

Diagonalización Exacta del Hamiltoniano Bose-Hubbard

Novoa Gastaldi Alejandro Silvestre

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

silvestre.novoa@ciencias.unam.mx

Marzo - 2019

Sea un sistema de M sitios con un numero N finito de partículas que se distribuyen entre los M sitios, tal que a su vez las partículas pueden tener transiciones entre los sitios. Un ejemplo de un sistema físico con ese comportamiento es un conjunto de átomos bosonicos fríos en una red óptica, de tal manera que los modos actúan como pozos de potencial para los átomos, describiendo la red [1].

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard \hat{H}_{BH} es aquel que describe el sistema expuesto de antaño [1]. La descripción considera N bosones sin espín que interactúan en una red de M sitios.

$$\hat{H}_{BH} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$$

Donde t_{ij} corresponde a un parámetro de transición, los cuales se suelen suponer equivalentes entre cada sitio, tal que $J = t_{ij}$ para todo $\langle i, j \rangle$, donde $\langle i, j \rangle$ son los primeros vecinos. Lo anterior correspondía al término de la energía cinética, en cambio U corresponde al parámetro de interacción entre sitio, más asociada a la energía potencial.

Se pretende construir el hamiltoniano y resolverlo de manera exacta, usando el comando Eigensystem, de tal manera que se pueda obtener el estado base del sistema y analizar observables como las fluctuaciones del número de partículas para cada sitio y la fracción de condensado f_c .

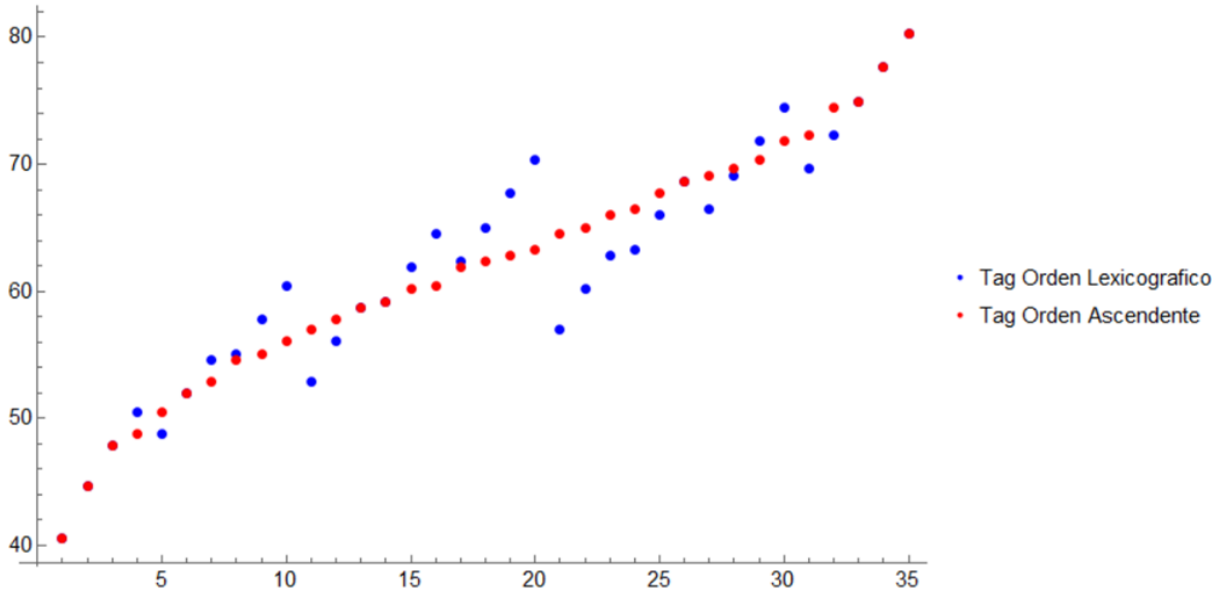


Figura 1: Gráfica que compara los valores del Tag en una lista con orden Lexicográfico y otra con orden Tag Ascendente. Caso $N = 4$ y $M = 4$.

