Computerphysik

SoSe 2016

Problem Set 3 – Deadline: May 12, 2016 – 16:15 – seminar room 267

Problem 1: Domb-Sykes method for extrapolating series

A solid undergoes a Mott metal-insulator transition at a critical coupling U_c. The ground-state energy is believed to have a singular behavior

$$E_{\text{singular}}(U) = (E_c + F)\frac{U_c}{U} + F \cdot \left[\left(1 - \frac{U_c}{U}\right)^{\tau} - 1\right]$$

in the Mott phase ($U > U_c$), where the critical ground-state energy $E_c = E_{\text{singular}}(U_c)$, the non-integer critical exponent $\tau > 0$, and the prefactor F are unknown. A strong-coupling perturbation calculation can be carried out up to the 8–th order in $1/U$

$$E_{\text{PT}}(U) = \sum_{n=1}^{8} \frac{a_n}{U^n}$$

where the coefficients a_n are:

n	a_n
1	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$
2	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$
3	-1.5411
4	-4.30479

n	a_n
5	-13.6579
6	-46.8554
7	-169.493
8	-637.078

Our goal is to determine $E_{\text{singular}}(U)$ (more precisely its unknown parameters U_c, E_c, τ, and F) from the known coefficients a_n.

1. Show that the Taylor expansion of $E_{\text{singular}}(U)$ in power of $1/U$ implies that

$$a_1 = U_c(E_c + F(1-\tau)) \quad \text{and} \quad Q_n = \frac{a_n}{a_{n-1}} = U_c\left(1 - \frac{\tau+1}{n}\right) \quad \text{for } n \geq 2.$$

2. Fit the quotients Q_n to a quadratic polynomial in $1/n$ to determine U_c and τ.
3. Extrapolate the coefficients a_n up to $n_{\max} \gg 8$ and determine E_c and F using the extrapolated perturbation expansion

$$E_{\text{extrapolation}}(U) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{a_n}{U^n}.$$

4. Plot $E_{\mathrm{PT}}(U)$, $E_{\mathrm{singular}}(U)$, and $E_{\mathrm{extrapolation}}(U)$ in the same figure. Examine their behavior close to the critical coupling U_c.

Problem 2: Nichtlineare Ausgleichsrechnung

Die optische Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ eines Materials wurde als Funktion der Anregungsenergie (Photonenfrequenz ω) gemessen. Die Daten befinden sich in der Datei *spectrum.dat*. Wir nehmen an, dass das Spektrum aus zwei Anregungen besteht, die zuerst (z.B. durch Phononen oder wegen endlicher Messauflösung) je zu einer Gauß-Verteilung verbreitet werden und außerdem (z.B. durch Unordnung im Material oder wegen Rauschens) verschmiert werden. Bestimmen Sie die Anregungsenergie, Breite und Intensität der beiden Anregungen mit einer Ausgleichsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadrate.