen mithilfe von Gleichung (2.11) bei diesem Wert  $k = 0$  berechnet werden müssen.

Weiterhin fällt auf, dass die Kurven der Einteilchen- und Einlochanregung nicht exakt die gleiche Form besitzen, was die Teilchen-Loch Asymmetrie des grundlegenden Bose-Hubbard-Hamiltonians unterstreicht [14].

Bevor man nun versucht, das Phasendiagramm darzustellen, sollte man bedenken, dass es an der Spitze der Mott-Phase aufgrund der konstanten Dichte zu einer Teilchen-Loch-Anregung kommt und dass der Phasenübergang dem Verhalten des XY Modells in 2 Dimension entspricht (siehe 2.4.4). Nach [3, 14] führt dies dazu, dass sich die Anregungslücke  $\Delta(\lambda) = \epsilon_{\text{Teilchen}}(k = 0, \lambda) - \epsilon_{\text{Loch}}(k = 0, \lambda)$  gemäß eines Kosterlitz-Thouless-Überganges schließt:

$$\Delta(\lambda) \propto A \exp\left(-\frac{W}{\sqrt{\lambda_{\text{krit}} - \lambda}}\right) \quad (5.1)$$

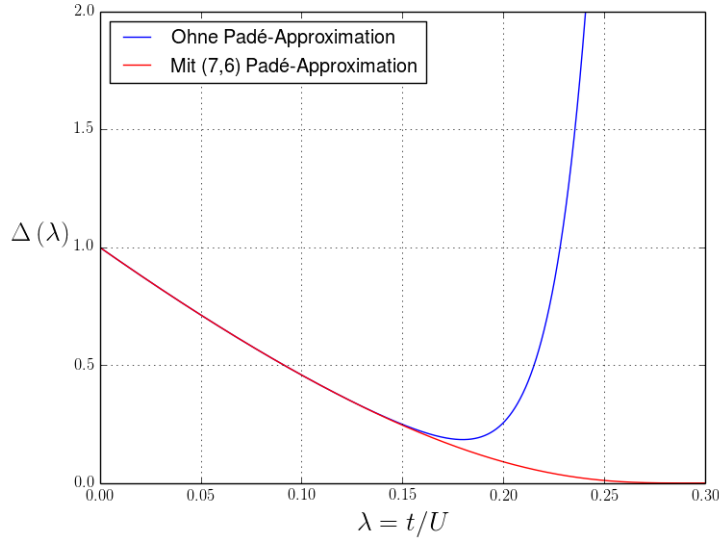


Abbildung 5.2: In blau ist das aus den berechneten Reihen erwartete Schließen der Anregungslücke  $\Delta$  zu sehen, während in rot die gleiche Größe nach einer (7,6) Padé-Approximation der Reihe aufgetragen ist. Nur die rationale Funktion nach der Padé-Approximation vermag das exponentielle Schließen der Anregungslücke gemäß eines Kosterlitz-Thouless-Überganges in Gleichung (5.1) zu beschreiben.

Diese Anregungslücke ist in Abbildung 5.1 bereits eingezeichnet. Sobald sich die Lücke geschlossen hat, ist die Energie, um ein Teilchen aus dem System zu entfernen oder ein Teilchen dem System hinzuzuführen entartet und der Mott-Isolator verschwindet ab diesem Wert von  $\lambda$  komplett.

Gleichung (5.1) liefert ein höchst nichtanalytisches Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes, welches nicht gut von einer Reihe beschrieben werden kann. Inspiriert von [14] ist es nur logisch, statt  $\Delta(\lambda)$  die Größe  $\ln^2[\Delta(\lambda)] \propto 1/(\lambda_{\text{krit}} - \lambda)$  zu betrachten, welche einen einfachen Pol beim kritischen Punkt hat und somit leicht durch eine rationale Funktion beschrieben werden kann. Eine Padé-Approximation von  $\ln^2[\Delta(\lambda)]$  und darauffolgende Rücktransformation auf  $\Delta(\lambda)$  sollte das Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes also deutlich besser beschreiben als die ursprünglich erhaltene Reihe<sup>1</sup>. Weiterhin kann man leicht aus  $\ln^2[\Delta(\lambda)]$  auf den kritischen Wert  $\lambda_{\text{krit}}$  schließen, da dieser einen Pol der Funktion und somit eine Nullstelle des Nenners darstellt.

Abbildung 5.2 zeigt das Schließen der Anregungslücke  $\Delta(\lambda)$  für  $n = 1$  vor einer Padé-Approximation und danach, wobei das Polynom im Zähler des Grades  $Z = 7$  gewählt wurde und im Nenner der Ordnung  $M = 6$ . Abgekürzt sei ab nun der allgemeine Fall als eine  $(Z, M)$  Padé-Approximation bezeichnet.

Man erkennt deutlich, dass die ursprüngliche Reihe in der Nähe des kritischen Punktes zu divergieren scheint, während nach einer Padé-Approximation der exponentielle Abfall gut beschrieben wird. Ist man weit genug entfernt vom kritischen Punkt, so liefert auch die Reihe das richtige Ergebnis, weswegen bei der Darstellung der Dispersion in Abbildung 5.1 für  $\lambda = 0,1$  noch auf eine Padé-Approximation verzichtet werden konnte.

Für das Phasendiagramm führt man weiterhin eine Padé-Approximation für die unterer Grenze  $(\mu/U)_- = \epsilon_{\text{Loch}}(k = 0; \lambda)$  durch, da diese durchaus schneller zu konvergieren vermag [45]. Die obere Grenze  $(\mu/U)_+$  erhält man dann durch Addition der aus der Padé-Approximation erhaltenen Anregungslücke  $\Delta(\lambda)$  auf diese untere Grenze im Phasendiagramm.

<sup>1</sup> Zur Durchführung dieser Berechnungen wurde Mathematica genutzt.

Grad $M$ des Nenners	Grad $Z$ des Zählers		
	5	6	7
5	$\lambda_{\text{krit}} = 0,295$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,296$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,302$
6	$\lambda_{\text{krit}} = 0,296$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,291$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,301$
7	$\lambda_{\text{krit}} = 0,299$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,300$	/

Tabelle 5.2: Aus der Padé-Approximation von  $\ln^2 [\Delta(\lambda)] \propto 1/(\lambda_{\text{krit}} - \lambda)$  für  $n = 1$  erhaltene kritische Werte von  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$  für verschiedene Grade  $Z$  des Zählers und  $M$  des Nenners des genäherten Bruches aus zwei Polynomen. Ein / markiert das Fehlen eines Poles in der gewünschten Größenordnung.

Grad $M$ des Nenners	Grad $Z$ des Zählers		
	4	5	6
4	$\lambda_{\text{krit}} = 0,173$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,173$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,168$
5	$\lambda_{\text{krit}} = 0,173$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,173$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,176$
6	$\lambda_{\text{krit}} = 0,172$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,175$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,173$

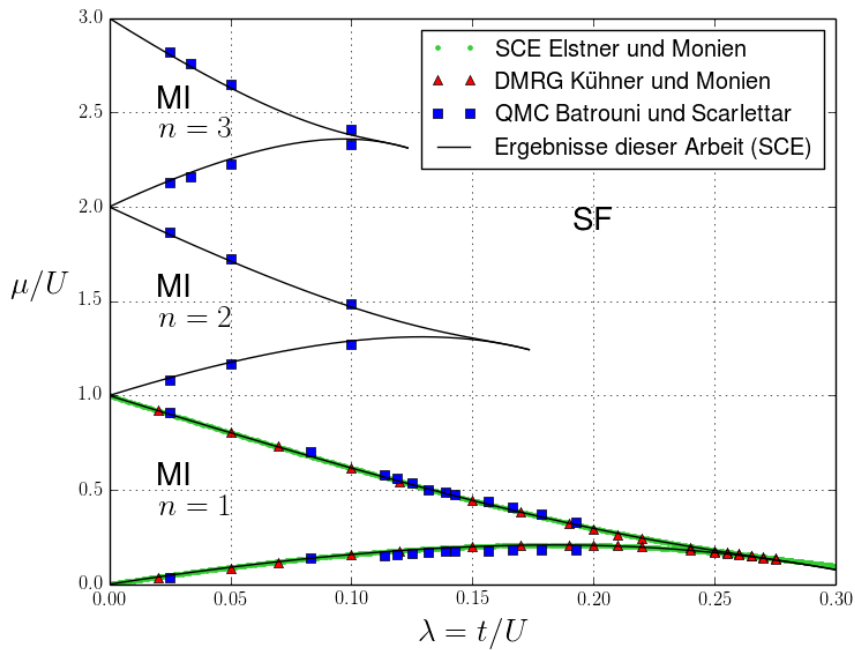
Tabelle 5.3: Aus der Padé-Approximation von  $\ln^2 [\Delta(\lambda)] \propto 1/(\lambda_{\text{krit}} - \lambda)$  für  $n = 2$  erhaltene kritische Werte von  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$  für verschiedene Grade  $Z$  des Zählers und  $M$  des Nenners des genäherten Bruches aus zwei Polynomen.