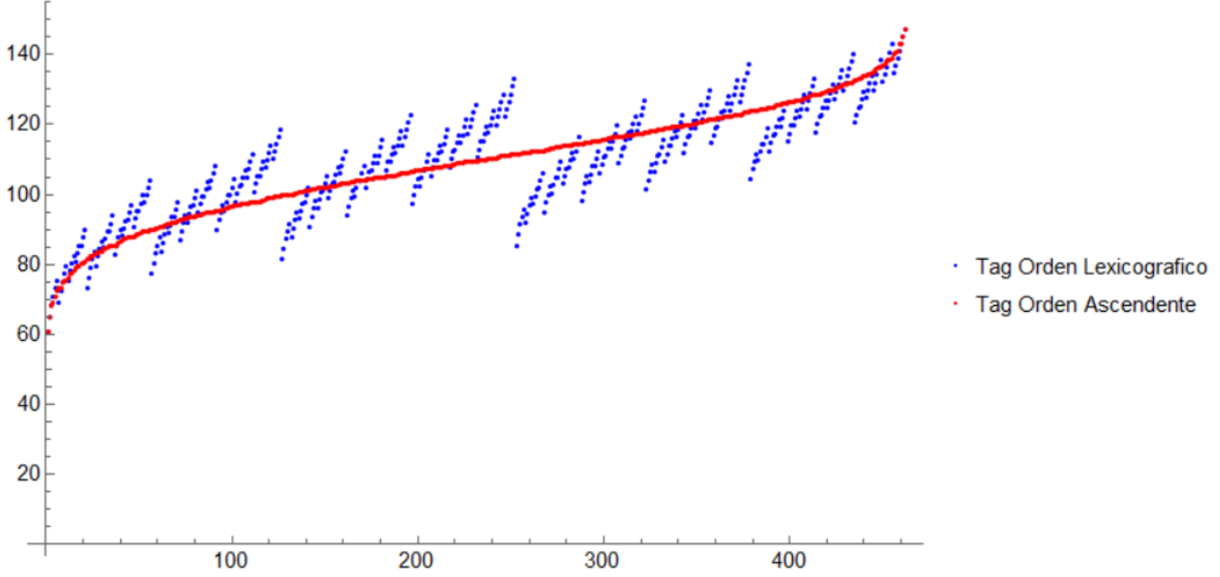


Figura 2: Gráfica que compara los valores del Tag en una lista con orden Lexicográfico y otra con orden Tag Ascendente. Caso $N = 6$ y $M = 6$.

Primero se construye la base de estados. El número total de estados posibles está determinado por las combinaciones posibles del número de partículas por cada sitio, tal que sería $D = \frac{(N+M-1)!}{N!(M-1)!}$ [1]. D corresponde al número total de estados y a la dimensión de la matriz Hamiltoniana, D se incrementa rápidamente exigiendo más poder y memoria de computo.

Para la construcción de la base se ocupa un algoritmo lexicográfico. Considerando un estado inicial para N y M como $\langle n_1, n_2, \dots, n_M \rangle$, se puede calcular el siguiente estado con el siguiente algoritmo [1]:

Se determina el sitio k como el primer sitio $i < M - 1$ distinto de cero de derecha a izquierda. O bien, el sitio n_k tal que $n_{k+j} = 0$ para todo $j > 1$. Ahora se construye el siguiente estado $\langle \tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots, \tilde{n}_m \rangle$ considerando que todos los sitios a la izquierda del k ($i < k - 1$) se quedan igual, i.e., $\tilde{n}_i = n_i$ para todo $j > 1$. Para el sitio k se le resta una partícula, i.e., $\tilde{n}_k = n_k - 1$. El sitio $k + 1$ se queda con el numero faltante de partículas para completar N , i.e., $\tilde{n}_{k+1} = N - \sum_{i=1}^{k+1} \tilde{n}_i$. Y para todos los sitios mayores a $k + 2$ se quedan nulos, i.e., $\tilde{n}_i = 0$ para todo $i > k + 1$.

Usando el algoritmo expuesto, conocido como algoritmo lexicográfico, se puede partir de un estado inicial $\langle N, 0, \dots, 0 \rangle$ se puede iterar $D - 1$ veces y construir toda la base.

Con la base, se construye el hamiltoniano considerando primero que el ultimo termino de \hat{H}_{BH} es tal que

$$\frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) = \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i^2 - \frac{UN}{2}$$

. Siendo el termino $\frac{UN}{2}$ constante, se puede omitir y restar su contribución a la energía del estado base $E_0 = \tilde{E}_0 - \frac{UN}{2}$ [1].

Antes de construir el hamiltoniano, se genera una lista de tags o etiquetas para cada estado base. La etiqueta se genera por el valor $\sum_{i=1}^M \sqrt{100i + 3} n_i$ [1]. El termino irracional busca garantizar que la etiqueta sea irrepetible entre los elementos de la base. Una lista de etiquetas hace más eficiente la identificación de que un estado forme parte de la base, ya que no necesita analizar sitio por sitio. A su vez, la lista de etiquetas puede ser reordenada en orden creciente de acuerdo a su valor, y podemos ordenar la base de acuerdo a ese orden que llamamos Tag Ascendente.

Ahora, para construir los elementos de la diagonal de hamiltoniano se construyen los operadores como

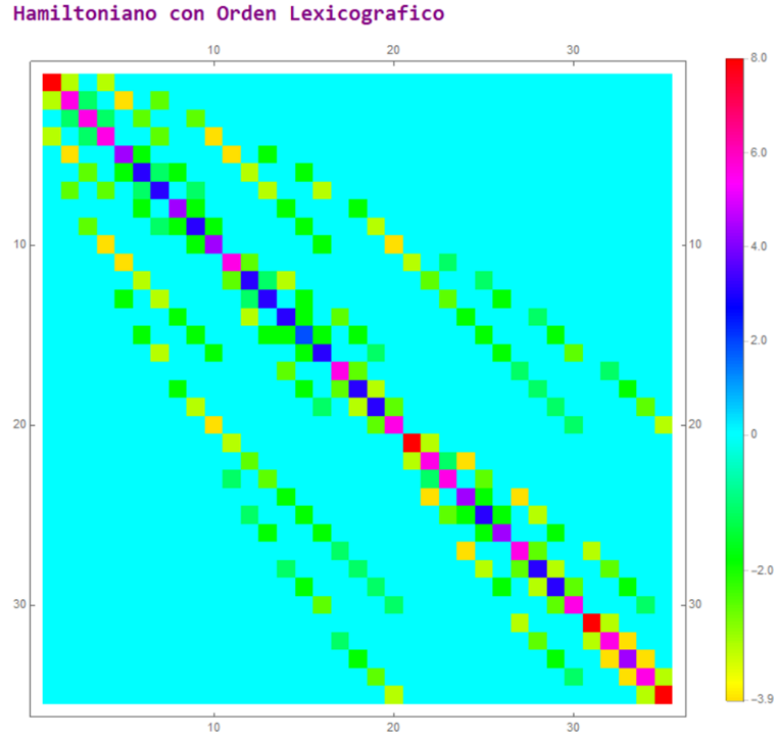


Figura 3: Matriz hamiltoniana construida a partir de la base con orden Lexicográfico. Caso $N = 4$ y $M = 4$.

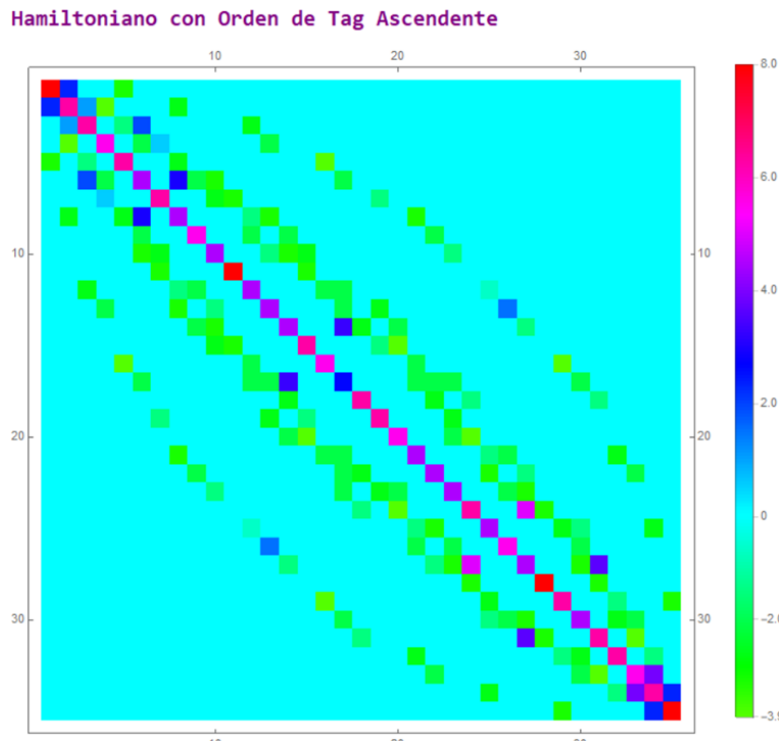


Figura 4: Matriz hamiltoniana construida a partir de la base con orden Tag Ascendente. Caso $N = 4$ y $M = 4$.

vectores que puedan ser sumados a los estados. Por ejemplo, se construye el operador $\langle 1, -1, 0, \dots, 0 |$, se aplica el operador a un estado inicial tal que $\langle n_1 + 1, n_2 - 1, \dots, n_M |$, y se calcula su tag. Entonces, se identifica la posición del estado inicial y el estado operado en la lista de Tags, sus posiciones en la lista indicaran las entradas de la matriz. Finalmente, se calcula el coeficiente asociado al operador y se asigna a la entrada correspondiente.

El elemento diagonal deja los estados iniciales idénticos, por lo que solo se calculan los coeficientes $\frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i^2$ y se asignan.

Con el hamiltoniano construido, se calcula el estado base:

$$\varphi_0 = \begin{pmatrix} \alpha^0 \\ \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \vdots \\ \alpha^D \end{pmatrix}$$

El operador de fluctuaciones para el sitio j se define como $\Delta n^2 = \langle \varphi_0 | \hat{n}^2 | \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0 | \hat{n} | \varphi_0 \rangle^2 = \sum_{i=1}^D n_{i,j}^2 \alpha_i^2 - (\sum_{i=1}^D n_{i,j} \alpha_i^2)^2$. Ambos operadores \hat{n}_j y \hat{n}_j^2 no modifican los estados sobre los que operan, por lo que se pueden calcular sus coeficientes de forma inmediata.

Posteriormente se calcula la matriz de densidad reducida definida como $\rho_{i,j} = \langle \varphi_0 | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j | \varphi_0 \rangle$. Los operadores que construyen esta matriz si modifican el estado inicial por lo que se tiene que se tienen que construir

Fluctuaciones $\Delta(n_i)^2$

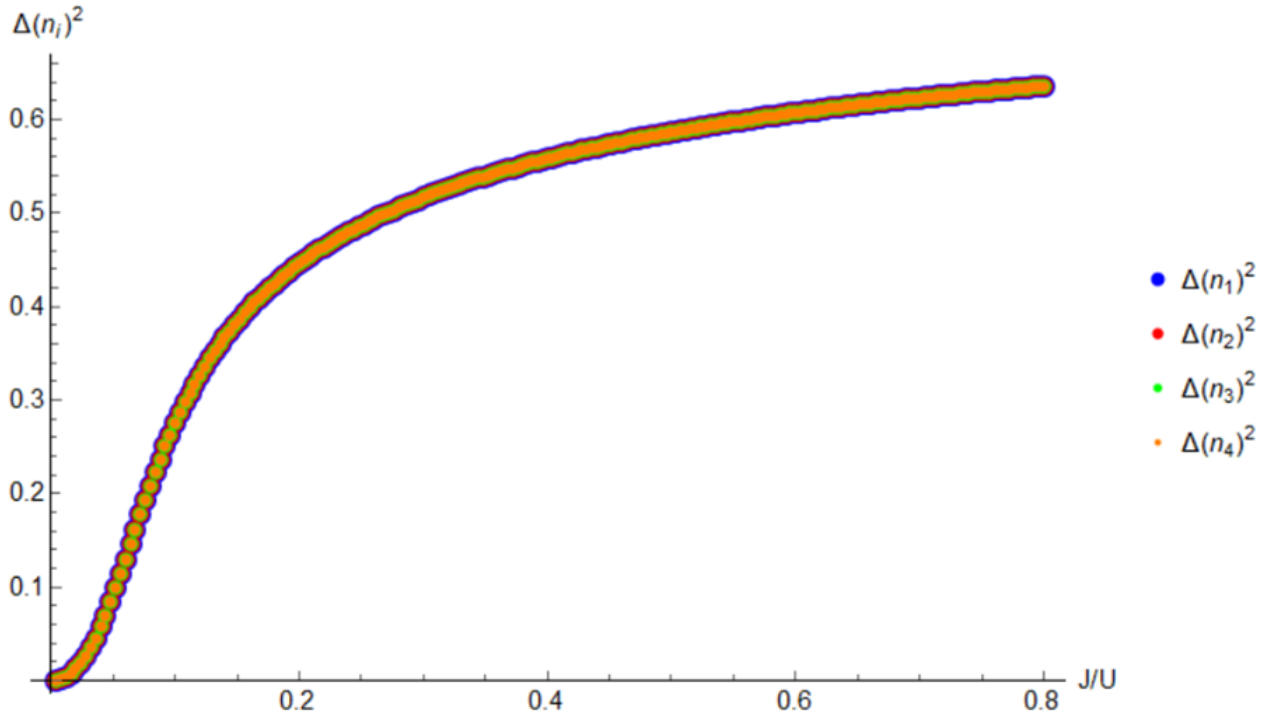


Figura 5: Fluctuaciones de partículas por sitios. Las fluctuaciones son equivalentes entre sitios. Caso $N = 4$ y $M = 4$.

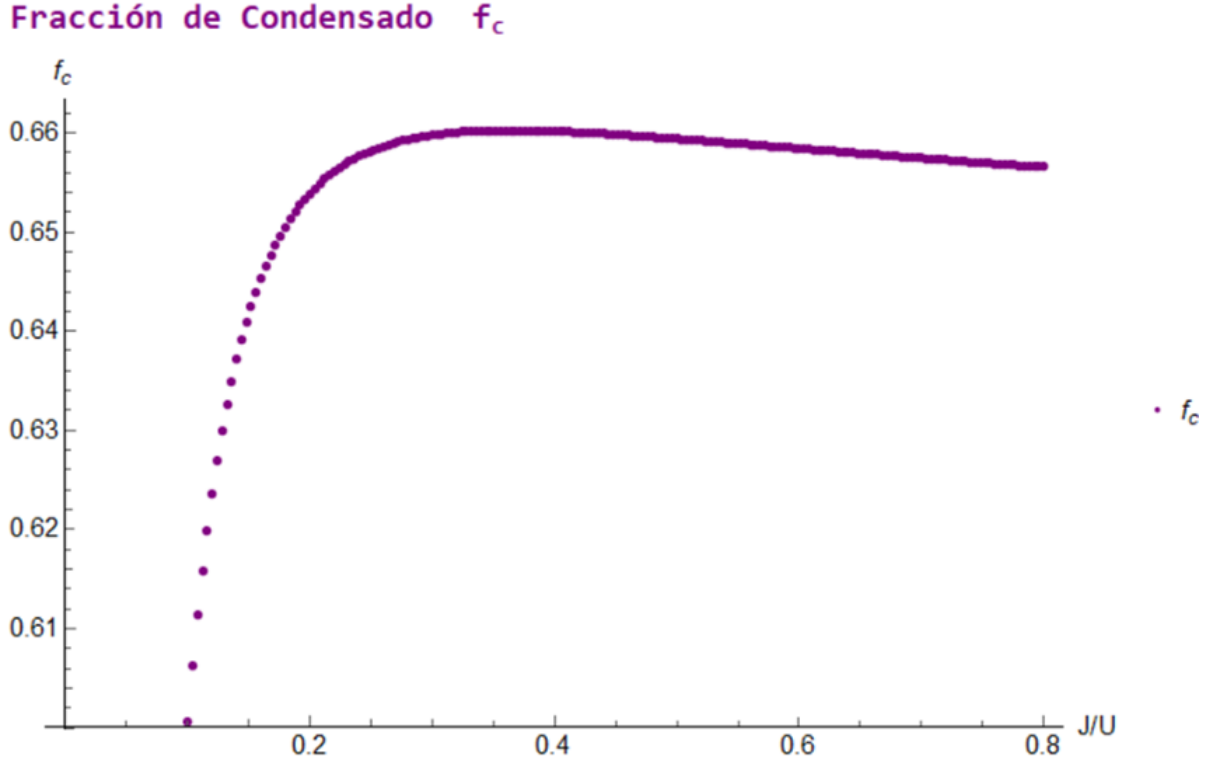


Figura 6: Fracción de condensado. Permite identificar las transiciones de fase respecto a J/U Caso $N = 4$ y $M = 4$.

los operadores de la misma manera que los elementos no diagonales de la matriz hamiltoniana. Se construyen los vectores operadores, se aplica sobre un estado inicial, se identifica la posición del estado inicial y el estado operado en los tags, se calcula el coeficiente y se asigna. Sólo habría que considerar que adicional a los coeficientes obtenidos por el operador, se tienen los coeficientes del estado base.

Para sus términos diagonales se reduce al operador de número, tal que serían $\rho_{j,j} = \sum_{i=1}^{N-1} n_{i,j} \alpha_i^2$. Para los términos no diagonales, se tiene que $\rho_{i,j} = \sum_{h=1}^D \alpha_h^* \alpha_h \text{Sqrt}[n_{i,h} + 1] \text{Sqrt}[n_{j,h}]$, donde h es el índice correspondiente al estado operado en la lista de tags.

De la matriz de densidad reducida, se puede determinar su eigenvalor más alto λ_{Max} con el cual se puede determinar la fracción de condensado $f_c \approx \lambda_{Max}/N$.

La f_c no permite determinar regiones de transición de fase. Iterando todo el código, desde el hamiltoniano construido, para distintos valores de J/U es posible determinar graficas como las de las figuras 5 y 10. El comportamiento indica que, en las regiones más cercanas al eje vertical, el sistema se comporta como un aislante de Mott, en cambio, conforme J/U crece, el comportamiento del sistema corresponde al de un superfluido. Esto es consistente a que entre mayor sea el parámetro de transición J de partículas entre los primeros vecinos, van a aumentar las fluctuaciones del número de partículas por cada sitio (como se observa en las figuras 4 y 9), y por ende, el sistema tiene acceso a una fase de superfluido.

Referencias

- [1] J. M. Zhang and R. X. Dong. Exact diagonalization: the bose–hubbard model as an example. *European Journal of Physics*, 31(3):591–602, 2010.

Hamiltoniano con Orden Lexicografico

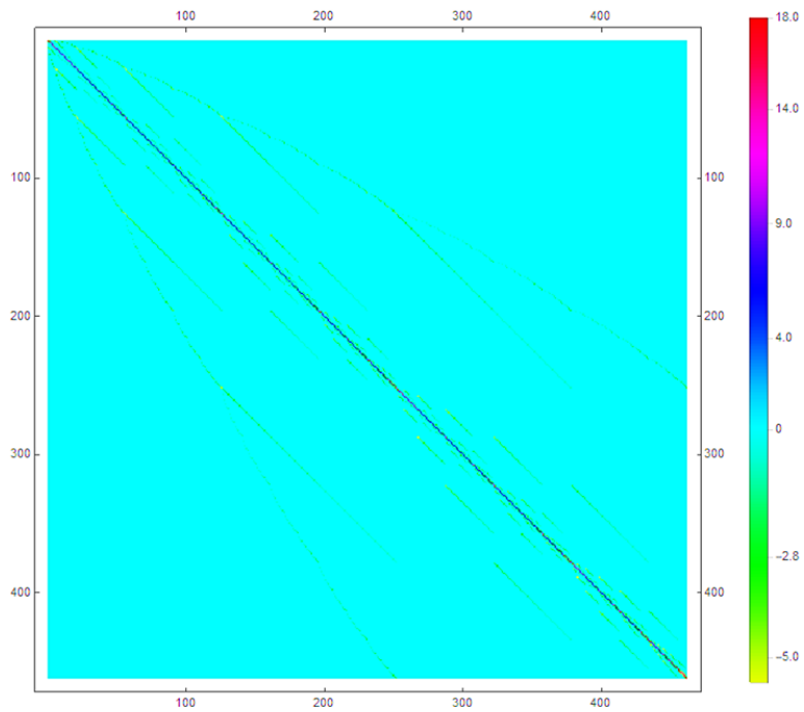


Figura 7: Matriz hamiltoniana construida a partir de la base con orden Lexicográfico. Caso $N = 6$ y $M = 6$.

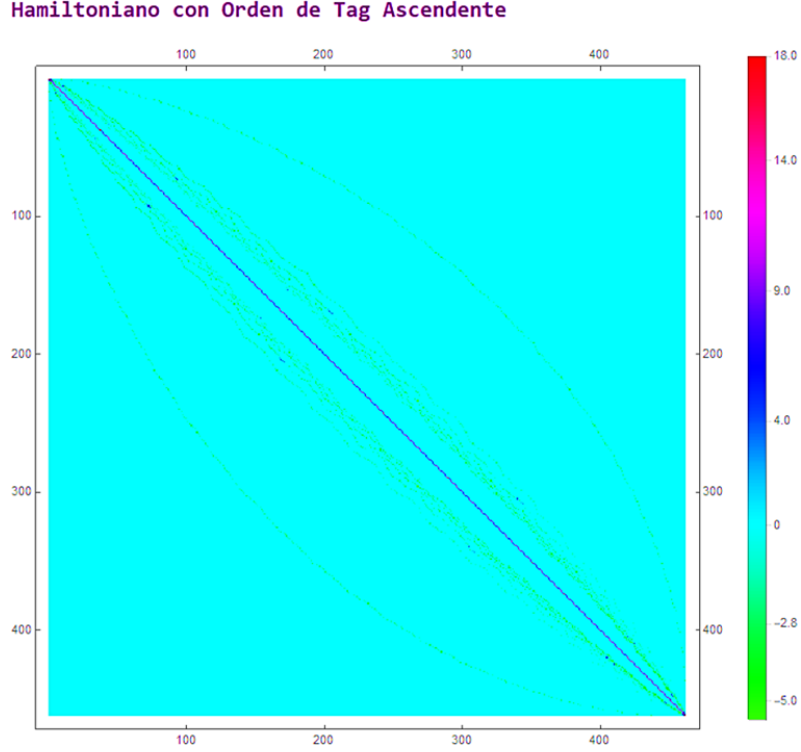


Figura 8: Matriz hamiltoniana construida a partir de la base con orden Tag Ascendente. Caso $N = 6$ y $M = 6$.

