

Tarea 7

Métodos de Simulación Computacional para Sistemas Cuánticos - 2022-2

José Alfredo de León

25 de abril de 2022

1. Objetivos

1.1. Objetivo general

Construir el diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard numéricamente utilizando un algoritmo auto-consistente y analíticamente utilizando teoría de perturbaciones.

1.2. Objetivos específicos

1. Utilizar la aproximación de desacoplamiento en el modelo de Bose-Hubbard.
2. Implementar el algoritmo auto-consistente para encontrar numéricamente el diagrama de fases del modelo de Bose-Hubbard.
3. Reproducir el mismo diagrama de fase con el algoritmo auto-consistente y con la expresión analítica obtenida con teoría de perturbaciones.
4. Determinar el comportamiento de la fluctuación de partículas en el estado fundamental del modelo de Bose-Hubbard.
5. Revisar el comportamiento de convergencia del algoritmo auto-consistente.

2. Marco teórico

En la aproximación de desacoplamiento $(b_i^\dagger - \langle b_i^\dagger \rangle)(b_j - \langle b_j \rangle) \approx 0$ podemos escribir al Hamiltoniano efectivo por sitio del modelo de Bose-Hubbard, suponiendo que el sistema es homogéneo y con invarianza traslacional, como

$$H = -\sigma\psi(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) + \sigma\psi^2 + \frac{1}{2}U\hat{n}(\hat{n} - \mathbb{1}) - \mu\hat{n}, \quad (1)$$

donde hemos denotado $\sigma = zt$, con z el número de vecinos próximos y t el parámetro de *hopping*. Se utiliza esta notación para ser consistentes con las variables utilizadas en la implementación. Además, ψ es el parámetro de orden de la fase superfluida, U el parámetro de interacción y μ el potencial químico. Los operadores de creación \hat{b}^\dagger , aniquilación \hat{b} y el operador de número \hat{n} se escriben en su representación

matricial como

$$b = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \sqrt{N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad b^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \sqrt{N} & 0 \end{pmatrix} \quad n = \begin{pmatrix} \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{N} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

donde N es la dimensión de cada sitio en la red unidimensional.

De forma usual, la fluctuación de partículas por sitio se escribe

$$(\Delta n)^2 = \langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2. \quad (3)$$

La ventaja numérica que supone el Hamiltoniano del modelo de Bose-Hubbard en la aproximación de desacoplamiento es que su representación matricial es tridiagonal, lo cuál hace viable resolver el problema de construir numéricamente el diagrama de fase para determinar la fase superfluida ($\psi \neq 0$) y la fase de aislante de Mott ($\psi = 0$), así como la región de transición entre fases.

Por otro lado, utilizando teoría de perturbaciones independiente del tiempo no degenerada uno puede encontrar, a segundo orden, la energía del estado base y así encontrar la condición para que ocurra una transición de fase cuántica, siendo esta condición la siguiente:

$$y = \frac{-\tilde{g}^2 + 2x\tilde{g} + \tilde{g} - x^2 - x}{1 - x}, \quad (4)$$

con $y = \sigma/U$ y $x = \mu/U$.

Además, de esta expresión podemos inferir una expresión para el potencial químico:

$$\frac{\mu}{\sigma} = \frac{1}{2} \frac{U}{\sigma} (2g - 1) - 1 \pm \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{U}{\sigma}\right)^2 - 2\frac{U}{\sigma}(2g + 1) + 1}. \quad (5)$$

3. Qué se hizo

En este trabajo se realizó el diagrama de fase típico del modelo de Bose-Hubbard donde se observan las fases cuánticas de aislante de Mott y superfluida. Por un lado, se implementó un algoritmo autoconsistente para encontrar el parámetro de orden superfluido ψ^2 y, por otro lado, se utilizaron las expresiones analíticas de la teoría de perturbaciones (ecuaciones 4 y 5). Dada las diferentes formas de presentar el diagrama de fase en materia condensada y en física atómica se realizaron los diagramas de fase escalando al potencial químico con la energía de interacción U y la interacción entre sitios zt , respectivamente. Adicionalmente, se calculó numéricamente la fluctuación de partículas del estado fundamental. También se llevó cuenta de la cantidad de pasos que le toma al algoritmo autoconsistente en converger considerando una tolerancia de error de 10^{-6} .

4. Implementación

A continuación, describimos el algoritmo auto-consistente.

Entrada: valores de μ , U y σ (zt). **Salida:** parámetro de superfluido ψ , estado base $|\psi_G\rangle$ y número de pasos antes de el algoritmo converja. **Necesita:** rutinas `H[]` y `GroundState[]`, que implementan, respectivamente, al Hamiltoniano de la ecuación (1) y el eigensolver para encontrar la eigenenergía y el eigenvector del estado fundamental.