Grad $M$ des Nenners	Grad $Z$ des Zählers		
	3	4	5
3	/	$\lambda_{\text{krit}} = 0,140$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,123$
4	$\lambda_{\text{krit}} = 0,124$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,123$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,124$
5	$\lambda_{\text{krit}} = 0,123$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,124$	$\lambda_{\text{krit}} = 0,123$

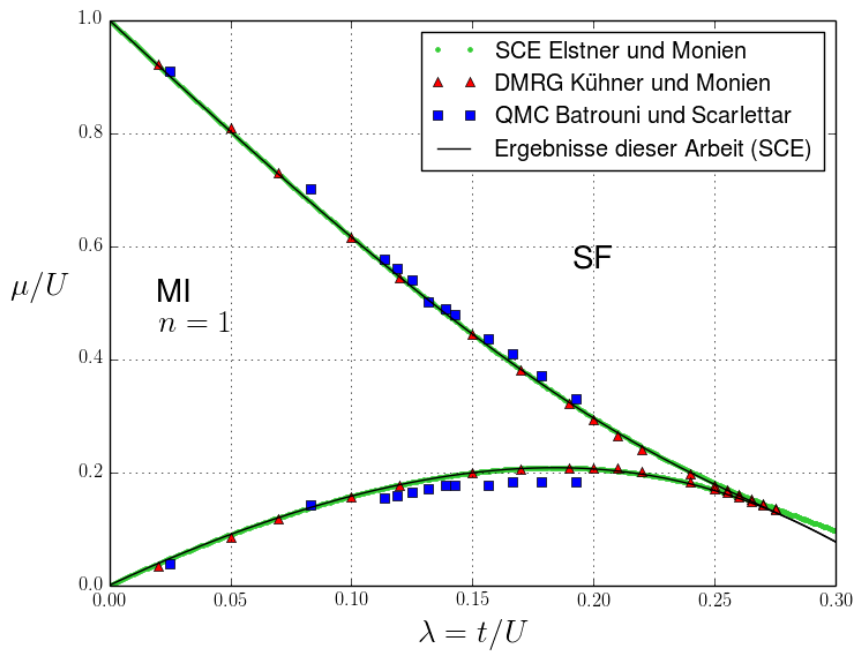
Tabelle 5.4: Aus der Padé-Approximation von  $\ln^2 [\Delta(\lambda)] \propto 1/(\lambda_{\text{krit}} - \lambda)$  für  $n = 3$  erhaltene kritische Werte von  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$  für verschiedene Grade  $Z$  des Zählers und  $M$  des Nenners des genäherten Bruches aus zwei Polynomen. Ein / markiert das Fehlen eines Poles in der gewünschten Größenordnung.

Das Ergebnis dieses Vorgehens kann durchaus von der Wahl des Grades  $Z$  des Polynoms im Zähler und des Grades  $M$  des Polynoms im Nenner bei der Padé-Approximation abhängen. Glücklicherweise gestaltete sich sowohl das Ergebnis des kritischen Wertes von  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$  als auch das letztendliche Phasendiagramm als relativ stabil und es kam nur zu minimalen Änderungen. Dies zeigen auch die Tabellen 5.2 bis 5.4 für die kritischen Werte, welche größtenteils in der gleichen Größenordnung liegen. Für das Phasendiagramm wurden nun jeweils die größtmöglichen Ordnungen gewählt, welche keine unerwünschten Pole im relevanten Bereich haben, also für  $n = 1$  eine (7,6) Approximation, für  $n = 2$  eine (6,6) und für  $n = 3$  eine (5,5) Approximation.

In Abbildung 5.3 finden sich die so erhaltenen Phasendiagramme im Vergleich zu den Ergebnissen von Elstner und Monien [14], welche auf die gleiche Weise wie in dieser Arbeit durch eine Starkkopplungs-entwicklung (SCE) gewonnen wurden. Weiterhin finden sich zum Vergleich Ergebnisse von Kühner und Monien [11], die über die Nutzung der Dichte-Matrix Renormierungsgruppe (DMRG) gewonnen wurden und außerdem Ergebnisse von Batrouni und Scarlett [9], welche durch Nutzung eines Quanten-Monte-Carlo Algorithmus (QMC) erhalten wurden.



(a) Darstellung der MI-Phasen mit  $n = 1, 2$  und  $3$ .



(b) Vergrößerte Darstellung der MI-Phase mit  $n = 1$ .

Abbildung 5.3: In schwarz sind die in dieser Arbeit aus einer Padé-Approximation entstandenen Phasengrenzen des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells zwischen den Mott-Isolatoren (MI) mit den Dichten  $n = 1, 2$  und  $3$  und der suprafluiden Phase (SF) zu erkennen. Als Vergleich dienen Daten aus einer Arbeit von Elstner und Monien [14], welche analog zu dieser Arbeit über eine Starkkopplungsentwicklung (SCE) erhalten wurden. Weiterhin liegen Ergebnisse aus einer Arbeit von Kühner und Monien [11] vor, welche die Dichte-Matrix Renormierungsgruppe (DMRG) genutzt haben und Daten von Batrouni und Scarlett [9], welche einen Quanten-Monte-Carlo Algorithmus (QMC) nutzten.

Dichte $n$	untere Grenze für $\lambda_{\text{krit}}$	obere Grenze für $\lambda_{\text{krit}}$
1	0,291	0,302
2	0,168	0,176
3	0,123	0,140

Tabelle 5.5: Aus den Tabellen 5.2 bis 5.4 erhaltene untere und obere Grenzen für den kritischen Wert  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$  in Abhängigkeit von der Dichte  $n$  des Mott-Isolators.

Die verschiedenen Ergebnisse passen hervorragend zueinander und bestätigen auch die Erwartungen an das Phasendiagramm aus Abschnitt 2.4.4.

Besonders erwähnt sei hier der Vergleich bei einer Dichte von  $n = 1$  mit den Ergebnissen von Elstner und Monien [14], welche auf exakt die gleiche Weise gewonnen wurden, wie in dieser Arbeit erläutert. Hierzu sei gesagt, dass die erhaltenen Reihen von Elstner und Monien, wie bereits erwähnt, bis zur 12. Ordnung mit dem Ergebnis dieser Arbeit übereinstimmen. Das Ergebnis von Elstner und Monien konnte somit unter Berücksichtigung der ersten zwölf Ordnungen des Ergebnisses dieser Arbeit mithilfe einer (7,6) Padé Approximation exakt reproduziert werden, was glücklicherweise bedeutet, dass das im Laufe dieser Arbeit geschriebene Programm funktioniert. Beim direkten Vergleich fällt auf, dass nahe des kritischen Punktes durch die zusätzliche Ordnung ein sehr leichter Versatz nach unten vorhanden ist. Die Abweichung erscheint aber insgesamt gesehen eher vernachlässigbar.

Aus den Tabellen 5.2 bis 5.4 kann man nun den kritischen Wert  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$  erhalten. Es wurden jeweils nur Grade der Polynome zugelassen, welche zusammen in der Größenordnung der Ordnung der ursprünglichen Reihe liegen. Betrachtet man die erhaltenen Werte für  $\lambda_{\text{krit}}$ , so erhält man die in Tabelle 5.5 gelisteten Bereiche, in welchen der wahre Wert für  $\lambda_{\text{krit}}$  für die verschiedenen Dichten  $n$  zu liegen scheint.

Hieraus ergeben sich dann die in dieser Arbeit berechneten kritischen Werte zu:

$$\begin{aligned} n = 1 : & \quad \lambda_{\text{krit}} = 0,296 \pm 0,005 \\ n = 2 : & \quad \lambda_{\text{krit}} = 0,172 \pm 0,004 \\ n = 3 : & \quad \lambda_{\text{krit}} = 0,126 \pm 0,004 \end{aligned}$$

Es sei ausdrücklich erwähnt, dass der Fehler nur auf der Betrachtung der verschiedenen Ergebnisse der betrachteten Padé-Approximationen beruht. Dass die Reihen nur bis zu einer bestimmten endlichen Ordnung berechnet wurden, kann auch für eine Verfälschung der erhaltenen kritischen Werte sorgen, obwohl die Ergebnisse relativ stabil zu sein scheinen. Nichtsdestotrotz scheint ein Fehler von  $\pm 0,01$  wohl realistischer.

Die erhaltenen Werte für  $n = 1$  liegen im Bereich der bisherigen Studien dieses Modells. Die DMRG von Kühner und Monien [11] lieferte einen kritischen Wert  $\lambda_{\text{krit}} = 0,297 \pm 0,01$ , während die SCE von Elstner und Monien [14] zu  $\lambda_{\text{krit}} = 0,26 \pm 0,01$  führte. Eine aktuellere Arbeit aus dem Jahre 2015 [46] nutzte die Methode der exakten Diagonalisierung und landete bei einem Wert von  $\lambda_{\text{krit}} = 0,286 \pm 0,005$  und eine Arbeit aus dem Jahre 2014 [47] endet mithilfe eines TEBD-Algorithmus (*Time-Evolving Block Decimation*) bei einem Wert von  $\lambda_{\text{krit}} = 0,289 \pm 0,008$ . Eine ausführliche Darstellung von bisherigen Ergebnissen bezüglich des Wertes von  $\lambda_{\text{krit}}$  bei  $n = 1$  findet sich in Kapitel 8.1 in [15], welche darin endet, dass im thermodynamischen Limes  $\lambda_{\text{krit}} \approx 0,3$  sehr wahrscheinlich zu sein scheint. Dieser Wert konnte somit im Laufe dieser Arbeit bestätigt werden.

Für  $n = 2$  und  $n = 3$  sind nicht eine solche Menge an Ergebnissen öffentlich zugänglich. Eine DMRG-Studie von Ejima et al. [48] liefert für  $n = 2$  ein Ergebnis von  $\lambda_{\text{krit}} = 0,180 \pm 0,001$  und in [49] ergibt

sich auf die gleiche Weise für  $n = 3$   $\lambda_{\text{krit}} = 0,127 \pm 0,01$  als kritischer Wert<sup>2</sup>. Freericks und Monien [12] kamen über eine SCE zu einem Ergebnis von  $\lambda_{\text{krit}} = 0,145 \pm 0,009$  für  $n = 2$  bzw.  $\lambda_{\text{krit}} = 0,103 \pm 0,006$  für  $n = 3$ . Diese Ergebnisse liegen also unterhalb des Ergebnisses dieser Arbeit, während die Ergebnisse der DMRG jeweils nahezu den gleichen Wert liefern. Klar ist, dass unterschiedliche Methoden letztendlich zu minimal anderen Ergebnissen führen, die im Großen und Ganzen jedoch alle in der gleichen Größenordnung liegen.

Dass die kritischen Werte  $\lambda_{\text{krit}}$  mit zunehmender Dichte  $n$  des Mott-Isolators abnehmen, oder dass anders ausgedrückt die Größe der Mott-Phase kleiner wird, ist leicht im Limes  $n \rightarrow \infty$  nachzuvollziehen. Hier muss die Mott-Phase infinitesimal klein sein, da aufgrund der hohen Dichte die Addition oder Subtraktion eines Teilchens keinen Einfluss mehr auf die Größe der Wechselwirkung der Teilchen untereinander hat. Das System gewinnt nun Energie, indem es ein Springen von Teilchen zulässt und bildet bereits für infinitesimale kleine  $t$  eine Supraflüssigkeit. Hieraus folgt direkt, dass der kritische Wert  $\lambda_{\text{krit}}$  für größer werdende Dichten  $n$  der zugehörigen Mott-Phasen abnehmen muss.

Weiterhin zeigen die so erhaltenen Phasendiagramme allesamt ein sehr interessantes Phänomen. Als Beispiel sei wie in [26] das Verhalten bei einem konstanten chemischen Potential  $\mu/U = 0,15$  herangezogen. Bei  $t/U = 0$  startet man in der Mott-Phase mit einer Dichte von  $n = 1$ . Bei  $t/U \approx 0,1$  findet ein von Dichtefluktuationen getriebener Phasenübergang in die suprafluide Phase statt. Mit den Erklärungen aus 2.4.4 folgt, dass hier Teilchen aus dem System entfernt werden und sich die Löcher durch das System bewegen<sup>3</sup>, was bedeutet, dass dann die Dichte  $n$  kleiner als eins ist. Bei  $t/U \approx 0,26$  kommt es nun aber zu einem Wiedereintritt in die Phase des Mott-Isolators mit einer Dichte von  $n = 1$ , das heißt die Dichte stieg mit steigendem  $t$  wieder an. Hierauf folgend kommt es dann erneut zu einem Phasenübergang in die suprafluide Phase, diesmal jedoch mit einer Dichte von  $n > 1$ .

Das Wiederansteigen der Dichte wurde auch in [26] erklärt. Hierfür betrachtet man den Fall  $t \rightarrow \infty$ , was äquivalent zur Vernachlässigung aller Wechselwirkungen ist. Tut man dies, geht das System von einer Supraflüssigkeit in ein Bose-Einstein-Kondensat über<sup>4</sup>. In diesem hat jedes Teilchen die Energie  $-2t$ . Ist das chemische Potential nun kleiner als dieser Wert, ist das System leer, da es Energie kostet, Teilchen dem System hinzuzuführen. Ist das chemische Potential hingegen größer, geht die Anzahl der Teilchen im System gegen unendlich, da es Energie bringt, mehr Teilchen im System zu haben. Lässt man nun das chemische Potential  $\mu$  und die Wechselwirkung  $U$  konstant und vergrößert hingegen  $t$ , muss die Dichte des Systems immer gegen unendlich gehen, wenn  $t$  genügend vergrößert wird. Das höchst interessante Wiedereintrittsverhalten ist somit das Resultat eben dieses Grenzfalles.

<sup>2</sup> Der Fehler ist so groß, da dieses Ergebnis nur aus einem Phasendiagramm abgelesen werden konnte.

<sup>3</sup> Genau das passierte an der unteren Grenze der Mott-Phase, wenn man von einem Punkt innerhalb der Mott-Phase das chemische Potential verkleinerte.

<sup>4</sup> Nur das angenommene Kontaktpotential führte zu einer Dispersion  $\epsilon(p)$  mit einer kritischen Geschwindigkeit größer null.





## Ergebnisdiskussion und Ausblick

In dieser Arbeit wurde erfolgreich mittels einer Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen und einer darauf folgenden Padé-Analyse zunächst das Phasendiagramm des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit bloßer Wechselwirkung auf den jeweiligen Gitterplätzen und einer Tunnelmöglichkeit nur auf benachbarte Gitterplätze berechnet. Dies wurde für die Mott-Isolatoren bis zu einer Dichte von  $n = 3$  durchgeführt und jeweils war die Übereinstimmung mit bisherigen Daten bemerkenswert. Die dabei auftretenden Reihen wurden bis zu Ordnungen berechnet, die bisher noch nicht erreicht wurden. Im Laufe dessen konnte außerdem das bereits beobachtete Wiedereintrittsverhalten im Phasendiagramm für alle Dichten bestätigt werden.

Weiterhin konnten die kritischen Werte  $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$ , ab welcher die Phase des Mott-Isolators vollständig verschwindet, zu den folgenden Werten bestimmt werden:

$$\begin{aligned} n = 1 : & \quad \lambda_{\text{krit}} = 0,296 \pm 0,005 \\ n = 2 : & \quad \lambda_{\text{krit}} = 0,172 \pm 0,004 \\ n = 3 : & \quad \lambda_{\text{krit}} = 0,126 \pm 0,004 \end{aligned}$$

Der Fehler beruht hierbei nur auf den Vergleichen der Ergebnisse verschiedener Padé-Approximationen. Berücksichtigt man die Tatsache, dass alle Reihen nur bis zu einer endlichen Ordnung berechnet wurden konnten, scheint ein Fehler von  $\pm 0,01$  realistisch. Die erhaltenen Werte können die Größenordnungen von Ergebnissen anderer Studien mit anderen Methoden bestätigen.

Im Zuge der Arbeit konnte außerdem die Erzeugende  $G(x)$ , welche für den eindimensionalen Graphen mit  $b$  Verbindungen den negativen Faktor liefert, welcher die Anregung von dem einen Ende zum anderen Ende transportiert und somit der Ordnung  $\lambda^b$  ist, auf allgemeine Dichten  $n$  verallgemeinert werden:

$$G(x) = \frac{1 - x - \sqrt{1 - 2(2n + 1)x + x^2}}{2x}$$

Für  $n = 1$  stimmt diese natürlich mit der bisher bekannten Gleichung überein. Eine anschauliche Erklärung, warum die Faktoren beispielsweise bei  $n = 1$  durch die negativen großen Schröder-Zahlen gegeben sind, fehlt nach wie vor.

Für noch vertrauenswürdiger Ergebnisse der kritischen Werte und des Phasendiagramms bräuchte es mehr Terme der erhaltenen Reihen der Grundzustandsenergien und der Anregungsenergien, wofür es letztendlich die Berücksichtigung größerer Graphen bräuchte. Um dies zu erreichen, würde sich zunächst einmal die Nutzung des Programmes auf einem Rechner mit mehr Arbeitsspeicher anbieten, was jedoch aufgrund des starken Anstiegs der zu betrachtenden Dimensionen nur begrenzt helfen würde.

Ein anderer Ansatz wäre, anstatt die auftretenden Matrizen zu speichern, die nötigen Einträge soweit es möglich ist<sup>1</sup>, immer wieder zu berechnen, wenn diese benötigt werden. Zwar würde dies auf Kosten der Laufzeit gehen, jedoch könnte dieser Ansatz, je schneller die Rechner werden, umso lohnenswerter sein<sup>2</sup>. In Zukunft könnte das in dieser Arbeit entwickelte Programm auf mehr Dimensionen verallgemeinert werden, was im Grunde lediglich die Findung der relevanten Graphen und derer Gitterkonstanten komplexer macht. Auch eine Anwendung der erläuterten Methoden auf Weiterentwicklungen des Bose-Hubbard-Modells wären denkbar, indem man zum Beispiel Wechselwirkungen zwischen mehreren Teilchen auf einem Gitterplatz zulässt oder auch die Wechselwirkung zwischen Bosonen auf benachbarten Gitterplätzen berücksichtigt.

Insgesamt gesehen ist zumindest dem Autor (und hoffentlich auch dem Leser) die Eleganz insbesondere der Entwicklung nach zusammenhängenden topologischen Graphen verdeutlicht worden, welche auf relativ einfache Weise die im thermodynamischen Limes exakte Reihe bis zu einer gewünschten Ordnung liefert und auch ein erster Einblick in die Welt der Quantenphasenübergänge konnte gelingen.

---

<sup>1</sup> Für  $\hat{V}$  wäre dies möglich.

<sup>2</sup> Übrigens nutzten Elstner und Monien [14] eben jenen Ansatz.

