

(Ihre Lösung ist bis zum 31. Januar 2012 einzureichen und nach vorheriger Terminabsprache zu besprechen.)

Quanten-Monte-Carlo Simulation eines eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells

Im Verzeichnis `/home/comphys/07.QMC/` finden Sie die Datei `bosehubbard.cpp`, die ein eindimensionales Bose-Hubbard-Modell mit periodischen Randbedingungen im Grundzustand simuliert.

In der Präsenzübung wird die Implementierung des Algorithmus in der Datei `bosehubbard.cpp` erläutert. Die wichtigsten Klassen sind:

- `checkerboard`: Verwaltung der checkerboard decomposition, Ausführen von QMC-Updates, Ausgabe der aktuellen Konfiguration
- `correlationtime`: Betrachten der Korrelationen zwischen den einzelnen Samples
- `currentcorrelation`: Ausgabe der Pseudo-Strom-Strom-Korrelationsfunktion zur Detektion von Superfluidem und Mott-Isolator Zustand
- `matricelements`: Berechnung der Gewichte der Plaquetten
- `matricelements2`: Berechnung von Beiträgen der kinetischen Energie der einzelnen Plaquetten

Der Hamiltonoperator unseres betrachteten Systems lautet:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j) - \mu \sum_i n_i + V_0 \sum_i n_i(n_i - 1) \quad (1)$$

Die erste Summe läuft dabei nur über nächste Nachbargitterplätze. Wir betrachten im folgenden Systeme mit der inversen Temperatur $\beta = 2$, dem Hoppingparameter $t = 1$ und dem Onsitepotential $V_0 = 20$. Änderungen der Parameter werden explizit angegeben. Die Diskretisierung der Imaginärzeit wählen wir als $\delta\tau = 0.0625$, es werden 16 Gitterplätze betrachtet.

1. [1 Punkt] Korrelationszeit

Lassen Sie sich die Autokorrelationsfunktion für obiges System mit 16 Bosonen ausgeben. Bestimmen Sie die Korrelationszeit zwischen unabhängigen Samples.

2. [2,5 Punkte] kinetische Energie pro Gitterplatz

Wir definieren eine Bosonendichte ρ als Quotient aus Bosonenzahl N_b und der Zahl der Gitterplätze N .

- (a) Die Klasse `kinetic` berechnet die mittlere kinetische Energie eines Samples. Benutzen Sie die Klasse `kinetic` um die mittlere kinetische Energie pro Gitterplatz E_K für Bosonendichten ρ zwischen 0 und 3,2 zu berechnen und plotten Sie $-E_K$ in Abhängigkeit von ρ .

Hinweis: Mitteln Sie über eine hinreichend große Anzahl von Monte Carlo Samples.

- (b) An welchen Stellen finden Sie Minima? Liegt an den Minima ein superfluider oder ein Mott-Isolator Zustand vor? Wie sieht es an Stellen dazwischen aus?

3. [3 Punkte] chemisches Potential

Für $\beta = 2$ können thermische Anregungen vernachlässigt werden und es ist ausreichend das System im Grundzustand zu betrachten. Das chemische Potential μ ergibt sich aus der Ableitung der Grundzustandsenergie nach der Bosonenzahl. Hier erhalten wir also für das chemische Potential $\mu = E_{N_b+1} - E_{N_b}$, wobei E_{N_b} die Grundzustandsenergie eines Systems mit N_b Bosonen ist.

- (a) Plotten Sie die Grundzustandsenergie E_{N_b} des Systems in Abhängigkeit von der Bosonendichte ρ . Was fällt bei dem Plot auf?
- (b) Berechnen Sie nun das chemische Potential μ und plotten Sie dieses dann wieder in Abhängigkeit von der Bosonenzahldichte ρ . Wie äußert sich das Verhalten aus Teil a) in diesem Plot?

4. [3,5 Punkte] **Phasendiagramm**

In dieser Aufgabe sollen Sie nun das Phasendiagramm für den Phasenübergang vom Mott-Isolator zum superfluiden Zustand bestimmen. Im Phasendiagramm plotten Sie das chemische Potential μ , welches mit dem Onsitepotential V_0 normiert wird, gegen den Hopping-Parameter t , welcher ebenfalls mit V_0 normiert wird. Überlegen Sie sich selbst, wie Sie mit den Ergebnissen aus den vorangegangenen Aufgaben das Phasendiagramm erstellen können. Ihr Ergebnis sollte Abbildung 1 entsprechen.

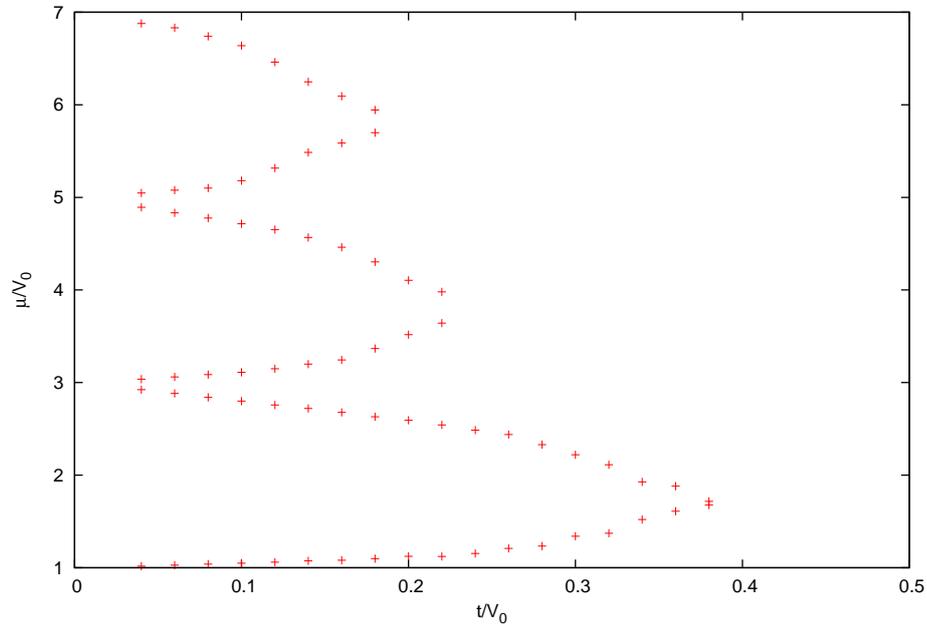


Abbildung 1: Phasendiagramm Mott-Isolator - Superfluider Zustand

Infos und aktuelle Übungsblätter finden Sie unter: <http://www.uni-saarland.de/fak7/rieger/homepage/teaching.html>