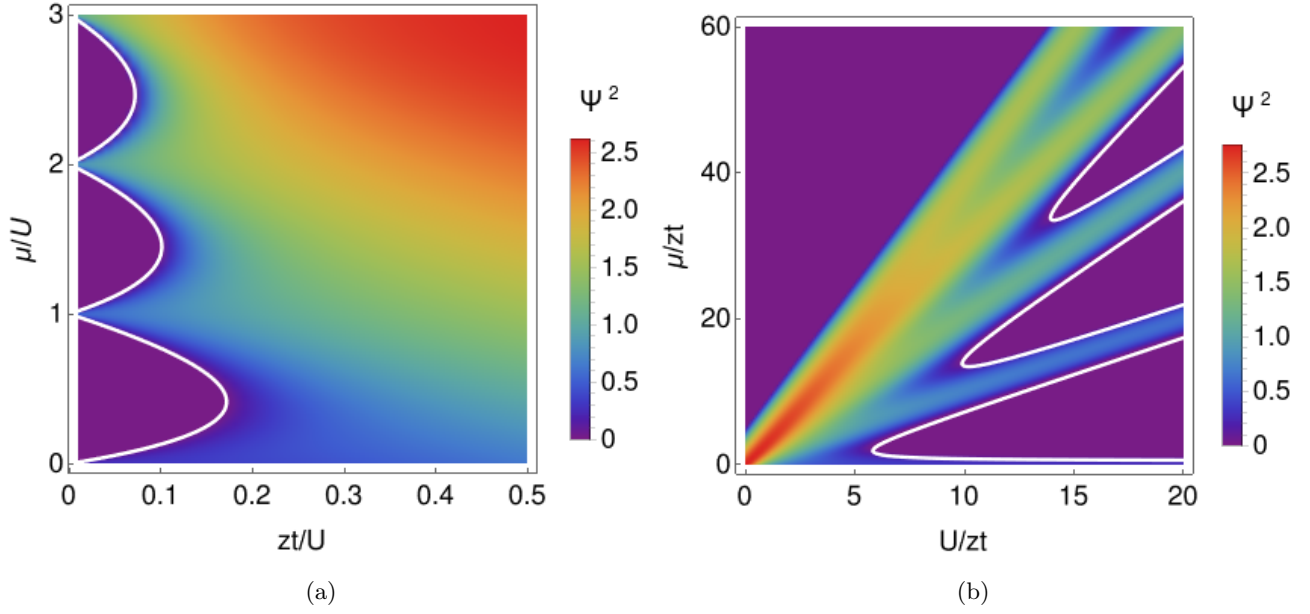


Figura 1: Diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard. (a) Presentación de materia condensada. (b) Presentación de Física Atómica.

1. Establecer $\psi = \psi_0 = 0.1$
2. Evaluar $H(\psi_0)$
3. Obtener el estado base de $H(\psi_0)$
4. Calcular el valor esperado del operador de aniquilación y asignar el nuevo valor $\psi = \langle \psi_g | \hat{b} | \psi_g \rangle$
5. Calcular error = $|\psi - \psi_0|$
6. Establecer $\psi_0 = \psi$ y repetir desde el paso 2 hasta que **ya no** se satisfaga la condición error $> 10^{-6}$.

5. Resultados y discusión

5.1. Resultados

En las gráficas de las Figs. 1, 2 y 3 se muestran, respectivamente, el diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard, fluctuaciones de partículas en el estado fundamental y número de pasos que le tomó para converger al algoritmo auto-consistente para calcular el parámetro de orden superfluido ψ^2 .

5.2. Discusión y conclusiones

Se consiguió exitosamente reproducir el diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard expuesto en la Fig. 4 de [1]. Según la presentación que preferimos, vemos en la Fig. 1 que hay diferentes regiones que representan la fase de aislante de Mott, mostrando 3 regiones en nuestros resultados, mientras la fase superflúa “envuelve” a las regiones de aislante de Mott. Estas regiones de aislante de Mott se pueden distinguir de mejor manera si observamos las curvas blancas que las delimitan, calculadas con teoría de perturbaciones.

Respecto a la fluctuación de partículas por sitio, vemos en la Fig. 2 que dentro de las regiones de aislante de Mott no existe fluctuación de partículas; esta sólo ocurre en la fase superflúa, aumentando conforme aumenta el potencial químico y disminuye la energía de interacción.