# Literatur

---

- [1] H. A. Gersch und G. C. Knollman, *Quantum Cell Model for Bosons*, Physical Review **129** (1963), 959 (siehe S. 1).
- [2] I. Bloch, J. Dalibard und W. Zwerger, *Many-body physics with ultracold gases*, Reviews of Modern Physics **80** (2008), 885 (siehe S. 1, 2, 5, 6).
- [3] M. P. A. Fisher et al., *Boson localization and the superfluid-insulator transition*, Physical Review B **40.1** (1989), 546 (siehe S. 1, 7, 10–12, 36).
- [4] D. Jaksch et al., *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*, Physical Review Letters **81** (1998), 3108 (siehe S. 1).
- [5] M. Greiner et al., *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415** (2002), 39 (siehe S. 1).
- [6] T. Stöferle et al., *Transition from a Strongly Interacting 1D Superfluid to a Mott Insulator*, Physical Review Letters **92** (2004), 130403 (siehe S. 1).
- [7] I. B. Spielman, W. D. Phillips und J. V. Porto, *Mott-Insulator Transition in a Two-Dimensional Atomic Bose Gas*, Physical Review Letters **98** (2007), 080404 (siehe S. 1).
- [8] W. Krauth, *Bethe ansatz for the one-dimensional boson Hubbard model*, Physical Review B **44** (1991), 9772 (siehe S. 1).
- [9] G. G. Batrouni und R. T. Scalettar, *World-line quantum Monte Carlo algorithm for a one-dimensional Bose model*, Physical Review B **46** (1992), 9051 (siehe S. 1, 38, 39).
- [10] V. Elesin, V. A. Kashurnikov und L. A. Openov, *Mott-insulator-superfluid-liquid transition in a 1D boson Hubbard model*, JETP Letters **60** (1994), 177 (siehe S. 1).
- [11] T. D. Kühner und H. Monien, *Phases of the one-dimensional Bose-Hubbard model*, Physical Review B **58** (1998), R14741 (siehe S. 1, 38–40).
- [12] J. K. Freericks und H. Monien, *Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model*, Physical Review B **53** (1996), 2691 (siehe S. 1, 41).
- [13] J. K. Freericks und H. Monien, *Phase diagram of the Bose-Hubbard Model*, Europhysics Letters **26** (1994), 545 (siehe S. 1).
- [14] N. Elstner und H. Monien, *A numerical exact solution of the Bose-Hubbard model*, arXiv:cond-mat/9905367v1 (1999) (siehe S. 1, 7, 9, 18, 19, 25, 30, 32, 33, 35–40, 44).
- [15] K. V. Krutitsky, *Ultracold bosons with short-range interaction in regular optical lattices*, Physics Reports **607** (2016), 1-101 (siehe S. 3, 40).

- [16] P. Kapitza, *Viscosity of Liquid Helium below the  $\lambda$ -Point*, Nature **141** (1938), 74 (siehe S. 4).
- [17] J. Allen und A. D. Misener, *Flow of Liquid Helium II*, Nature **141** (1938), 75 (siehe S. 4).
- [18] L. Landau, *Theory of the Superfluidity of Helium II*, Journal of Physics USSR **5** (1941), 71 (siehe S. 4).
- [19] L. P. Pitaevskii, *50 Years of Landau's Theory on Superfluidity*, Journal of Low Temperature Physics **87** (1992), 127 (siehe S. 4).
- [20] A. Schmitt, *Introduction to superfluidity, Field-theoretical Approach and Applications*, Bd. 888, Lecture Notes in Physics, Springer International Publishing, 2015, ISBN: 978-3-319-07946-2 (siehe S. 4).
- [21] A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, location: Dover Publications Inc., 2003, Kap. 1, ISBN: 0-486-42827-3 (siehe S. 6).
- [22] O. Dutta et al., *Non-standard Hubbard models in optical lattices*, Rep. Prog. Phys. **78** (2015), 066001 (siehe S. 6, 7).
- [23] C. Weißmantel und C. Hamann, *Grundlagen der Festkörperphysik*, Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1989, ISBN: 3-326-00381-1 (siehe S. 6).
- [24] A. Klümper, *Festkörpertheorie*, Bergische Universität Wuppertal, 2012, URL: [wpt126.physik.uni-wuppertal.de/~kluemper/TSSP/TF\\_I.pdf](http://wpt126.physik.uni-wuppertal.de/~kluemper/TSSP/TF_I.pdf), Aufgerufen am 25.08.2016 (siehe S. 6).
- [25] V. K. Varma und H. Monien, *Renormalization of two-body interactions due to higher-body interactions of lattice bosons*, Physical Review B **90** (2014), 085138 (siehe S. 7, 33, 34, 36).
- [26] T. D. Kühner, S. R. White und H. Monien, *One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbour interaction*, Physical Review B **61** (2000), 12474 (siehe S. 7, 41).
- [27] M. Greiner, *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials*, Dissertation: Ludwig-Maximilians-Universität München, 2003 (siehe S. 7).
- [28] J.-L. Basdevant und J. Dalibard, *Quantum Mechanics*, Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 2002, ISBN: 3-540-42739-2 (siehe S. 8).
- [29] N. N. Bogoliubov, *On the theory of superfluidity*, Journal of Physics USSR **11** (1947), 23 (siehe S. 8).
- [30] L. Pitaevskii und S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, New York: Oxford University Press, 2003, Kap. 4, ISBN: 0-19-850719-4 (siehe S. 9).
- [31] H. Monien, M. Linn und N. Elstner, *Trapped one-dimensional Bose gas as a Luttinger liquid*, Physical Review A **58** (1998), R3359 (siehe S. 9).
- [32] F. D. M. Haldane, *Effective Harmonic-Fluid Approach to Low-Energy Properties of One-Dimensional Quantum Fluids*, Physical Review Letters **47** (1982), 1840 (siehe S. 9).
- [33] T. Giamarchi, „International Series of Monographs on Physics“, *Quantum Physics in One Dimension*, Bd. 121, New York: Oxford University Press, 2004, ISBN: 0-19-852500-1 (siehe S. 9).
- [34] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh und D. A. Huse, *Perturbation Expansions for Quantum Many-Body Systems*, Journal of Statistical Physics **59** (1990), 1093 (siehe S. 13).

- 
- [35] M. P. Gelfand und R. R. P. Singh, *High-order convergent expansions for quantum many particle systems*, *Advances in Physics* **49.1** (2000), 93-140 (siehe S. 13, 25, 27).
- [36] J. Oitmaa, C. Hamer und W. Zheng, *Series Expansion Methods for Strongly Interacting Lattice Models*, Cambridge: Cambridge University Press, 2006, Kap. 4, ISBN: 978-0-521-84242-6 (siehe S. 13, 18, 23, 27, 28, 32, 33, 51, 55).
- [37] J. M. Zhang und R. X. Dong, *Exact diagonalization: the Bose-Hubbard model as an example*, *European Journal of Physics* **31** (2010), 591 (siehe S. 18).
- [38] Á. Szabados, P. Jeszenszki und P. R. Surján, *Efficient iterative diagonalization of the Bose-Hubbard model for ultracold bosons in a periodic optical trap*, *Chemical Physics* **401** (2012), 208-216 (siehe S. 18).
- [39] R. J. Gonsalves, *Computational Physics, Matrix Eigenvalue Problems in Quantum Mechanics*, University at Buffalo, 2011, URL: <http://www.physics.buffalo.edu/phy410-505/2011/topic4/app2/index.html>, Aufgerufen am 11.08.2016 (siehe S. 20).
- [40] F. G. Gustavson, *Two Fast Algorithms for Sparse Matrices: Multiplication and Permuted Transposition*, *ACM Transactions on Mathematical Software* **4** (1978), 250-269 (siehe S. 26, 54).
- [41] M. P. Gelfand, *Series expansions for excited states of quantum lattice models*, *Solid State Communications* **98** (1996), 11-14 (siehe S. 27-29, 32, 56).
- [42] N. J. A. Sloane, *The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences, Large Schröder numbers*, 2016, URL: <https://oeis.org/A006318>, Aufgerufen am 15.08.2016 (siehe S. 34).
- [43] B. Damski und J. Zakrzewski, *Properties of the one-dimensional Bose-Hubbard model from a high-order perturbative expansion*, *New Journal of Physics* **17** (2015), 125010 (siehe S. 35).
- [44] S. Ejima et al., *Characterization of Mott-insulating and superfluid phases in the one-dimensional Bose-Hubbard model*, *Physical Review A* **85** (2012), 053644 (siehe S. 36).
- [45] C. M. Bender und S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers, Asymptotic Methods and Perturbation Theory*, New York: Springer-Verlag, 1999, ISBN: 0-387-98931-5 (siehe S. 37).
- [46] T. Sowinski, *Quantum phase transition in a shallow one-dimensional optical lattice*, *Journal of the Optical Society of America B* **32** (2015), 670-675 (siehe S. 40).
- [47] M. Lacki, B. Damski und J. Zakrzewski, *Numerical studies of ground-state fidelity of the Bose-Hubbard model*, *Physical Review A* **89** (2014), 033625 (siehe S. 40).
- [48] S. Ejima, H. Fehske und F. Gebhard, *Dynamic properties of the one-dimensional Bose-Hubbard model*, *Europhysics Letters* **93** (2011), 30002 (siehe S. 40).
- [49] S. Ejima et al., *One-dimensional Bose-Hubbard model with local three-body interactions*, *Physical Review A* **88** (2013), 063625 (siehe S. 40).

- [50] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 2000, ISBN: 3-540-67158-7 (siehe S. 49).

## Alternative Darstellung der isothermen Kompressibilität $\kappa_T$

Die folgende Herleitung der alternativen Darstellung der isothermen Kompressibilität beruht auf dem Wissen, welches aus dem Lehrbuch [50] erhalten wurde.

Bekanntermaßen stellen der Druck  $p$ , die Temperatur  $T$  und das chemische Potential  $\mu$  intensive Größen dar, wohingegen das Volumen  $V$  und die Teilchenzahl  $N$  extensiv sind. Fasst man also jeweils das chemische Potential bzw. den Druck als Funktion von  $T$ ,  $V$  und  $N$  auf und skaliert die Systemgröße mit einem Faktor  $\alpha$ , so müssen beide Größen konstant bleiben. Somit gilt:

$$\mu(T, V, N) = \mu(T, \alpha V, \alpha N) \quad p(T, V, N) = p(T, \alpha V, \alpha N)$$

Diese beiden Gleichungen werden nun jeweils nach dem Skalierungsfaktor  $\alpha$  abgeleitet und dieser hiernach auf 1 gesetzt:

$$\begin{aligned} 0 &= \left( \left( \frac{\partial \mu}{\partial \alpha V} \right)_{T,N} V + \left( \frac{\partial \mu}{\partial \alpha N} \right)_{T,V} N \right) \Big|_{\alpha=1} & 0 &= \left( \left( \frac{\partial p}{\partial \alpha V} \right)_{T,N} V + \left( \frac{\partial p}{\partial \alpha N} \right)_{T,V} N \right) \Big|_{\alpha=1} \\ \rightarrow 0 &= \left( \frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{T,N} V + \left( \frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,N} N & 0 &= \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N} V + \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,N} N \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Weiterhin kann man mithilfe des totalen Differentials der freien Energie  $dF = -SdT - pdV + \mu dN$  die folgende Maxwellrelation herleiten:

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{T,N} = \left( \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} \right)_{T,N} = \left( \frac{\partial}{\partial N} \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} \right)_{T,V} = - \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (\text{A.2})$$

Mit den Gleichungen (A.1) und (A.2) und der Definition der isothermen Kompressibilität  $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,N}$  ergibt sich dann:

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,V} = -\frac{V}{N} \left( \frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{V}{N} \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} = \frac{V^2}{N^2} \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{V}{N^2} \frac{1}{\kappa_T}$$

Hieraus folgt die Darstellung von  $\kappa_T$  aus Gleichung (2.1).





## Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie einer endlichen Matrix

Der folgende Abschnitt beruht auf dem Kapitel *Appendix 4: matrix perturbation theory* aus [36], wird in Folge aber ausführlicher dargestellt sein.

Der Hamiltonian sei gegeben durch  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$  und wir wollen die Grundzustandsenergie  $E$  des gesamten Hamiltonians in einer Reihenentwicklung von  $\lambda$  erhalten. Hierfür muss auch die zugehörige Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  entwickelt werden:

$$E = \sum_{r=0}^{\infty} E_r \lambda^r, \quad |\psi\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r |\psi_r\rangle$$

Sei nun der nicht entartete Grundzustand des ungestörten Hamiltonians  $\hat{H}_0$  durch  $|\psi_0\rangle = |0\rangle$  und dessen Energie durch  $e_0 = E_0$  gegeben.

$$\hat{H}_0 |0\rangle = e_0 |0\rangle$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung  $\hat{H}\psi = E\psi$  liefert nun durch Einsetzen

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r |\psi_r\rangle = \left( \sum_{r=0}^{\infty} E_r \lambda^r \right) \left( \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r |\psi_r\rangle \right).$$

Untersucht man, welche Vorfaktoren auf der rechten Seite mit einer bestimmten Ordnung  $\lambda^r$  verknüpft sind, erhält man die folgende Gleichung<sup>1</sup>:

$$\sum_{r=0}^{\infty} \hat{H}_0 \lambda^r |\psi_r\rangle + \sum_{r=0}^{\infty} \hat{V} \lambda^{r+1} |\psi_r\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^r E_{r-s} \lambda^r |\psi_s\rangle$$

Ein Koeffizientenvergleich bzgl.  $\lambda^r$  führt dann zu

$$\hat{H}_0 |\psi_r\rangle + \hat{V} |\psi_{r-1}\rangle = \sum_{s=0}^r E_{r-s} |\psi_s\rangle.$$

<sup>1</sup> Dieses Vorgehen ist als Cauchy-Produktformel bekannt.

Aus der rechten Summe kann man nun  $r = s$  herausziehen:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 |\psi_r\rangle + \hat{V} |\psi_{r-1}\rangle &= E_0 |\psi_r\rangle + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} |\psi_s\rangle \\ \Leftrightarrow (\hat{H}_0 - E_0) |\psi_r\rangle &= -\hat{V} |\psi_{r-1}\rangle + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} |\psi_s\rangle\end{aligned}$$

Diese Gleichung soll nun mit  $\langle k|$  multipliziert werden, wobei dieser einen Zustand des ungestörten Hamiltonians  $\hat{H}_0$  mit  $\hat{H}_0 |k\rangle = e_k |k\rangle$  sein soll. Weiterhin wird die Definition  $c_{k,r} := \langle k|\psi_r\rangle$  eingeführt.

Für  $k = 0$  folgt dann

$$\langle 0|(\hat{H}_0 - E_0) |\psi_r\rangle = -\langle 0|\hat{V} |\psi_{r-1}\rangle + \sum_{s=0}^{r-1} \langle 0|E_{r-s} |\psi_s\rangle.$$

Die linke Seite verschwindet und auf der rechten Seite kann eine  $1 = \sum_j |j\rangle \langle j|$  eingefügt werden, wobei die Summe über alle Zustände des ungestörten Hamiltonians  $\hat{H}_0$  läuft.

$$0 = -\sum_j \langle 0|\hat{V}|j\rangle \langle j|\psi_{r-1}\rangle + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} \langle 0|\psi_s\rangle$$

Mithilfe der Definition der Matrixelemente von  $\hat{V}$  in der ungestörten Basis  $V_{kj} := \langle k|\hat{V}|j\rangle$  und der Wahl alle Wellenfunktionkorrekturen  $|\psi_r\rangle$  orthogonal zur ungestörten Wellenfunktion  $|0\rangle$  zu setzen ( $c_{0,r} = \langle 0|\psi_r\rangle = 0$  für  $r > 0$ ), folgt

$$E_r = \sum_j V_{0j} c_{j,r-1}. \quad (\text{B.1})$$

Für  $k \neq 0$  hingegen folgt

$$\begin{aligned}\langle k|(\hat{H}_0 - E_0) |\psi_r\rangle &= -\langle k|\hat{V} |\psi_{r-1}\rangle + \sum_{s=0}^{r-1} \langle k|E_{r-s} |\psi_s\rangle \\ \Leftrightarrow (e_k - e_0) c_{k,r} &= -\sum_j \langle k|\hat{V}|j\rangle \langle j|\psi_{r-1}\rangle + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} c_{k,s} \\ \Leftrightarrow (e_k - e_0) c_{k,r} &= -\sum_j V_{kj} c_{j,r-1} + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} c_{k,s}.\end{aligned}$$

Umstellen dieser Gleichung führt dann zu

$$c_{k,r} = \frac{1}{e_k - e_0} \left[ -\sum_j V_{kj} c_{j,r-1} + \sum_{s=0}^{r-1} E_{r-s} c_{k,s} \right]. \quad (\text{B.2})$$

Die Gleichungen (B.1) und (B.2) stellen die Ergebnisse dar, welche in Gleichung (4.12) gelistet sind.

## CCS-Format

Das sogenannte *Compressed Column Storage-Format* (CCS-Format) dient der Speicherung einer dünnbesetzten Matrix. Eine solche Matrix besitzt viele Einträgen gleich null, welche somit nicht gespeichert werden müssen.

Das grundlegende Prinzip sind hierbei drei Vektoren, welche zur eindeutigen Speicherung der Matrix dienen. Der Vektor  $A$  speichert die Werte der Einträge ungleich null und der Vektor  $JA$  die dazugehörigen Zeilenindizes. Der Vektor  $IA$  speichert die Zeiger auf die Einträge in  $JA$  bzw.  $A$ , bei welchen eine neue Spalte beginnt. Der letzte Eintrag von  $IA$  gibt weiterhin die Gesamtanzahl der Einträge ungleich null an. Sei  $d \times d$  die Größe der zu speichernden Matrix. Soll die komplette Matrix gespeichert werden, müssten so  $d^2$  Einträge gespeichert werden, während es im CCS-Format nur  $2a + d + 1$  Speicherplätze braucht, wobei  $a$  die Anzahl der Einträge ungleich null angibt.

Als Beispiel sei hier die Matrix  $\hat{V}$  aus Gleichung (4.11) herangezogen. Diese hatte die folgende Form:

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & -2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & -3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & -2 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -1 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Im CCS-Format nimmt diese Matrix die nun folgende Form an (aus Darstellungsgründen werden hier die Beträge der Einträge der Matrix gelistet):

$A =$	3	2	1	1	1	2	2	3	3	2	1	1	1	1	1	2	2	1	1	2	1	1	2	3
$JA =$	1	2	0	4	3	1	5	2	6	5	1	6	4	7	2	5	8	3	8	5	7	9	6	8
$IA =$	0	1			4			7		9		11			15		18		20			23	24	

Tabelle C.1: Die Matrix  $-\hat{V}$  aus Gleichung (4.11) im CCS-Format.

Innerhalb einer Spalte ist die Reihenfolge der Reihenindizes in  $JA$  nicht unbedingt geordnet, was aber für die Funktionsweise des Codes irrelevant ist. Viel wichtiger ist, dass, wenn die Matrix Spalte für Spalte aufgebaut wird, wie es in den vorliegenden Fällen geschieht, das Aufsetzen der drei Vektoren mit der sehr

effizienten Funktion `push_back` aus der Standardbibliothek von C++ geschehen kann, was ein schnelles Aufsetzen garantiert. Dies gilt insbesondere dann, wenn man mit dem größten Graphen beginnt, so die größten Matrizen als erstes berechnet werden und es somit nur bei dieser Berechnung zu zeitaufwändigen Reallokationen im Speicher kommt. Alle folgenden Graphen liefern kleinere Matrizen. Werden diese nun an der gleichen Stelle gespeichert, reicht der reservierte Platz ohne Probleme und eine große Menge Reallokationen können vermieden werden.

Die Matrixmultiplikation zweier Matrizen nach Gustavson [40], die in diesem Format gespeichert sind, gestaltet sich vom Prinzip her relativ leicht und beruht nur auf dem *Zeile mal Spalte* Prinzip der Matrixmultiplikation. Sei nun angenommen, dass zwei quadratische Matrizen  $A$  und  $B$  der Größe  $l \times l$  miteinander multipliziert werden sollen. Es sollen nun nacheinander die  $l$  Spalten der Ergebnismatrix  $C$  berechnet werden und diese auch im CCS Format gespeichert werden. Hierbei werden die Namen der drei Vektoren an den Namen der Matrix selber angepasst, das heißt die Matrix  $B$  speichert die Einträge im Vektor  $B$ , die Zeilenindizes im Vektor  $JB$  und die Zeiger auf die neuen Spalten im Vektor  $IB$ .

Um die  $i$ -te Spalte der Matrix  $C$  zu erhalten muss man jede der Zeilen aus  $A$  mit der  $i$ -ten Spalte von  $B$  multiplizieren. Über die Zeiger in dem Vektor  $IB$  kann man leicht diejenigen Zeilenindizes in  $JB$  herausfinden, welche die Einträge ungleich null in der  $i$ -ten Spalte angeben. Für jeden dieser Zeilenindizes guckt man nun in die jeweilige Spalte von  $A$  nach den Einträgen ungleich null und multipliziert die entsprechenden Einträge aus den Vektoren  $A$  bzw.  $B$ . Der Zeilenindex des Eintrages in  $C$  ist dann natürlich durch den Zeilenindex von  $A$  gegeben. So erhält man letztendlich direkt eine gesamte Spalte von  $C$  und muss dieses Vorgehen nur auf alle Spalten anwenden.

Dieses Prinzip sei im folgenden Code in der Sprache C++ verdeutlicht (ohne Initialisierung der Variablen):

```
ip=0;
for (unsigned int i=0; i<l; i++){
    IC[i]=ip;
    for (unsigned int jp=IB[i]; jp<IB[i+1]; jp++){
        j=JB[jp];
        for (unsigned int kp=IA[j]; kp<IA[j+1]; kp++){
            k=JA[kp];
            if (xb[k]!=i) {
                JC[ip]=k;
                ip++;
                xb[k]=i;
                x[k]=B[jp]*A[kp];
            } else {
                x[k]+=B[jp]*A[kp];
            }
        }
    }
    for (unsigned int vp=IC[i]; vp<ip; vp++){
        v=JC[vp];
        C[vp]=x[v];
    }
}
IC[l]=ip;
```

$j$ ,  $k$ ,  $v$  und  $ip$  sind hierbei positive Integer,  $x$  bzw.  $xb$  sind beides Vektoren der Länge  $l$ , wobei  $x$  vollkommen auf 0 initialisiert sein sollte und  $xb$  in diesem Fall am besten auf einen Wert größer gleich  $l$ .  $x$  dient hierbei der Zwischenspeicherung der Ergebnisse einer Spalte von  $C$  und mit  $xb$  wird geprüft, ob ein Eintrag einer Spalte vorher bereits einmal getroffen wurde oder nicht. Wenn dies nicht der Fall war, muss  $JC$  beschrieben werden und  $ip$  um eins inkrementiert werden, da  $ip$  speichert, wie viele Einträge ungleich null in einer Spalte von  $C$  gefunden wurden, was wiederum für den Vektor  $IC$  gebraucht wird. Der obige Code kann leicht für die gebrauchten Fälle angepasst werden und außerdem auf die Nutzung der `push_back`-Funktion zum Beschreiben der Vektoren der Matrix  $C$  umgewandelt werden.

## Störungstheoretische Darstellung einer Matrix als Blockdiagonalmatrix

Dieser Abschnitt soll das Vorgehen beschreiben, um störungstheoretisch eine Darstellung einer Matrix als Blockdiagonalmatrix herzuleiten und beruht auf dem Kapitel *Appendix 5: matrix block diagonalization* aus [36], wird jedoch auch hier im Folgenden ausführlich dargestellt.

Erneut wird ein Hamiltonian der Form  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$  betrachtet. Die Basis ist durch  $d$  Eigenzustände von  $\hat{H}_0$  gegeben, wovon die ersten  $L$  Zustände die entarteten ungestörten Anregungszustände sind. Die Basiszustände seien durch  $|k\rangle$  beschrieben und die zugehörige Energie mit  $e_k$ .

Es soll nun eine orthogonale Matrix  $O$  gefunden werden, sodass der transformierte Hamiltonian  $\tilde{H}$  die gewünschte Form einer Blockdiagonalmatrix besitzt.

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= O^{-1}\hat{H}O & (D.1) \\ \rightarrow \tilde{H} &= \begin{pmatrix} h_{\text{eff}} & & 0 \\ \cdots & \ddots & \cdots \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Um dies zu erreichen, werden die Matrizen  $\tilde{H}$  und  $O$  in einer Reihenentwicklung bzgl.  $\lambda$  entwickelt:

$$\tilde{H} = \tilde{H}^{(0)} + \lambda\tilde{H}^{(1)} + \lambda^2\tilde{H}^{(2)} + \dots, \quad O = O^{(0)} + \lambda O^{(1)} + \lambda^2 O^{(2)} + \dots \quad (D.2)$$

Hierbei sind  $\tilde{H}^{(0)} = \hat{H}_0$  und  $O^{(0)} = I$ .  $I$  stellt hierbei die Identitätsmatrix dar. Schreibt man die Gleichung (D.1) als  $O\tilde{H} = \hat{H}O$  und setzt hierin die Entwicklungen aus Gleichung (D.2), so folgt

$$(O^{(0)} + \lambda O^{(1)} + \lambda^2 O^{(2)} + \dots)(\tilde{H}^{(0)} + \lambda\tilde{H}^{(1)} + \lambda^2\tilde{H}^{(2)} + \dots) = (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})(O^{(0)} + \lambda O^{(1)} + \lambda^2 O^{(2)} + \dots).$$

Ein Koeffizientenvergleich der Terme der Ordnung  $\lambda^r$  führt dann direkt zu

$$\tilde{H}^{(r)} + O^{(r)}\hat{H}_0 - \hat{H}_0 O^{(r)} = \hat{V}O^{(r-1)} - \sum_{s=1}^{r-1} O^{(r-s)}\tilde{H}^{(s)}.$$

Von dieser Gleichung kann man nun jeweils das Matrixelement  $A_{ij} = \langle i|A|j\rangle$  betrachten:

$$\begin{aligned} \langle i|\tilde{H}^{(r)}|j\rangle + \langle i|O^{(r)}\hat{H}_0|j\rangle - \langle i|\hat{H}_0O^{(r)}|j\rangle &= \langle i|\hat{V}O^{(r-1)} - \sum_{s=1}^{r-1} O^{(r-s)}\tilde{H}^{(s)}|j\rangle \\ \Leftrightarrow \tilde{H}_{ij}^{(r)} + \langle i|O^{(r)}e_j|j\rangle - \langle i|e_iO^{(r)}|j\rangle &= \left( \hat{V}O^{(r-1)} - \sum_{s=1}^{r-1} O^{(r-s)}\tilde{H}^{(s)} \right)_{ij} := X_{ij}^{(r)} \\ \Leftrightarrow \tilde{H}_{ij}^{(r)} + (e_j - e_i)O_{ij}^{(r)} &= X_{ij}^{(r)} \end{aligned}$$

Hierbei ist die Matrix  $X^{(r)}$  vollständig durch die Matrizen  $O$  und  $\tilde{H}$  bei kleineren Ordnungen bestimmt. Für  $e_i = e_j$  folgt direkt

$$\tilde{H}_{ij}^{(r)} = X_{ij}^{(r)}. \quad (\text{D.3})$$

So erhält man die Elemente der  $r$ -ten Ordnung des effektiven Hamiltonians  $h_{\text{eff}}$ . Für  $e_i \neq e_j$  hingegen gilt  $\tilde{H}_{ij}^{(r)} = 0$  aufgrund der Konstruktion von  $\tilde{H}$  und somit

$$O_{ij}^{(r)} = \frac{1}{e_j - e_i} X_{ij}^{(r)}. \quad (\text{D.4})$$

Die Gleichungen (D.3) und (D.4) stellen die Gleichungen dar, welche im Laufe der Arbeit in Gleichung (4.16) genutzt wurden.

Gleichung (D.4) liefert nur jene Blöcke von  $O^{(r)}$ , welche nicht auf der Diagonalen liegen. Die Form der diagonalen Blöcke ist dann abhängig von der gewählten Methode. Für diese Arbeit genügt es die Einträge  $O^{(r)}$  ( $r > 0$ ) gleich null zu setzen, womit man die Ähnlichkeitstransformation erhält, welche 1996 von Gelfand [41] vorgeschlagen wurde.  $O$  ist dabei aber nicht orthogonal, was bedacht werden muss, wenn die Vektoren dieser Matrix weiter genutzt werden sollen. Außerdem kann die hier gewählte Methode manchmal fehlschlagen, besonders wenn die Anregungszustände die gleichen Quantenzahlen wie der Grundzustand besitzen. Glücklicherweise ist dies für die Einteilchen- bzw. Einlochanregungen des Bose-Hubbard-Modells in dieser Arbeit nicht der Fall und diese simpelste Methode kann genutzt werden.

Der große Vorteil dieser Methode ist, dass man zur Berechnen der Matrix  $X^{(r)}$  nur den linken  $d \times L$  Teil von jeder Matrix  $O^{(r)}$  braucht, was sehr viel Speicherplatz spart. Da diese Methode für dieses Problem funktioniert, wurde sie somit auch genutzt.

## Berechnete Reihen

Die Grundzustandsenergie ergibt sich für eine gleichmäßige Füllung von  $n = 1$  bis zur 24. Ordnung zu

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{Mott}}}{N} = & -4\lambda^2 + 4\lambda^4 + \frac{272}{9}\lambda^6 - \frac{5068}{81}\lambda^8 + \frac{88342}{729}\lambda^{10} - \frac{19610384}{6561}\lambda^{12} - \frac{8020902135607}{661348800}\lambda^{14} \\ & - \frac{32507578587517774813}{116661928320000}\lambda^{16} + \frac{91174913022226227167116279}{37728467618688000000}\lambda^{18} \\ & - \frac{71733715297271484352050546385117379}{2415874512720972441600000000}\lambda^{20} \\ & + \frac{16167009625701042486696379149828038020865939}{3192143311148475306534912000000000}\lambda^{22} \\ & - \frac{18475518135634741816024559757547074873663904259756285729}{290170713261005646558144719920496640000000000}\lambda^{24}. \end{aligned}$$

Für  $n = 2$  ergibt sich bis zur 18. Ordnung

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{Mott}}}{N} = & 1 - 12\lambda^2 + 32\lambda^4 + \frac{198416}{315}\lambda^6 - \frac{3385322797}{3472875}\lambda^8 + \frac{16465782254578}{84234583125}\lambda^{10} \\ & - \frac{7350064303936751836656911}{3820615351613156250}\lambda^{12} \\ & - \frac{65328309751806895220898363165670432291513}{4216207561855343701624852875000000}\lambda^{14} \\ & - \frac{3348667033123614699797340722410156119000263264477837663964181}{262759251267100980388588763289694652916840000000000}\lambda^{16} \\ & + \frac{533465921553493007561991512476333526214316\dots\dots\dots915844642253800171034406759898888783707}{16477827113109624124663252929528027\dots\dots\dots093024277197648739878960000000000000}\lambda^{18}. \end{aligned}$$

Für  $n = 3$  konnte die Grundzustandsenergie bis zur 14. Ordnung berechnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{Mott}}}{N} = & 3 - 24\lambda^2 + 124\lambda^4 + \frac{294\,656}{63}\lambda^6 - \frac{11\,207\,105\,017}{9\,029\,475}\lambda^8 - \frac{304\,932\,900\,798\,142\,269\,676}{3\,516\,204\,203\,386\,875}\lambda^{10} \\ & - \frac{39\,433\,892\,936\,615\,327\,274\,896\,871\,074\,109\,109}{307\,261\,771\,562\,692\,684\,856\,868\,750}\lambda^{12} \\ & - \frac{28\,385\,149\,698\,343\,363\,309\,793\,437\,251\,570\,303\,626\,883\,569\,258\,219}{28\,453\,939\,597\,222\,900\,493\,119\,055\,796\,827\,700\,000\,000}\lambda^{14} \end{aligned}$$



Für die Einteilchendispersion mit der Dichte  $n = 1$  ergibt sich bis zur 13. Ordnung:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{\text{Teilchen}}(k) = & 1 - 4 \cos(k) \lambda + \left[ 5 - 4 \cos(2k) \right] \lambda^2 + \left[ 18 \cos(k) - 12 \cos(3k) \right] \lambda^3 \\
& + \left[ -\frac{513}{20} + 64 \cos(2k) - 44 \cos(4k) \right] \lambda^4 \\
& + \left[ -\frac{137}{150} \cos(k) + 276 \cos(3k) - 180 \cos(5k) \right] \lambda^5 \\
& + \left[ -\frac{80139}{200} - \frac{426161}{750} \cos(2k) + 1296 \cos(4k) - 788 \cos(6k) \right] \lambda^6 \\
& + \left[ \frac{52704029}{22500} \cos(k) - \frac{2283861}{1250} \cos(3k) + 6396 \cos(5k) - 3612 \cos(7k) \right] \lambda^7 \\
& + \left[ -\frac{160013910781}{16200000} - \frac{675641086}{84375} \cos(2k) - \frac{49717904}{3125} \cos(4k) + 32608 \cos(6k) \right. \\
& \quad \left. - 17116 \cos(8k) \right] \lambda^8 \\
& + \left[ \frac{890288421469}{8100000} \cos(k) + \frac{2229307601}{101250} \cos(3k) - \frac{4378543586}{46875} \cos(5k) \right. \\
& \quad \left. + 170052 \cos(7k) - 83172 \cos(9k) \right] \lambda^9 \\
& + \left[ -\frac{661191632770589}{1458000000} - \frac{136142283963437}{364500000} \cos(2k) \right. \\
& \quad + \frac{24657233334883}{75937500} \cos(4k) - \frac{44508891036}{78125} \cos(6k) + 901648 \cos(8k) \\
& \quad \left. - 412196 \cos(10k) \right] \lambda^{10} \\
& + \left[ \frac{11222602825606201}{2187000000} \cos(k) + \frac{10364447829650461}{9112500000} \cos(3k) \right. \\
& \quad + \frac{144991554612443}{227812500} \cos(5k) - \frac{4019325600124}{1171875} \cos(7k) + 4841196 \cos(9k) \\
& \quad \left. - 2075436 \cos(11k) \right] \lambda^{11} \\
& + \left[ -\frac{3038593075459549746857}{137781000000000} - \frac{26025878327628169139}{1230187500000} \cos(2k) \right. \\
& \quad - \frac{2465621793022240493}{1230187500000} \cos(4k) + \frac{39512493931144393}{8542968750} \cos(6k) \\
& \quad \left. - \frac{40340106103424}{1953125} \cos(8k) + 26250240 \cos(10k) - 10586892 \cos(12k) \right] \lambda^{12} \\
& + \left[ \frac{5789688287579378925646667}{217005075000000000} \cos(k) + \frac{3683878316677523852279}{55358437500000} \cos(3k) \right. \\
& \quad + \frac{290980245232225024529}{55358437500000} \cos(5k) + \frac{224865447953463225796}{64072265625} \cos(7k) \\
& \quad \left. - \frac{1211322126212672}{9765625} \cos(9k) + 143458164 \cos(11k) - 54595476 \cos(13k) \right] \lambda^{13}
\end{aligned}$$

Hingegen gilt für die Einlochanregung mit  $n = 1$

$$\begin{aligned}
 -\epsilon_{\text{Loch}}(k) = & -2 \cos(k) \lambda + \left[ 8 - 4 \cos(2k) \right] \lambda^2 + \left[ 12 \cos(k) - 12 \cos(3k) \right] \lambda^3 \\
 & + \left[ 64 \cos(2k) - 44 \cos(4k) \right] \lambda^4 + \left[ -\frac{224}{3} \cos(k) + 276 \cos(3k) - 180 \cos(5k) \right] \lambda^5 \\
 & + \left[ -\frac{512}{3} - \frac{1436}{3} \cos(2k) + 1296 \cos(4k) - 788 \cos(6k) \right] \lambda^6 \\
 & + \left[ \frac{1900}{9} \cos(k) - 2540 \cos(3k) + 6396 \cos(5k) - 3612 \cos(7k) \right] \lambda^7 \\
 & + \left[ -\frac{12944}{81} + \frac{928}{9} \cos(2k) - \frac{1256192}{81} \cos(4k) + 32608 \cos(6k) - 17116 \cos(8k) \right] \lambda^8 \\
 & + \left[ -\frac{20816}{27} \cos(k) + \frac{261736}{81} \cos(3k) - \frac{22850072}{243} \cos(5k) + 170052 \cos(7k) \right. \\
 & \quad \left. - 83172 \cos(9k) \right] \lambda^9 \\
 & + \left[ -\frac{726550}{729} + \frac{2062580}{81} \cos(2k) + \frac{48184064}{729} \cos(4k) - \frac{414625840}{729} \cos(6k) \right. \\
 & \quad \left. + 901648 \cos(8k) - 412196 \cos(10k) \right] \lambda^{10} \\
 & + \left[ \frac{75196273}{2187} \cos(k) + \frac{61081634}{729} \cos(3k) + \frac{1280299748}{2187} \cos(5k) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{7504185646}{2187} \cos(7k) + 4841196 \cos(9k) - 2075436 \cos(11k) \right] \lambda^{11} \\
 & + \left[ -\frac{251437703}{2187} - \frac{1482814679}{6561} \cos(2k) + \frac{121385719}{486} \cos(4k) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{61566898519}{13122} \cos(6k) - \frac{15055276775}{729} \cos(8k) + 26250240 \cos(10k) \right. \\
 & \quad \left. - 10586892 \cos(12k) \right] \lambda^{12} \\
 & + \left[ -\frac{6129687197}{787320} \cos(k) + \frac{11328006605}{157464} \cos(3k) + \frac{80374643273}{78732} \cos(5k) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{5516661013609}{157464} \cos(7k) - \frac{1627687771879}{13122} \cos(9k) + 143458164 \cos(11k) \right. \\
 & \quad \left. - 54595476 \cos(13k) \right] \lambda^{13}.
 \end{aligned}$$

Die Einteilchenanregungsenergie für die Dichte  $n = 2$  ergibt sich bis zur 10. Ordnung zu

$$\begin{aligned}
\epsilon_{\text{Teilchen}}(k) = & 2 - 6 \cos(k) \lambda + \left[ 16 - 12 \cos(2k) \right] \lambda^2 + \left[ 84 \cos(k) - 60 \cos(3k) \right] \lambda^3 \\
& + \left[ -\frac{463}{3} + 528 \cos(2k) - 372 \cos(4k) \right] \lambda^4 \\
& + \left[ -\frac{16259}{30} \cos(k) + 3900 \cos(3k) - 2580 \cos(5k) \right] \lambda^5 \\
& + \left[ -\frac{126582341}{25200} - \frac{15898943}{1400} \cos(2k) + 31200 \cos(4k) - 19164 \cos(6k) \right] \lambda^6 \\
& + \left[ \frac{3683773483}{126000} \cos(k) - \frac{401541897}{4000} \cos(3k) + 262020 \cos(5k) - 149100 \cos(7k) \right] \lambda^7 \\
& + \left[ -\frac{133242010985269}{666792000} - \frac{6447656013061}{41160000} \cos(2k) - \frac{5458173028583}{5040000} \cos(4k) \right. \\
& \quad \left. + 2271984 \cos(6k) - 1199460 \cos(8k) \right] \lambda^8 \\
& + \left[ \frac{4488483341970822023}{1400263200000} \cos(k) + \frac{114210541778558003}{103723200000} \cos(3k) \right. \\
& \quad \left. - \frac{3360231297610597}{302400000} \cos(5k) + 20145900 \cos(7k) - 9896100 \cos(9k) \right] \lambda^9 \\
& + \left[ -\frac{10797539342831966075759449}{605518616102400000} - \frac{16694204472776553342121}{1437603552000000} \cos(2k) \right. \\
& \quad + \frac{586720668216441813989}{43563744000000} \cos(4k) - \frac{2080669679604829823}{18144000000} \cos(6k) \\
& \quad \left. + 181583520 \cos(8k) - 83277228 \cos(10k) \right] \lambda^{10}.
\end{aligned}$$

Die analoge Einlochanregungsenergie für  $n = 2$  hat die folgende Form:

$$\begin{aligned}
 -\epsilon_{\text{Loch}}(k) = & -1 - 4 \cos(k) \lambda + \left[ 21 - 12 \cos(2k) \right] \lambda^2 + \left[ 66 \cos(k) - 60 \cos(3k) \right] \lambda^3 \\
 & + \left[ -\frac{105}{4} + 528 \cos(2k) - 372 \cos(4k) \right] \lambda^4 \\
 & + \left[ -\frac{6883}{6} \cos(k) + 3900 \cos(3k) - 2580 \cos(5k) \right] \lambda^5 \\
 & + \left[ -\frac{7172911}{3360} - \frac{332039}{32} \cos(2k) + 31200 \cos(4k) - 19164 \cos(6k) \right] \lambda^6 \\
 & + \left[ -\frac{5210078039}{1411200} \cos(k) - \frac{92682155}{896} \cos(3k) + 262020 \cos(5k) - 149100 \cos(7k) \right] \lambda^7 \\
 & + \left[ -\frac{1018175130401}{127008000} - \frac{2803416401}{5644800} \cos(2k) - \frac{1115460069227}{1036800} \cos(4k) \right. \\
 & \quad \left. + 2271984 \cos(6k) - 1199460 \cos(8k) \right] \lambda^8 \\
 & + \left[ \frac{18770618578701067}{124467840000} \cos(k) + \frac{4704586744611281}{7112448000} \cos(3k) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{4845275016388337}{435456000} \cos(5k) + 20145900 \cos(7k) - 9896100 \cos(9k) \right] \lambda^9 \\
 & + \left[ -\frac{286993421822039277143}{1725124262400000} + \frac{1316151835509578869}{497871360000} \cos(2k) \right. \\
 & \quad + \frac{40154636012674200971}{2816529408000} \cos(4k) - \frac{2995359987971763397}{26127360000} \cos(6k) \\
 & \quad \left. + 181583520 \cos(8k) - 83277228 \cos(10k) \right] \lambda^{10}
 \end{aligned}$$

Bis zur 8. Ordnung konnte die Einteilchendispersion für die Dichte  $n = 3$  berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{\text{Teilchen}}(k) = & 3 - 8 \cos(k) \lambda^1 + \left[ 33 - 24 \cos(2k) \right] \lambda^2 + \left[ 228 \cos(k) - 168 \cos(3k) \right] \lambda^3 \\
 & + \left[ -\frac{2061}{4} + 2064 \cos(2k) - 1464 \cos(4k) \right] \lambda^4 \\
 & + \left[ -\frac{59059}{15} \cos(k) + 21504 \cos(3k) - 14280 \cos(5k) \right] \lambda^5 \\
 & + \left[ -\frac{1452022001}{50400} - \frac{467178877}{5600} \cos(2k) + 242256 \cos(4k) - 149208 \cos(6k) \right] \lambda^6 \\
 & + \left[ \frac{4597933289689}{31752000} \cos(k) - \frac{186586444657}{168000} \cos(3k) + 2864064 \cos(5k) \right. \\
 & \quad \left. - 1633128 \cos(7k) \right] \lambda^7 \\
 & + \left[ -\frac{101506961992607736659}{64838854080000} - \frac{1045143797041876373}{880165440000} \cos(2k) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{752334452878783}{45360000} \cos(4k) + 34956048 \cos(6k) - 18483576 \cos(8k) \right] \lambda^8
 \end{aligned}$$

Die Einlochdispersion ergibt sich für die Dichte  $n = 3$  zu

$$\begin{aligned}
 -\epsilon_{\text{Loch}}(k) = & -2 - 6 \cos(k) \lambda + \left[ 40 - 24 \cos(2k) \right] \lambda^2 + \left[ 192 \cos(k) - 168 \cos(3k) \right] \lambda^3 \\
 & + \left[ -\frac{2351}{15} + 2064 \cos(2k) - 1464 \cos(4k) \right] \lambda^4 \\
 & + \left[ -\frac{944923}{150} \cos(k) + 21504 \cos(3k) - 14280 \cos(5k) \right] \lambda^5 \\
 & + \left[ -\frac{338248727}{25200} - \frac{274554433}{3500} \cos(2k) + 242256 \cos(4k) - 149208 \cos(6k) \right] \lambda^6 \\
 & + \left[ -\frac{3911634603673}{52920000} \cos(k) - \frac{316190631601}{280000} \cos(3k) + 2864064 \cos(5k) \right. \\
 & \quad \left. - 1633128 \cos(7k) \right] \lambda^7 \\
 & + \left[ -\frac{610874323288801241}{19070251200000} + \frac{5398623817985213}{122245200000} \cos(2k) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{1666447634870299}{100800000} \cos(4k) + 34956048 \cos(6k) - 18483576 \cos(8k) \right] \lambda^8.
 \end{aligned}$$



# Abbildungsverzeichnis

---

1.1	Schematische Darstellung des experimentell aufgebauten Gitters . . . . .	2
2.1	Phasendiagramm des Bose-Hubbard-Modells . . . . .	11
3.1	Grafische Darstellung der lokalen Terme des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen . . . . .	13
3.2	Grafische Darstellung der relevanten Cluster des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen . . . . .	14
3.3	Grafische Darstellung der relevanten Graphen des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen . . . . .	15
3.4	Grafische Darstellung eines Graphen, welches sich aus zwei disjunkten Graphen zusammensetzt am Beispiel des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit vier Gitterplätzen	16
4.1	Verbildlichung des Algorithmus zum Aufsetzen der Basis . . . . .	19
4.2	Besetzungsstruktur von $\hat{V}$ für $N = L = 12$ . . . . .	26
4.3	Verbildlichung des Abziehens der Untergraphen um das Gewicht des Graphen der Länge drei zu erhalten . . . . .	31
4.4	Verbildlichung des Abziehens der Untercluster um die Gewichte $W_i$ der Graphen der Länge $i$ zu erhalten . . . . .	31
4.5	Verbildlichung der Addition der Matrixelemente, um die Einträge $\Delta(r)$ des effektiven Hamiltonians des unendlichen Gitters zu erhalten . . . . .	32
5.1	Dispersionen der Einteilchen- bzw. Einlochanregungen für $\lambda = 0,1$ . . . . .	36
5.2	Verhalten der Anregungslücke vor und nach einer Padé-Approximation der erhaltenen Reihe . . . . .	37
5.3	Phasendiagramm des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells im Vergleich zu bereits existierenden Daten . . . . .	39





# Tabellenverzeichnis

---

5.1	Dimension des Hilbertraumes in Abhängigkeit von der Länge der Graphen . . . . .	35
5.2	Aus der (Z,M) Padé-Approximation gewonnene Werte von $\lambda_{\text{krit}}$ für die Dichte $n = 1$ für verschiedene Werte von $Z$ und $M$ . . . . .	38
5.3	Aus der (Z,M) Padé-Approximation gewonnene Werte von $\lambda_{\text{krit}}$ für die Dichte $n = 2$ für verschiedene Werte von $Z$ und $M$ . . . . .	38
5.4	Aus der (Z,M) Padé-Approximation gewonnene Werte von $\lambda_{\text{krit}}$ für die Dichte $n = 3$ für verschiedene Werte von $Z$ und $M$ . . . . .	38
5.5	Aus den Tabellen 5.2 bis 5.4 erhaltene untere und obere Grenzen für den kritischen Wert $\lambda_{\text{krit}} = t_{\text{krit}}/U$ in Abhängigkeit von der Dichte $n$ des Mott-Isolators. . . . .	40
C.1	Die Matrix $-\hat{V}$ aus Gleichung (4.11) im CCS-Format. . . . .	53