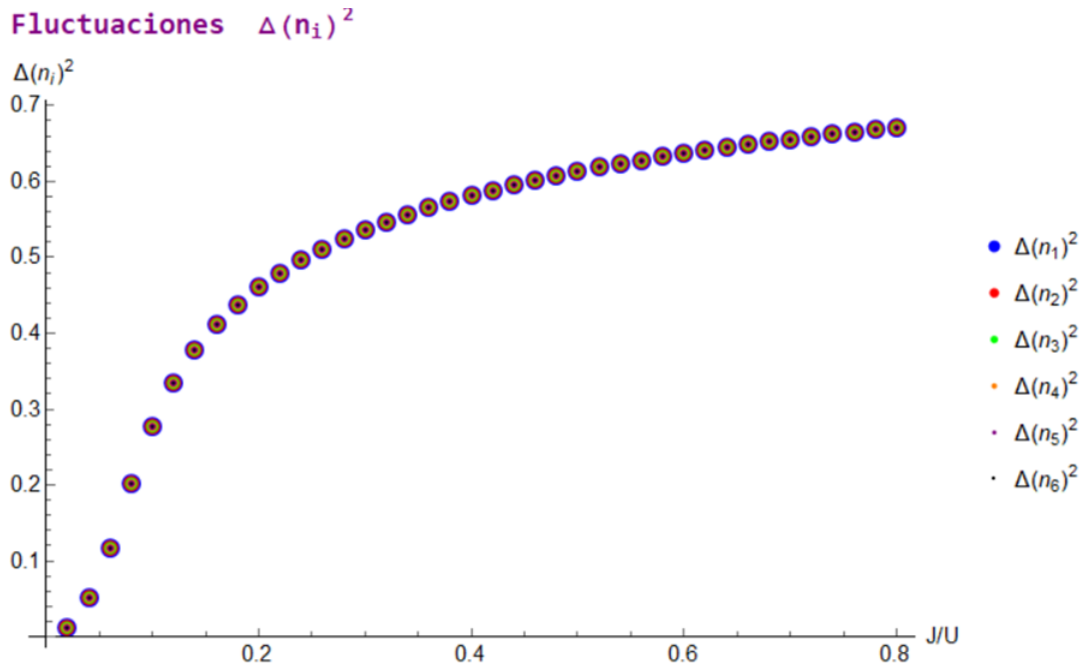


Figura 9: Fluctuaciones de partículas por sitios. Las fluctuaciones son equivalentes entre sitios. Caso $N = 6$ y $M = 6$.

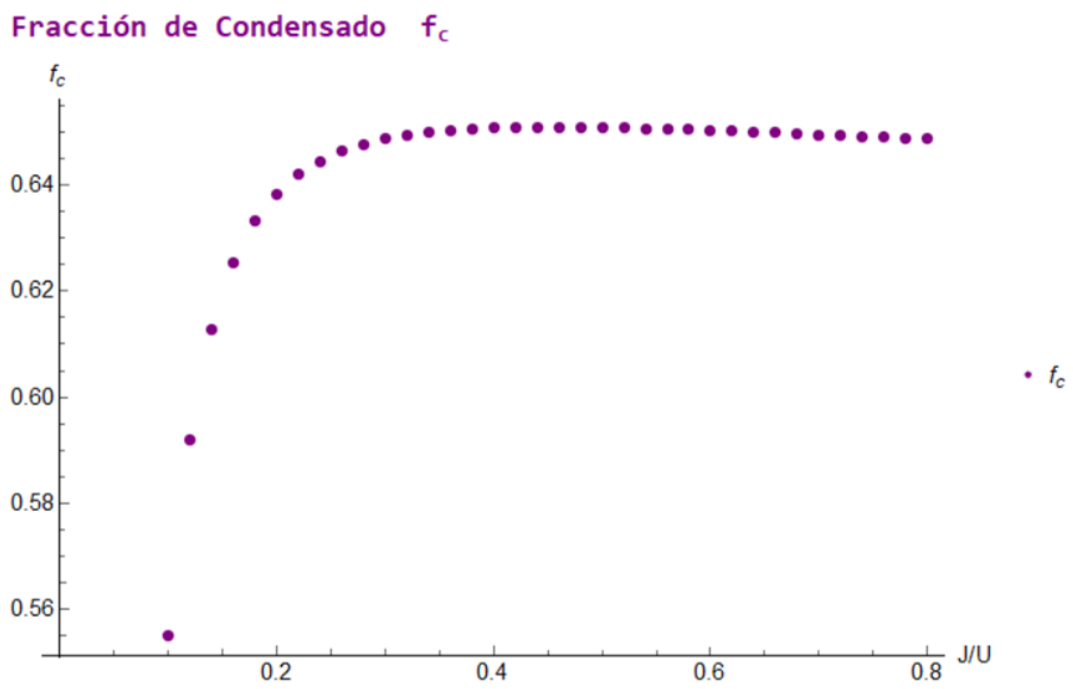


Figura 10: Fracción de condensado. Permite identificar las transiciones de fase respecto a J/U Caso $N = 6$ y $M = 6$.