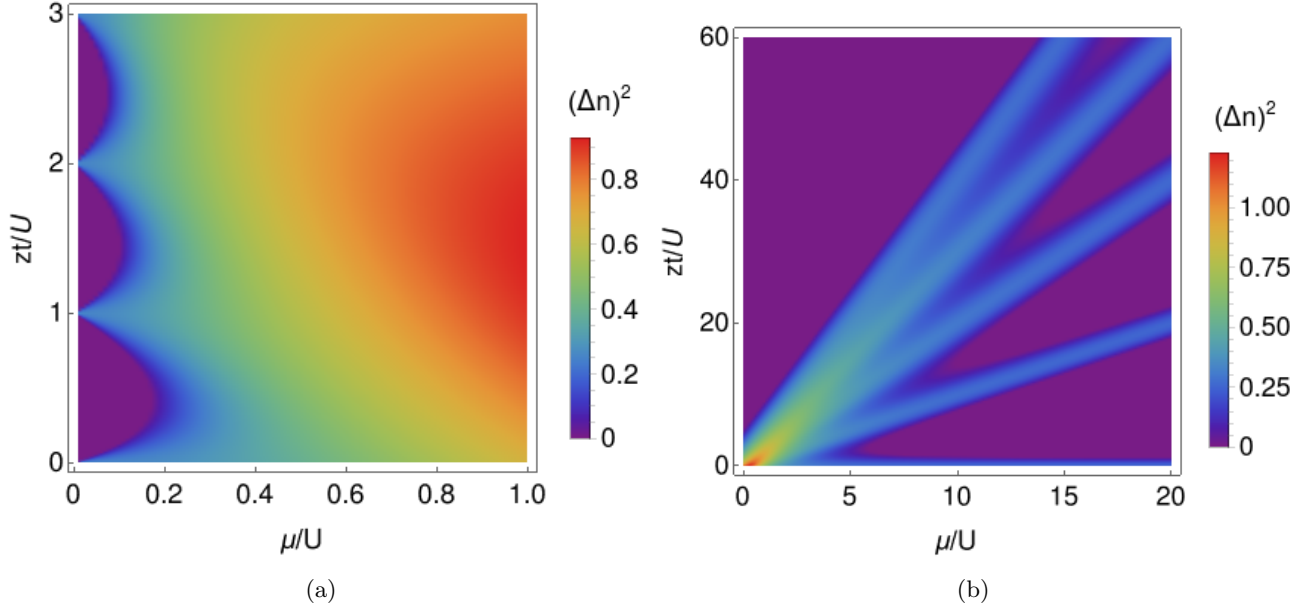


Figura 2: Fluctuación de partículas del modelo de Bose-Hubbard en el estado fundamental. (a) Presentación de materia condensada. (b) Presentación de Física Atómica.

Por último vamos a comentar sobre el comportamiento del algoritmo auto-consistente para calcular el parámetro de orden superfluido. En la Fig. 3 nuestras gráficas muestran que la cantidad de pasos para converger es mucho mayor a cero únicamente en la región de transición entre las dos fases cuánticas del modelo de Bose-Hubbard. Fuera de la “frontera” de transición entre fases el algoritmo converge con una cantidad de pasos cercana a cero.

Referencias

- [1] Santiago F Caballero-Benítez. Materia cuántica en cavidades de alta reflectancia (many-body cqed). *arXiv preprint arXiv:2201.06641*, 2022.

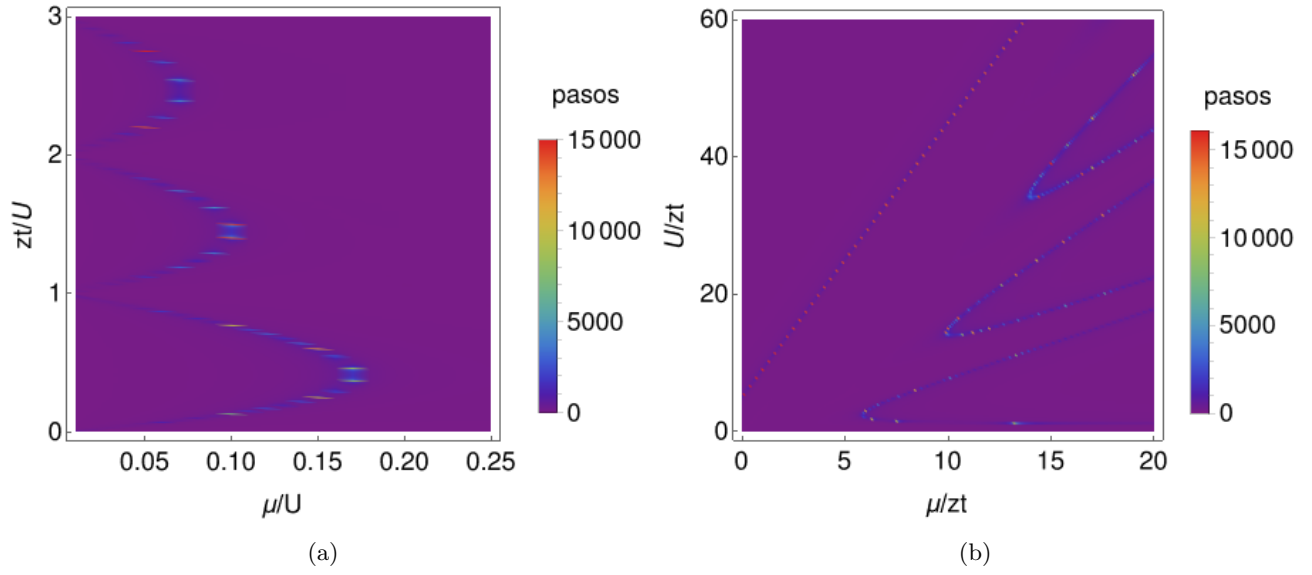


Figura 3: Cantidad de pasos que le tomó al algoritmo auto-consistente converger en función de los mismos parámetros que se hicieron variar en el Hamiltoniano para construir el diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard.