

Bachelorarbeit

Stabilität und Dynamik von Doublons im Hubbard-Modell

Lukas Oesinghaus

KIEL, JULI 2013

Institut für
Theoretische Physik und Astrophysik
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
2	Theorie	7
2.1	Vielteilchenquantenmechanik	7
2.2	Zweite Quantisierung	9
2.3	Full CI	10
2.4	Das Hubbard-Modell	12
2.4.1	Die Lösung für $U = 0$	15
2.4.2	Effektiver Doublon-Hamiltonian	16
3	Ergebnisse	19
3.1	Doublon	19
3.1.1	Zerfallsdynamik	23
3.1.2	Ausbreitungsdynamik	30
3.2	Zwei Fermionen in einer harmonischen Falle	38
3.2.1	Zerfallsdynamik	43
3.2.2	Ausbreitungsdynamik	46
4	Zusammenfassung und Ausblick	51
4.1	Zusammenfassung	51
4.2	Ausblick	52
5	Literaturverzeichnis	I

1 Einführung

Das Hubbard-Modell wurde 1963 von John Hubbard zur Beschreibung von Festkörpern eingeführt [1]. Es geht von einem Festkörper aus, bei dem die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen auf verschiedenen Gitterplätzen vernachlässigbar gegen die Coulomb-Wechselwirkung auf demselben Gitterplatz ist, ohne dass letztere dabei gegen den Energiebeitrag der kinetischen Energie vernachlässigbar ist, wie es zum Beispiel beim Tight-Binding Ansatz angenommen wird [2]. Man geht davon aus, dass diese Annahme für Übergangsmetalle oder Metalle der Seltenen Erden sinnvoll ist [2]. Auf Grund der starken Vereinfachungen, auf denen das Hubbard-Modell beruht, kann man auch bei den durch es am besten beschriebenen Festkörpern keine quantitative Übereinstimmung erwarten. Bei der Beschreibung von Festkörpern ist das Hubbard-Modell also bestenfalls in der Lage, gewisse Eigenschaften der elektronischen Struktur qualitativ richtig zu beschreiben [2]. In den letzten Jahren wurde dem Hubbard-Modell aus verschiedenen Gründen wissenschaftliches Interesse gewidmet. Es wird zum Beispiel vermutet, dass Hochtemperatursupraleiter teilweise mit Hilfe eines modifizierten 2D-Hubbard-Modells beschrieben werden können [3]. Für diese Arbeit ist insbesondere die Relevanz des Hubbard-Modells zur Beschreibung von ultrakalten Atomen in optischen Gittern wichtig. Optische Gitter nutzen den Stark-Effekt, also die Verschiebung von Energieniveaus im elektrischen Feld, um neutrale Atome mit bosonischer oder fermionischer Statistik einzuschließen. Dafür lässt man Laserstrahlen passend interferieren und erzeugt so stehende Wellen, die für die Atome ein periodisches Potential darstellen. Da diese Potentiale sehr klein sind, müssen die Atome in den Mikrokkelvin-Bereich gekühlt werden, was 1993 von Hemmerich und Hänsch das erste Mal durchgeführt wurde [4]. Wie von Jaksch *et al.* zuerst festgestellt wurde, sind optische Gitter eine sehr gute experimentelle Realisierung des Hubbard-Hamiltonians [5]. Sie stellen damit eine experimentelle Simulation eines Festkörpers dar. Im Gegensatz zu realen Festkörpern sind sie jedoch frei von Defekten und Parameter wie Gitterabstände oder Wechselwirkungen sind frei einstellbar und können auch während eines Experiments verändert werden. Sie bieten somit die Möglichkeit, Quanteneffekte

in einer sehr reinen, experimentell genau kontrollierbaren Umgebung (siehe z.B. Peil *et al.*[6]) zu studieren und dieses Verständnis anschließend auf reale Festkörper zu übertragen. Das Hubbard-Modell dient in diesem Kontext zur theoretischen Beschreibung der experimentellen Simulation von Festkörpern. Eine weitere denkbare Anwendung von optischen Gittern wäre zum Beispiel der Einsatz als Quantenregister (siehe z.B. Rabl *et al.* [7]).

In dieser Arbeit wird die Ausbreitungs- und Zerfalldynamik eines Doublons, das heißt zweier anfänglich auf einer Site lokalisierten Fermionen, und die Ausbreitungsdynamik zweier Fermionen in einer harmonischen Falle studiert. Den Anstoß für ein Studium der Ausbreitungsdynamik gab das Paper *Expansion Dynamics of Interacting Bosons in Homogeneous Lattices in One and Two Dimensions* von Ronzheimer *et al.* [8], in dem bosonische Atome zuerst unabhängig von ihrer Wechselwirkung in der Mitte eines ein-dimensionalen optischen Gitters ohne Doppelbesetzung präpariert wurden und die Abhängigkeit der Ausbreitung dieser Anordnung von der Wechselwirkung studiert wurde. Es wurde ein Minimum der Ausbreitungsgeschwindigkeit bei einer endlichen Wechselwirkung gefunden. Anschließend wurde auch der Einfluss doppelbesetzter Sites im Anfangszustand untersucht. Weitere Beispiele für experimentelle Studien der Ausbreitungs- und Zerfalldynamik in optischen Gittern sind das Paper von Schneider *et al.* [9] zur Ausbreitungsdynamik von Fermionen in einem zweidimensionalen optischen Gitter, das Paper von Rosch *et al.* [10] zur Frage, ob Doublons ein metastabiles Suprafluid bilden können, oder das Paper von Strohmaier *et al.* [11] zu elastischem Doublonzerfall in einem dreidimensionalen optischen Gitter. Einige Ergebnisse des ersten Abschnitts überschneiden sich mit denen aus dem Paper *Doublon dynamics in the extended Fermi-Hubbard model* von Hoffman *et al.* [12], das mit Hilfe der Methode der time-dependent density matrix renormalization group (t-DMRG) den Zerfall eines Doublons in einem 1D-Gitter mit und ohne Nächste-Nachbar-Wechselwirkung in Abhängigkeit der Stärke der Wechselwirkung untersucht und störungstheoretisch zu erklären versucht. Insbesondere am Anfang des ersten Abschnitts der Ergebnisse wird dieses Paper zum Vergleich herangezogen.

2 Theorie

In diesem Abschnitt wird eine kurze Einführung in die für diese Arbeit nötige Theorie gegeben. Zuerst wird auf Basis der als bekannt vorausgesetzten Einteilchenquantenmechanik die Vielteilchenquantenmechanik und der Formalismus der zweiten Quantisierung vorgestellt, der das Arbeiten mit den in der Vielteilchenquantenmechanik eingeführten Konzepten erleichtert. Anschließend wird mit Full CI das in dieser Arbeit genutzte exakte numerische Lösungsverfahren eingeführt. Zum Abschluss der Theorie wird das Hubbard-Modell hergeleitet. Seine Lösungen für sehr kleine und sehr große Wechselwirkungen werden diskutiert. Letzteres führt uns auf den Begriff des Doublons.

2.1 Vielteilchenquantenmechanik

Bei dieser Darstellung orientiere ich mich an [13]. Soweit nicht anders spezifiziert, werden atomaren Einheiten benutzt, d.h. $e = m_e = \hbar = 1$.

Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustandes $|\Psi(t)\rangle$ ist durch die Schrödingergleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\Psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

gegeben. In Ortsdarstellung lautet sie für N gleichartige Teilchen der Masse m

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left(\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{x}_i, t) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right) \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (2.2)$$

Dabei ist $\mathbf{x}_i = (\mathbf{r}_i, s_i)$, wobei \mathbf{r}_i der Ort und s_i der Spin des i -ten Teilchens sind. Der erste Term beschreibt die kinetische Energie, U beschreibt die Wechselwirkung der Teilchen untereinander und V beschreibt ein beliebiges äußeres Feld. Da Teilchen in der Quantenmechanik ununterscheidbar sind, müssen die Wellenfunktionen $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ je nach Spin der Teilchen gewissen Symmetrien gehorchen. Für die in dieser Arbeit betrachteten

Fermionen, d.h. Teilchen halbzahligen Spins, muss die Wellenfunktion antisymmetrisch unter Vertauschung zweier Teilchen sein, für Bosonen, d.h. Teilchen geradzahligen Spins, muss sie symmetrisch unter Vertauschung zweier Teilchen sein. Für Fermionen gilt also

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N) = -\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (2.3)$$

Ich betrachte im Folgenden nur Fermionen.

$\phi(\mathbf{x}_i)$ sei ein Einteilchen-Zustand des Systems, im Folgenden als Orbital bezeichnet. Aus allen in der Basis von Hartree-Produkten darstellbaren Zuständen

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_{i_1 \dots i_N} C_{i_1 \dots i_N} \phi_{i_1}(\mathbf{x}_1) \dots \phi_{i_N}(\mathbf{x}_N) \quad (2.4)$$

können nur diejenigen einen für Fermionen möglichen quantenmechanischen Zustand darstellen, die die Bedingung (2.3) erfüllen [14]. Die Bedingung kann weggelassen werden, wenn die Zustände von vornherein so konzipiert werden, dass sie antisymmetrisch sind. Dies kann durch Benutzung von Slater-Determinanten erreicht werden:

$$|\phi_{i_1}(\mathbf{x}_1) \dots \phi_{i_N}(\mathbf{x}_N)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \phi_{\pi(i_1)}(\mathbf{x}_1) \dots \phi_{\pi(i_N)}(\mathbf{x}_N), \quad (2.5)$$

wobei π eine beliebige Permutation der Indices $i_1 \dots i_N =: \mathbf{I}$ ist, die im Folgenden im Multiindex \mathbf{I} zusammengefasst werden. Ein Zustand wird dann durch eine Superposition aller Slater-Determinanten beschrieben:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{I}} C_{\mathbf{I}}(t) |\phi_{i_1}(\mathbf{x}_1) \dots \phi_{i_N}(\mathbf{x}_N)\rangle. \quad (2.6)$$

Gibt es insgesamt $2N_b$ Orbitale, existieren $\binom{2N_b}{N}$ verschiedene Slater-Determinanten [14]. In der Regel gibt es unendlich viele Orbitale, also auch unendlich viele Slater-Determinanten. Um die Schrödingergleichung numerisch lösen zu können, muss man sich auf eine endliche Anzahl von Basisfunktionen und damit auch eine endliche Anzahl von Orbitalen beschränken und erhält damit auch endlich viele Slater-Determinanten. Im Hubbard-Modell ist der Hilbert-Raum endlich-dimensional, so dass die Zahl der Slater-Determinanten auch bei einer exakten Lösung begrenzt ist. Das exponentielle Wachstum der Anzahl der Slater-Determinanten mit der Anzahl N der Teilchen ist eines der Hauptprobleme bei der Lösung quantenmechanischer Vielteilchenprobleme [13].

2.2 Zweite Quantisierung

Für den Formalismus der zweiten Quantisierung werden die Eigenschaften der Slater-Determinanten durch Antikommutator-Relationen von Erzeugungsoperatoren \hat{c}_i^\dagger und Vernichtungsoperatoren \hat{c}_i ausgedrückt.

\hat{c}_i^\dagger erzeugt ein Fermion im Orbital ϕ_i , \hat{c}_i vernichtet ein Fermion im Orbital ϕ_i . Eine Slater-Determinante mit einer Besetzung im 1., 3., 4. und 8. Orbital ist damit beispielsweise darstellbar durch

$$|\phi_1\phi_3\phi_4\phi_8\rangle = \hat{c}_1^\dagger\hat{c}_3^\dagger\hat{c}_4^\dagger\hat{c}_8^\dagger| \rangle, \quad (2.7)$$

wobei $| \rangle$ der Vakuum-Zustand ist.

$[\hat{A}, \hat{B}]$ bezeichne den Kommutator, $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ den Anti-Kommutator zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} . Aus den Eigenschaften von Determinanten folgen die Antikommutator-Relationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$\{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \quad (2.8)$$

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0 \quad (2.9)$$

$$\{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j\} = \delta_{ij} \quad (2.10)$$

Ein jeder quantenmechanischer Operator kann durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt werden. Die Darstellung des Hamiltonoperators für ein beliebiges System in zweiter Quantisierung lautet

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j,\alpha} h_{ij} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} g_{ijkl} \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{k,\beta} \hat{c}_{l,\alpha}, \quad (2.11)$$

wobei α und β Spinindices sind. Ich gehe dabei davon aus, dass die betrachteten Fermionen genau zwei Einstellmöglichkeiten für den Spin haben, also $\alpha, \beta \in \{ \uparrow, \downarrow \}$, dass kein Umklappen von Spins stattfindet und dass die Ortsanteile der Orbitale unabhängig vom jeweiligen Spin sind, also ein spin-restricted Fall vorliegt. Wäre dies nicht der Fall, müsste ich h_{ij}^α statt h_{ij} und $g_{ijkl}^{\alpha\beta}$ statt g_{ijkl} schreiben. Die h_{ij} sind die Matrixelemente des

Einteilchen-Anteils des Hamiltonoperators

$$h_{ij} = \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \phi_j(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

die g_{ijkl} sind die Matricelemente des Zweiteilchen-Anteils des Hamiltonoperators

$$g_{ijkl} = \int d^3r dr'^3 \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k^*(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

Mit der Einteilchen-Dichtematrix

$$D_{pq}^\alpha(t) := \langle \Psi(t) | \hat{c}_{p\alpha}^\dagger \hat{c}_{q\alpha} | \Psi(t) \rangle \quad (2.14)$$

$$D_{pq}(t) := D_{pq}^\uparrow(t) + D_{pq}^\downarrow(t) \quad (2.15)$$

und der Zweiteilchen-Dichtematrix

$$d_{pqrs}^{\alpha\beta}(t) := \langle \Psi(t) | \hat{c}_{p\alpha}^\dagger \hat{c}_{r\beta}^\dagger \hat{c}_{s\beta} \hat{c}_{q\alpha} | \Psi(t) \rangle \quad (2.16)$$

$$d_{pqrs}(t) := d_{pqrs}^{\uparrow\uparrow}(t) + d_{pqrs}^{\uparrow\downarrow}(t) + d_{pqrs}^{\downarrow\uparrow}(t) + d_{pqrs}^{\downarrow\downarrow}(t) \quad (2.17)$$

kann der Erwartungswert einer beliebigen Einteilchen-Observablen \hat{O} durch

$$\langle \hat{O} \rangle(t) = \sum_{pq} O_{pq}(t) D_{pq}(t) \quad (2.18)$$

und der Erwartungswert einer beliebigen Zweiteilchen-Observablen \hat{T} durch

$$\langle \hat{T} \rangle(t) = \frac{1}{2} \sum_{pqrs} T_{pqrs} d_{pqrs}(t) \quad (2.19)$$

berechnet werden, wobei O_{pq} wie in (2.12) und T_{pqrs} wie in (2.13) berechnet wird [13].

2.3 Full CI

Setzt man die allgemeine Darstellung eines quantenmechanischen Zustandes $|\Psi(t)\rangle$ in der Basis von Slater-Determinanten (2.5) in die zeitabhängige Schrödingergleichung (2.1) ein

und projiziert die erhaltene Gleichung auf $\langle \phi_{j_1} \dots \phi_{j_N} |$, so erhält man eine Gleichung für die Zeitabhängigkeit der Vorfaktoren C_I :

$$i\dot{C}_J(t) = \sum_I H_{JI}(t) C_I(t) \quad (2.20)$$

mit den Matrixelementen H_{JI} des Hamiltonoperators

$$H_{JI}(t) = \langle \phi_{j_1} \dots \phi_{j_N} | \hat{\mathcal{H}}(t) | \phi_{i_1} \dots \phi_{i_N} \rangle. \quad (2.21)$$

Ich gehe dabei davon aus, dass die Orbitale orthogonal zueinander sind. Bei nicht orthogonalen Orbitalen enthält Gleichung (2.20) noch einen Term, der den Überlapp der Orbitale berücksichtigt. Aus (2.20) erhält man mit der $N_{\text{det}} \times N_{\text{det}}$ Matrix $\mathbf{H}(t)$ eine Matrixgleichung für den Koeffizientenvektor \mathbf{C} :

$$i\dot{\mathbf{C}}(t) = \mathbf{H}(t)\mathbf{C}(t). \quad (2.22)$$

Die Lösung dieser Gleichung liefert die Zeitentwicklung des Zustandes $|\Psi(t)\rangle$ und damit eine vollständige Lösung des Problems. Diese Methode ist als Full Configuration Interaction (Full CI) bekannt [13]. Die numerische Exaktheit von Full CI ist durch die Wahl einer endlichen Basis beschränkt. Im Fall des in dieser Arbeit betrachteten Hubbard-Modells ist diese Einschränkung nicht nötig, die Methode liefert also eine numerisch exakte Lösung der Schrödingergleichung.

Für die Zeitpropagation von \mathbf{C} muss bei jedem Zeitschritt das Produkt $\mathbf{H}(t)\mathbf{C}(t)$ berechnet werden. Dafür kann man entweder die Matrix $\mathbf{H}(t)$ explizit nach (2.21) konstruieren und die Matrizenmultiplikation ausführen oder direkt die Wirkung der Hamiltonmatrix auf den Koeffizientenvektor berechnen (Direct CI). Die Durchführung des eigentlichen Zeitschritts kann auf viele verschiedene Arten erfolgen. Die in dem in dieser Arbeit benutzten Programm von David Hochstuhl [13] verwandte Variante ist ein Runge-Kutta-Verfahren, nämlich der eighth-order Dormand-prince integrator. Für die Berechnung des Grundzustandes wird imaginäre Zeitpropagation (ITP) verwendet:

Die Zeitentwicklung eines beliebigen Zustandes bei einem zeitunabhängigen Hamilton-

operator ist gegeben durch

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} e^{-iE_{\mathbf{n}}t} |\Psi_{\mathbf{n}}\rangle, \quad (2.23)$$

wobei die $|\Psi_{\mathbf{n}}\rangle$ die Eigenzustände und die $E_{\mathbf{n}}$ die zugehörigen Energieeigenwerte des Hamiltonoperators sind. Wählt man nun einen beliebigen (zum Grundzustand nicht orthogonalen) Zustand aus und propagiert ihn durch eine imaginäre Zeit $\tau = it$, so ist seine Zeitentwicklung durch

$$|\Psi(\tau)\rangle = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} e^{-E_{\mathbf{n}}\tau} |\Psi_{\mathbf{n}}\rangle \quad (2.24)$$

gegeben. Bei dieser Zeitpropagation bleibt die Normierung nicht erhalten. Da der Grundzustand die niedrigste Energie hat, fällt sein Anteil am Gesamtzustand am langsamsten ab oder steigt am schnellsten an. Wird ein Zustand also durch eine imaginäre Zeit propagiert und dabei konstant renormiert, bleibt nach einiger Zeit nur noch der Grundzustand übrig. Der Vorteil an dieser Methode ist, dass er bei Vorhandensein einer Implementierung der reellen Zeitpropagation ohne größeren Aufwand eingebaut werden kann.

2.4 Das Hubbard-Modell

Die Darstellung orientiert sich an [2].

Wir gehen vom Hamiltonoperator eines periodischen Festkörpers aus, in dem die Gitterpunkte fest sind und somit ein konstantes periodisches Potential vorgeben und die Elektronen nur durch die Coulomb-Wechselwirkung miteinander wechselwirken. Der Hamiltonoperator dieses Systems ist in Ortsdarstellung durch

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2m} \Delta_i + V_G(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.25)$$

gegeben. Dabei ist V_G das periodische Gitterpotential. Über ein Hilfspotential, das die Abschirmung des Gitterpotentials durch die Elektronen berücksichtigt, kann das relative Gewicht des Wechselwirkungsterms, der das Hauptproblem bei der Lösung dieses Hamiltonians darstellt und die Güte vieler Näherungslösungen verschlechtert, formal verkleinert werden. Damit wird der Hamiltonoperator mit dem Hilfspotential V_H zu

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (2.26)$$

$$V(\mathbf{r}_i) := V_G(\mathbf{r}_i) + V_H(\mathbf{r}_i), \quad (2.27)$$

$$U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) := \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \frac{V_H(\mathbf{r}_i) + V_H(\mathbf{r}_j)}{N-1}. \quad (2.28)$$

Viele für Festkörper benutzte Näherungen beruhen darauf, V_H passend zu wählen und dann $U \equiv 0$ zu setzen.

Ich schreibe (2.26) in zweiter Quantisierung in der Basis von Wannier-Funktionen. Der Einteilchen-Anteil des Hamiltonoperators hat Bloch-Funktionen als Eigenfunktionen. Eine Bloch-Funktion ist durch

$$\varphi_{\mathbf{a}\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{a}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

gegeben, wobei $u_{\mathbf{a}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ die Periodizität des Gitters besitzt. \mathbf{k} läuft über eine Brillouin-Zone, a ist der Index des Bandes. Eine Wannier-Funktion ist dann durch

$$\phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N_b}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \varphi_{\mathbf{a}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

gegeben, wobei N_b die Anzahl der Gitterplätze (im Folgenden als Site bezeichnet) und \mathbf{R}_i der Ort der Site ist, um die $\phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ lokalisiert ist. Der Hamiltonoperator in der Basis der Wannier-Funktionen (2.30) lautet dann

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{a,i,j,\alpha} t_{ij}^a \hat{c}_{ai\alpha}^\dagger \hat{c}_{aj\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j,k,l \\ a,b,c,d}} \sum_{\alpha,\beta} U_{ijkl}^{abcd} \hat{c}_{ai,\alpha}^\dagger \hat{c}_{bj,\beta}^\dagger \hat{c}_{ck,\beta} \hat{c}_{dl,\alpha}, \quad (2.31)$$

$$t_{ij}^a = \int d\mathbf{x}^3 \phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) \hat{h} \phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_j), \quad (2.32)$$

$$U_{ijkl}^{abcd} = \int d\mathbf{x}^3 d\mathbf{y}^3 \phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) \phi_b(\mathbf{y} - \mathbf{R}_j) U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi_c(\mathbf{y} - \mathbf{R}_k) \phi_d(\mathbf{x} - \mathbf{R}_l). \quad (2.33)$$

Dabei sind die t_{ij}^a Hopping-Matrixelemente, die den Übergang zwischen Orbitalen darstellen, und die U_{ijkl}^{abcd} Überlappintegrale. Um aus (2.31) den Hubbard-Hamiltonian zu gewinnen, macht man eine Reihe von vereinfachenden Annahmen:

- Es wird nur ein einziges Band betrachtet, also $a = b = c = d$. Dies ist gerechtfertigt, wenn Interband-Wechselwirkungen schwach und alle Bänder bis auf das erste Leitungsband von der Fermi-Energie weit entfernt sind [2].
- Es wird angenommen, dass die Elektronen sehr stark auf den einzelnen Sites lokalisiert sind, der Überlapp zwischen verschiedenen Sites also sehr klein ist. Damit können wir $U_{ijkl} = U$ für $i = j = k = l$ und ansonsten $U_{ijkl} = 0$ setzen. Dies ist für kleine Bandbreiten der Fall [2]
- t_{ii} liefert einen Beitrag, wenn auf einer Site ein Teilchen vorhanden ist. Da t_{ii} in einem homogenen Gitter überall gleich ist und die Teilchenzahl konstant ist, liefern die t_{ii} einen konstanten Beitrag, der das Verhalten der Elektronen nicht weiter beeinflusst. In einer großkanonischen Beschreibung würde der Beitrag in das chemische Potential absorbiert.
- Es wird angenommen, dass die Wahrscheinlichkeit für Hopping zwischen nächsten Nachbarn (NN) sehr viel größer ist, als die Wahrscheinlichkeit für Hopping zwischen weiter entfernten Sites. Deswegen setzten wir $t_{ij} = t$ für i, j NN und ansonsten $t_{ij} = 0$. Auch diese Annahme ist bei kleinen Bandbreiten gerechtfertigt [2].

Dies führt uns auf den Hubbard-Hamiltonian:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2.34)$$

$\langle i, j \rangle$ umfasst alle Paare nächster Nachbarn. Durch die Festlegung dieser Paare lässt sich die Geometrie des Gitters abbilden. Für genau zwei NN erhält man eine eindimensionale Kette, was der Fall ist, der in dieser Arbeit betrachtet wird. Durch andere Festlegungen erhält man zwei- oder dreidimensionale Gitter oder auch kompliziertere Geometrien. Die Einschränkung auf Elektronen kann an dieser Stelle weggelassen werden. Gleichung (2.34) beschreibt dann beliebige Fermionen mit zwei Einstellmöglichkeiten für den Spin. Da es sich um Fermionen handelt, können auf jeder Site maximal zwei Teilchen sitzen. Die Doppelbesetzung einer Site führt zu einem Energiebeitrag U , die kinetische Energie und das Hopping der Teilchen zwischen Sites findet mit einer Hoppingamplitude t statt. Um den Hamiltonian noch weiter zu vereinfachen, kann man $t = 1$ setzen und damit alle Energien in Einheiten von t und alle Zeiten in Einheiten von $\frac{1}{t}$ angeben. Das negative Vorzeichen vor der Hoppingamplitude mag zuerst verwirren. Hierbei handelt es

sich lediglich um eine Konvention, der Hubbard-Hamiltonian (2.34) ist invariant unter Vorzeichenwechsel von t . Dies wird im folgenden Abschnitt für $U = 0$ plausibel gemacht. Es kann auch allgemein gezeigt werden [9].

2.4.1 Die Lösung für $U = 0$

Für $U = 0$ lautet der Hubbard-Hamiltonian

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha}. \quad (2.35)$$

Dies ist gerade der Tight-Binding Hamiltonian [2]. Er ist durch eine Fourier-Transformation exakt lösbar. Dafür setzt man

$$\hat{c}_{l\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_b}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}l} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger, \quad (2.36)$$

$$\hat{c}_{l\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N_b}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}l} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} \quad (2.37)$$

in (2.35) ein:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= -t \sum_{\langle l,m \rangle, \alpha} \hat{c}_{l\alpha}^\dagger \hat{c}_{m\alpha} = -\frac{t}{N_b} \sum_{\langle l,m \rangle, \alpha} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}l} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger e^{i\mathbf{k}'m} \hat{c}_{\mathbf{k}'\alpha} \\ &= -\frac{t}{N_b} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\alpha} \sum_1 (e^{-i\mathbf{k}l} e^{i\mathbf{k}'(l+1)} + e^{-i\mathbf{k}l} e^{i\mathbf{k}'(l-1)}) \\ &= -t \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\alpha} (e^{i\mathbf{k}'} + e^{-i\mathbf{k}'}) \frac{1}{N_b} \sum_1 e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})l} \\ &= -t \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\alpha} 2 \cos \mathbf{k}' \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha} \end{aligned} \quad (2.38)$$

mit der Dispersionsrelation $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \cos(k)$, $k = \frac{2\pi n}{N_b}$, $n \in \mathbb{N}_{\leq N_b - 1}^0$. Die kinetische Energie eines einzelnen Teilchens kann also Werte von $-2t$ bis $2t$ annehmen, die Bandbreite ist also $4t$. Dieses Ergebnis macht plausibel, warum der Hubbard-Hamiltonian für $U = 0$ invariant unter Vertauschung des Vorzeichens des Hopping-Terms ist. Ein Wechsel des Vorzeichens in der Dispersionsrelation führt, da der Cosinus gerade Werte zwischen -1

und 1 annimmt, zu denselben Eigenenergien.

2.4.2 Effektiver Doublon-Hamiltonian

In diesem Abschnitt wird die Herleitung eines effektiven Hamiltonians für die Zeitentwicklung doppelbesetzter Sites für große U angedeutet. Dies führt uns auf den Begriff des Doublons. Die Darstellung folgt [15].

Man definiert den Loch-Operator durch $\hat{h}_{i\bar{\alpha}} := \hat{1} - \hat{n}_{i\alpha}$ mit $\bar{\alpha} := -\alpha$. Hiermit kann der Hopping-Anteil $\hat{\mathcal{T}}$ des Hamiltonians umgeschrieben werden:

$$\hat{\mathcal{T}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} (\hat{n}_{i\bar{\alpha}} + \hat{h}_{i\bar{\alpha}}) \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} (\hat{n}_{j\bar{\alpha}} + \hat{h}_{j\bar{\alpha}}) = \hat{\mathcal{T}}_{-1} + \mathcal{T}_0 + \mathcal{T}_1, \quad (2.39)$$

$$\hat{\mathcal{T}}_{-1} := -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{h}_{i\bar{\alpha}} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{n}_{j\bar{\alpha}}, \quad (2.40)$$

$$\hat{\mathcal{T}}_0 := -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{n}_{i\bar{\alpha}} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{n}_{j\bar{\alpha}} + \hat{h}_{i\bar{\alpha}} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{h}_{j\bar{\alpha}}, \quad (2.41)$$

$$\hat{\mathcal{T}}_1 := -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{n}_{i\bar{\alpha}} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} \hat{h}_{j\bar{\alpha}}. \quad (2.42)$$

Damit gilt für den Wechselwirkungs-Anteil $\hat{\mathcal{U}} := U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ des Hamiltonians:

$$[\hat{\mathcal{U}}, \hat{\mathcal{T}}_s] = sU \hat{\mathcal{T}}_s, \quad s \in \{-1, 0, 1\}. \quad (2.43)$$

$\hat{\mathcal{T}}_{-1}$ verringert also die Anzahl der doppelbesetzten Sites, $\hat{\mathcal{T}}_0$ erhält die Anzahl der doppelbesetzten Sites und $\hat{\mathcal{T}}_1$ erhöht die Anzahl der doppelbesetzten Sites. Aus $\hat{\mathcal{T}}_{-1}$ und $\hat{\mathcal{T}}_1$ erhalten wir einen Generator \hat{S} einer unitären Transformation:

$$\hat{S} := -\frac{i}{U} (\hat{\mathcal{T}}_1 - \hat{\mathcal{T}}_{-1}). \quad (2.44)$$

Die Transformation des Hamilton-Operators ist dann durch

$$\hat{H} := e^{i\hat{S}} \hat{\mathcal{H}} e^{-i\hat{S}} \quad (2.45)$$

gegeben. Berechne (2.45) nach der Lie'schen Entwicklungsformel:

$$e^{i\hat{S}}\hat{\mathcal{H}}e^{-i\hat{S}} = \hat{\mathcal{H}} + [i\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}] + \frac{1}{2}[i\hat{S}, [i\hat{S}, \hat{\mathcal{H}}]] + \dots \quad (2.46)$$

Dies führt auf

$$\hat{H} = \hat{\mathcal{T}}_0 + \hat{U} + \frac{1}{U}([\hat{\mathcal{T}}_1, \hat{\mathcal{T}}_{-1}] + [\hat{\mathcal{T}}_0, \hat{\mathcal{T}}_{-1}] + [\hat{\mathcal{T}}_1, \hat{\mathcal{T}}_0]) + \mathcal{O}(U^{-2}). \quad (2.47)$$

Wenn man in \hat{H} Terme der Ordnung $\mathcal{O}(U^{-2})$ vernachlässigt und nur doppelbesetzte Sites betrachtet, erhält man einen effektiven Hamiltonian für doppelbesetzte Sites [10]:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \frac{t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_j + \sum_{ij} V_{ij} \hat{n}_i^d \hat{n}_j^d. \quad (2.48)$$

Dabei ist $V_{ij} = \infty$ für $i = j$, da auf einer Site nur maximal zwei Fermionen sitzen können, $V_{ij} = -\frac{t^2}{U}$ für $ij = \langle i,j \rangle$, $\hat{d}_i^\dagger := \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger$ der Erzeugungsoperator für zwei Fermionen auf der Site i und $\hat{n}_i^d := \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i$. Dieser Hamiltonian koppelt (in der betrachteten Ordnung) nicht mehr mit den Räumen mit einer anderen Gesamtzahl doppelbesetzter Sites. Dies rechtfertigt es, zwei Fermionen auf einer Site als eine Einheit zu betrachten und ein neues Quasiteilchen, das Doublon, einzuführen. Damit ist \hat{d}_i^\dagger der Erzeuger eines solchen Doublons und (2.48) beschreibt seine Dynamik. Wenn im Folgenden von Doublons die Rede ist, ist dies prinzipiell immer im Sinne von (2.48) zu verstehen. Eine relevante Eigenschaft von Doublons ist, dass sie eine Hoppingamplitude $\frac{t^2}{U}$ haben, ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit also proportional zu $\frac{1}{U}$ ist. Dies benutze ich insbesondere auch zur Feststellung, ob ein Zustand oder Teile eines Zustands als Doublons bezeichnet werden können.

3 Ergebnisse

Alle Ergebnisse sind mit Full CI errechnet, also exakt. Das dafür genutzte Programm wurde von David Hochstuhl [13] entwickelt.

3.1 Doublon

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse für eine einzelne doppelbesetzte Site vorgestellt. Der dafür betrachtete Hamiltonian ist

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i \neq i_0} W \hat{n}_i, \quad W \rightarrow \infty, \quad \tau = 0 \\ \hat{\mathcal{H}} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad \tau > 0.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Die Zeit wird in dieser Arbeit mit τ bezeichnet, um eine Verwechslung mit dem Hopping-Parameter t zu vermeiden. Wir betrachten eine eindimensionale Kette und zwei Teilchen. Für die Bestimmung des Anfangszustandes sind also alle Sites außer der Site i_0 energetisch so ungünstig, dass sich die Teilchen nur auf der Site i_0 aufhalten können. Diese ist gerade so gewählt, dass sie sich in der Mitte der Kette befindet. Bei $N_b = 23$ Sites, ist i_0 also gerade 11, da die Nummerierung der Sites bei 0 beginnt. Um uns einen Überblick über den Verlauf zu beschaffen, betrachten wir einen farbkodierten Plot, der den Verlauf der Dichte, also des Erwartungswerts des Teilchenzahloperators $\langle \hat{n}_i \rangle$ einer einzigen Site, auf allen Sites darstellt. Dies ist für ausgewählte U in den Abbildungen 3.1 bis 3.6 zu sehen. Wir betrachten die Ausbreitung der beiden Teilchen in 23 Sites. Wie auf Abbildung 3.1 zu sehen ist, ist zum Zeitpunkt $\tau = 0$ alle Dichte auf der mittleren Site lokalisiert. Für $\tau > 0$ breitet sie sich dann symmetrisch zu i_0 aus, da auch die Anordnung symmetrisch zu i_0 ist. Diese Ausbreitung wird bis zur Zeit $\tau = 4$ betrachtet, zu der die ersten Ausläufer der Dichte bereits den äußeren Rand erreichen.

Dichteverlauf für verschiedene U :

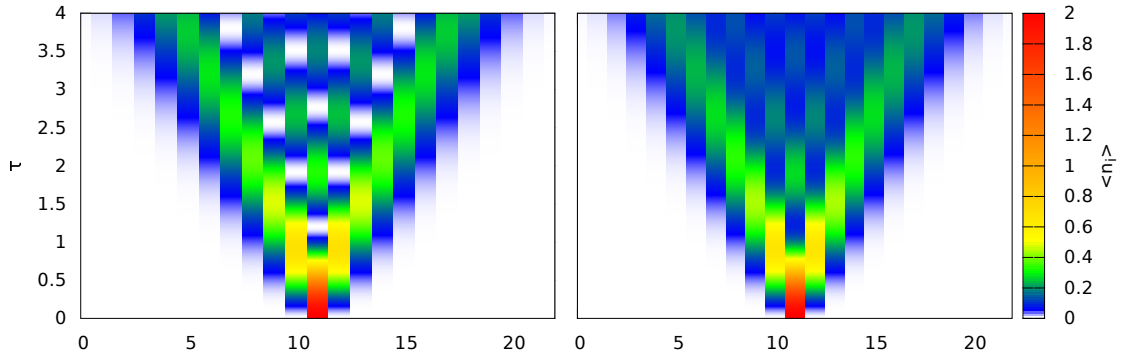


Abbildung 3.1: $U = 0$

Abbildung 3.2: $U = 1$

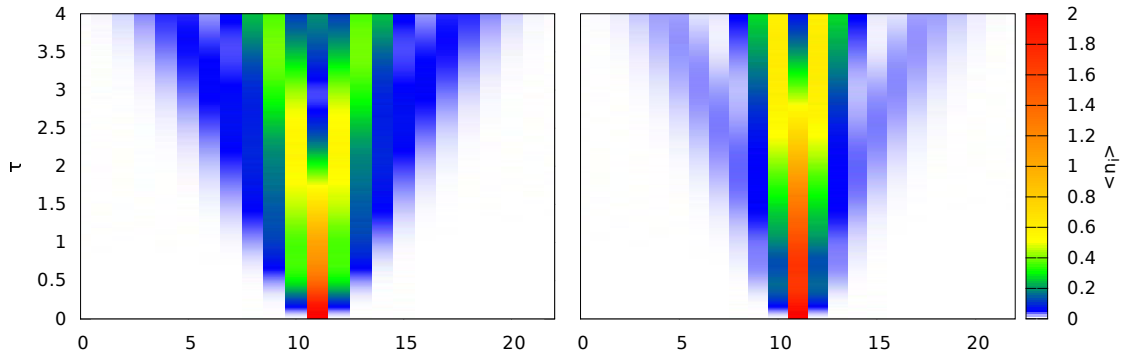


Abbildung 3.3: $U = 4$

Abbildung 3.4: $U = 7$

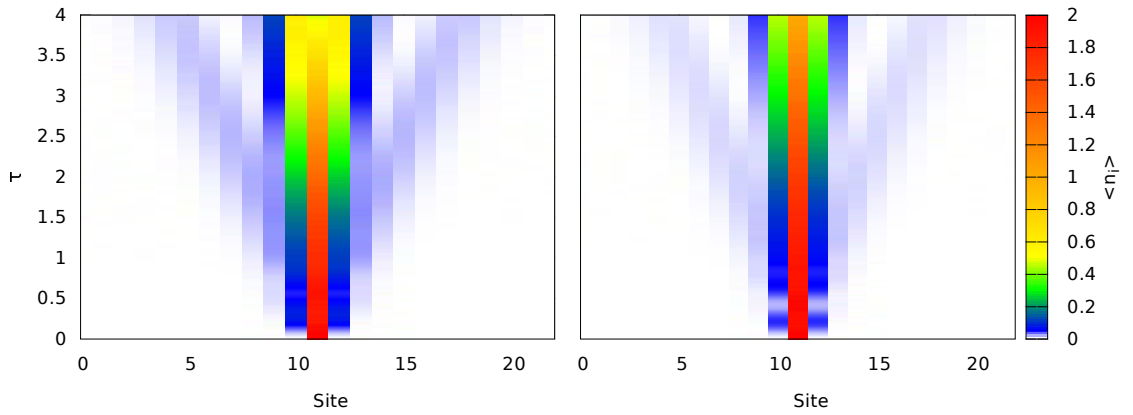


Abbildung 3.5: $U = 10$

Abbildung 3.6: $U = 14$

Da der Effekt des Randes in dieser Arbeit nicht betrachtet werden soll, ist eine kleinere Anzahl von Sites für die gewählte Propagationszeit nicht möglich. Der Autor weist darauf hin, dass bei der Farbkodierung die größte Auflösung bei Dichten von 0 bis 0.6 liegt. Für $U = 0$ hat der Dichteverlauf zwei dichte äußere Arme, die sich linear ausbreiten und zur Zeit $\tau = 4$ im Mittel etwa die Site 5 erreicht haben. Im Inneren der Verteilung kommt es zu einer Art Interferenzmuster. Für $U = 1$ bleiben diese Arme bestehen, das Interferenzmuster wird jedoch von einem diffusen Hintergrund überlagert. In der Abbildung 3.3 für $U = 4$ hat sich der Verlauf qualitativ gewandelt. Die äußeren Arme sind zwar weniger dicht, erreichen aber im Mittel immer noch etwa die Site 5. Im Inneren bilden sich nach kurzer Zeit zwei neue linear propagierende Arme aus. Zwischen den inneren und äußeren Armen befindet sich für $\tau = 4$ nur sehr wenig Dichte. Die Ausbreitungsdynamik spaltet sich also in zwei Anteile auf. Für größere U setzt sich dieser Trend fort, wobei von $U = 7$ bis $U = 14$ immer mehr Dichte in den inneren Armen verbleibt. Diese Arme breiten sich mit größerem U langsamer aus, während die äußeren Arme unabhängig von U im Mittel immer etwa die gleiche Site erreichen. Wie in Abschnitt 2.4.2 angedeutet, entkoppeln die Unterräume mit einer unterschiedlichen Anzahl doppelbesetzter Sites für große U . Wir versuchen also, das Verhalten im Kontext einer separaten Propagation von Doublons und Einzelteilchen zu verstehen. Um diesen Ansatz zu bestätigen, betrachten wir den zeitlichen Verlauf der Doppelbesetzung einzelner Sites $\langle \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow \rangle$ in einer zu den Abbildungen 3.1 bis 3.6 analogen Form. Der Verlauf ist in den Abbildungen 3.7 bis 3.12 dargestellt. Ein Vergleich von 3.1 und 3.7 zeigt, dass doppelbesetzten Sites im nicht interagierenden Modell wie zu erwarten keine besondere Rolle zukommt, der Teil der Dichte, der zu doppelbesetzten Sites gehört, ist einfach das Quadrat der Einteilchendichte. Für kleine U bleibt dieses Verhalten bestehen, wie 3.8 exemplarisch zeigt. Für $U = 4$ stellt man beim Vergleich von 3.3 und 3.9 fest, dass einerseits die äußeren Arme aus 3.3 in 3.9 vollständig fehlen, also keinerlei Doppelbesetzung enthalten, und andererseits die inneren Arme aus 3.3 farblich sehr gut mit denen aus 3.9 übereinstimmen. Es sei dabei darauf verwiesen, dass eine Doppelbesetzung von 1 gerade einer Dichte von 2 entspricht, die Farbkodierungen also übereinstimmen. Die Übereinstimmung verbessert sich für größere U noch weiter, wie ein Vergleich von den Abbildungen 3.4 bis 3.6 mit den Abbildungen 3.10 bis 3.12 zeigt. Insgesamt können wir das Verhalten ungefähr in drei Bereiche einteilen:

Verlauf der Doublon-Dichte für verschiedene U :

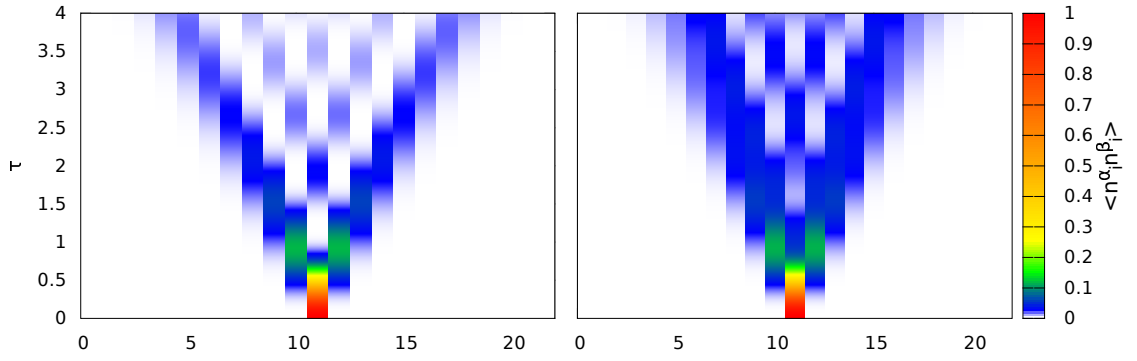


Abbildung 3.7: $U = 0$

Abbildung 3.8: $U = 1$

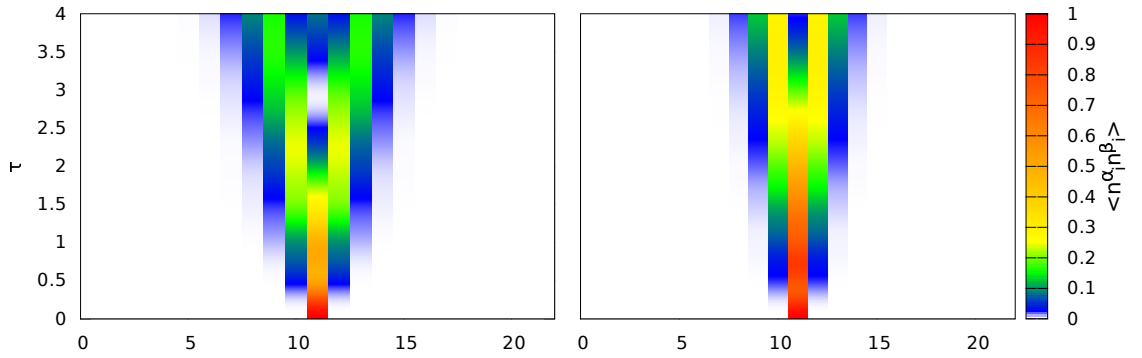


Abbildung 3.9: $U = 4$

Abbildung 3.10: $U = 7$

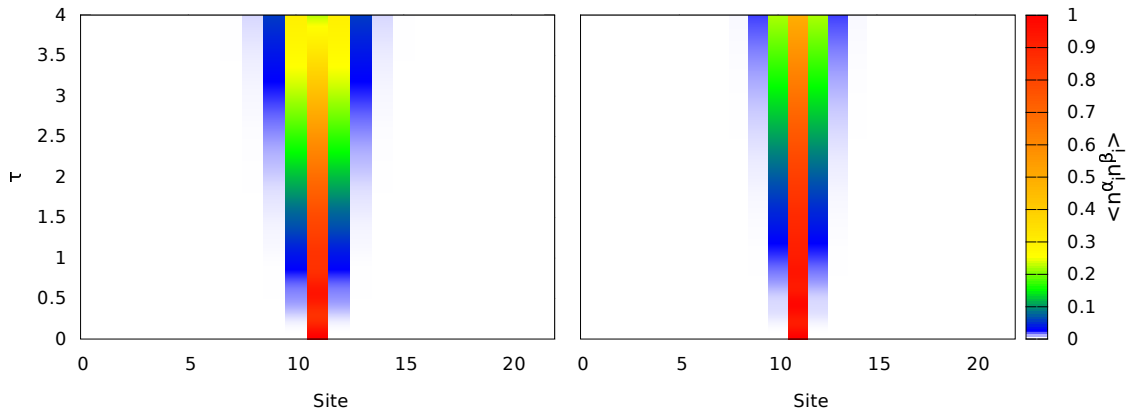


Abbildung 3.11: $U = 10$

Abbildung 3.12: $U = 14$

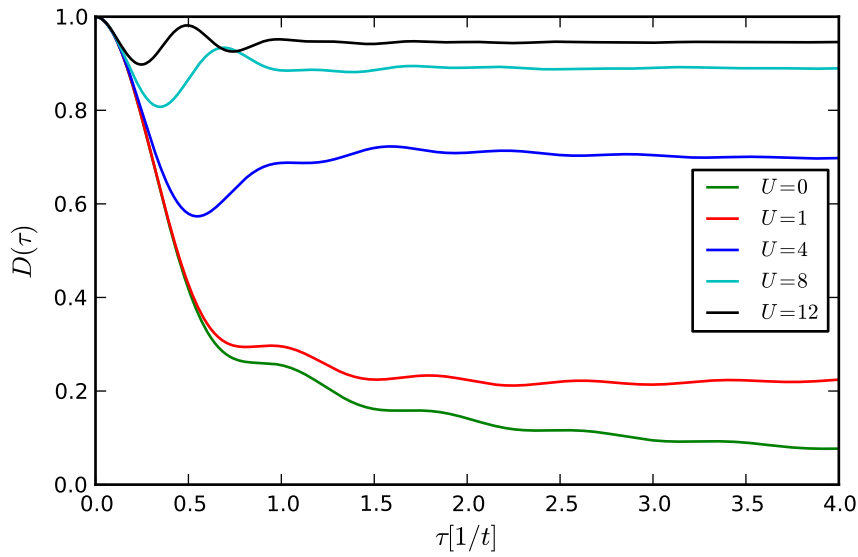


Abbildung 3.13: Verlauf der Doppelbesetzung $D(\tau)$ für verschiedene Werte der Wechselwirkung U in einem System mit $N_b = 23$ Sites

Im Bereich von $U = 0$ bis $U \approx 1$ entspricht das Verhalten etwa dem von $U = 0$. Im Bereich von $U \approx 4$ bis $U \rightarrow \infty$ lässt sich das Verhalten anscheinend durch eine separate Propagation von Einzelteilchen und Doublons beschreiben. Im Bereich zwischen $U \approx 1$ und $U \approx 4$ ist das Verhalten involvierter und kann durch keinen der beiden Ansätze vollständig beschrieben werden.

Im Folgenden wird im Abschnitt 3.1.1 zuerst untersucht, wie die zu Anfang vollständige Doppelbesetzung zerfällt. Danach wird in Abschnitt 3.1.2 die im Vorherigen qualitativ beschriebene Ausbreitungsdynamik quantifiziert und die Aufspaltung in zwei diskrete Dynamiken gezeigt.

3.1.1 Zerfalldynamik

Die insgesamt vorhandene Doppelbesetzung D ist durch

$$D(\tau) := \sum_i \langle \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow \rangle \quad (3.2)$$

gegeben. Der zeitliche Verlauf von D ist in Abbildung 3.13 zu sehen. Zuerst beginnt die Doppelbesetzung unabhängig von U von ihrem Anfangswert $D(\tau = 0) = 1$ abzufallen.

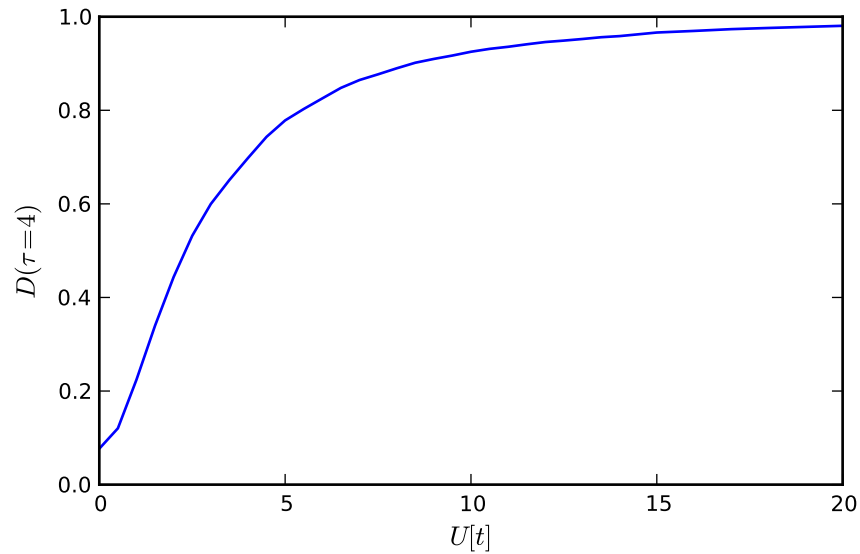


Abbildung 3.14: Anteil der erhaltenen Doppelbesetzung zur Zeit $\tau = 4$ im gleichen System

Für $U = 0$ verlangsamt sich dieser Abfall nach etwa 0.5 Zeiteinheiten stark und die Doppelbesetzung tendiert langsam gegen 0. Der Verlauf für $U = 1$ ist ähnlich, wobei ein gewisser Anteil der Doppelbesetzung nur sehr langsam zerfällt. Für größere U erreicht die Doppelbesetzung nach kurzer Zeit ein Minimum und nimmt für längere Zeiten einen konstanten (oder noch sehr viel langsamer als für $U = 1$ abfallenden) Wert an. Für alle U schwingt die Doppelbesetzung nach dem anfänglichen Abfall gedämpft. Für größere U liegt das Minimum bei kleineren Zeiten und ein größerer Anteil der Doppelbesetzung bleibt insgesamt erhalten. Zweiteres ist sofort durch den effektiven Doublon-Hamiltonian (2.48) zu verstehen, der im Limes sehr großer U vorhersagt, dass vorhandene Doppelbesetzung nicht zerfallen kann. Um den Verlauf der Doppelbesetzung $D(\tau)$ und seine Abhängigkeit von der Wechselwirkung U zu verstehen, untersuchen wir drei seiner Eigenschaften:

Der Anteil der Doppelbesetzung, der im Limes großer Zeiten erhalten bleibt, die Zeitskala $\tau_{D,\min}$ des anfänglichen Abfalls und die Frequenz ω_D der gedämpften Schwingung.

In Abbildung 3.14 ist der am Ende der Simulation übrig gebliebene Wert der Doppelbesetzung geplottet. Da $D(\tau = 0) = 1$ ist, ist dies gleichzeitig auch der erhaltene Anteil der Anfangsdoppelbesetzung. Dass die Kurve für $U = 0$ nicht gegen 0 geht, liegt an

der kurzen Propagationszeit. Für den korrekten Kurvenverlauf im Limes großer Zeiten im unendlich ausgedehnten System müsste die Kurve von größeren U kommend nach 0 durchgezogen werden. Im Folgenden ist der Limes großer Zeiten immer im Sinne des unendlich ausgedehnten Systems zu verstehen. Randeffekte werden nicht berücksichtigt. Es ist aus dieser Rechnung nicht ersichtlich, dass die Doppelbesetzung im Limes großer Zeiten überhaupt erhalten bleibt. In [12] sieht man, dass dies für größere U , dort zum Beispiel $U = 5$, bis zu einer Zeit $\tau = 100$ der Fall ist. Bei kleineren U ist dies, wie eine spätere Begründung des Verhaltens zeigen wird, nicht notwendigerweise der Fall. Man sieht, dass die übrig gebliebene Doppelbesetzung für große U gegen 1 konvergiert. Bei $U \approx 3$ bleibt etwas über 50% übrig, das Doublon ist näherungsweise stabil. Der effektive Doublon-Hamiltonian (2.48) zeigt mathematisch, dass Räume verschiedener Doppelbesetzung für große U entkoppeln. Dies sagt uns aber nicht, warum dies physikalisch der Fall sein sollte. Das positive U im Hubbard-Hamiltonian (2.34) entspricht einer repulsiven Wechselwirkung. In der gegebenen Herleitung ist dies zum Beispiel die Coulomb-Abstoßung zweier Elektronen. Intuitiv würde man erwarten, dass eine repulsive Wechselwirkung die Geschwindigkeit des Zerfalls von doppelbesetzten Sites erhöht. Nach Abbildung 3.14 beobachtet man aber eine repulsive Bindung. Um dieses Phänomen zu verstehen, greifen wir auf die Lösung des Tight-Binding-Hamiltonians (2.35) zurück. Die dort erhaltene Dispersionsrelation

$$\epsilon_k = -2t \cos(k) \quad (3.3)$$

hat eine Bandbreite von $4t$. Nach (3.3) können sich kinetische Energien verschiedener Zustände maximal um $4Nt$ unterscheiden. Die Gesamtenergie des Systems bleibt erhalten. Damit doppelbesetzte Zustände zerfallen können, muss ihre Wechselwirkungsenergie U also in kinetische Energie umgewandelt werden. Aufgrund von (3.3) kann ein einzelnes Teilchen nur eine begrenzte kinetische Energie aufnehmen. Dies begrenzt damit auch den Anteil an Doppelbesetzung, der für ein bestimmtes U zerfallen kann. Die doppelte Bandbreite $4Nt$ wird häufig als erste Begründung des Verhaltens erwähnt (siehe z.B. [9], [12]), da dort das Spektrum einfach- und doppelbesetzter Zustände aufspaltet. Wie wir sehen werden, stellt $U \approx 8$ in der Tat eine relevante Grenze dar. Für die Begründung der repulsiven Bindung kann noch genauer argumentiert werden:

Da die Teilchen im Anfangszustand perfekt lokalisiert sind, sind sie im Impulsraum perfekt delokalisiert, haben also eine kinetische Energie von 0, da die Mittelung $\langle \cos(k) \rangle$

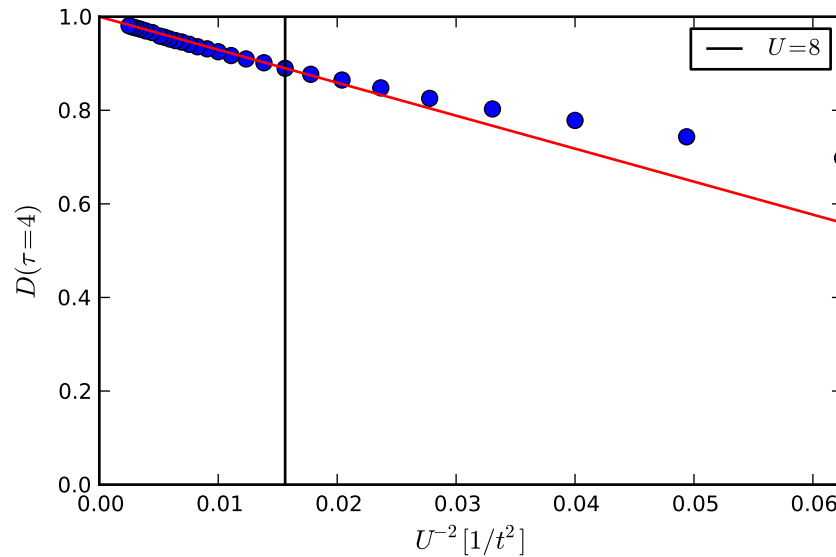


Abbildung 3.15: Anteil der erhaltenen Doppelbesetzung zur Zeit $\tau = 4$ für große U

über eine Periode 0 ergibt. Damit kann sich die kinetische Energie eines einzelnen Teilchens maximal um $\Delta E_{\text{kin,max}} = 2t$, die kinetische Energie zweier Teilchen maximal um $\Delta E_{\text{kin,max}} = 4t$ ändern. Somit wäre $U \approx 4$ eine denkbare Grenze für die Stabilität von Doublons. Ein Einteilchen-Zustand mit $E_{\text{kin}} = 2t$ entspräche aber einem Zustand am Rand der Brillouin-Zone, würde also eine stehende Welle mit homogener Dichteverteilung darstellen. Anders gesagt erfordert $E_{\text{kin}} = 2t$, dass $\langle \cos(k) \rangle = -1$ ist, also nur ein einzelner k -Wert im Zustand vorkommt. Dies entspricht einer perfekten Lokalisierung im Impulsraum, also einer perfekten Delokalisierung im Ortsraum. Da wir von einem lokalisierten Zustand ausgehen, kann ein solcher Zustand offensichtlich nicht erreicht werden. Die maximal erreichbare kinetische Energie ist also durch das Maß der Delokalisierung im Ortsraum vorgegeben.

Der Autor schätzt, dass deswegen ab $U \approx 3$ ein Doublon-Zustand näherungsweise stabil ist, was von Abbildung 3.14 bestätigt wird, und ab dieser Grenze beim erhaltenen Anteil der Doppelbesetzung Doublon-Eigenschaften im Sinne von (2.48) beobachtet werden.

Wir betrachten nun die drei erwähnten Eigenschaften des Verlaufs von Abbildung 3.13. In Abbildung 3.15 ist der Verlauf von Abbildung 3.14 gegen U^{-2} geplottet. Wie man sieht, verläuft die erhaltene Doppelbesetzung ab $U^{-2} \approx 0.015$, d.h. $U \approx 8$, in dieser

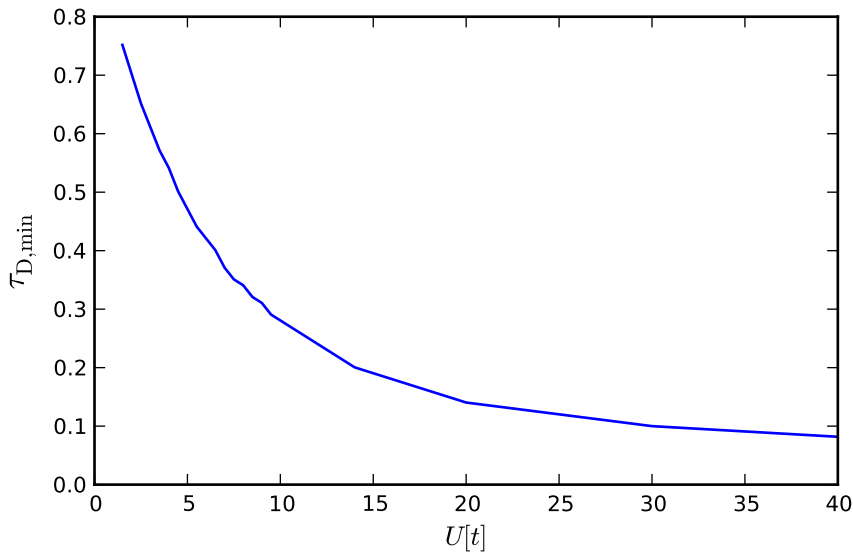


Abbildung 3.16: Durch die Position des ersten Minimums gegebene Zeitskala des anfänglichen Zerfalls der Doppelbesetzung $D(\tau)$

Darstellung linear, also proportional zu U^{-2} . Die Zeitskala des anfänglichen Zerfalls, die durch die Position des ersten Minimums quantifiziert wird, ist in Abbildung 3.16 gegen U und in Abbildung 3.17 gegen U^{-1} geplottet. Wie in Abbildung 3.17 zu sehen, gilt ebenfalls ab $U \approx 8$ die Proportionalität $\tau_{D,\min} \propto U^{-1}$. Dies lässt sich insofern verstehen, als dass ein Übergang aus einem Zustand mit Doppelbesetzung, also einer Energie $E \approx U$, in einen Zustand ohne Doppelbesetzung, also einer Energie $E \approx 0$, eine Energiedifferenz $\Delta E \approx U$ hat, was einer Zeitskala $\tau = \frac{1}{\Delta E}$ entspricht. Für kleine U ist $\tau_{D,\min}$ sehr viel kleiner, als es diese Proportionalität vermuten lassen würde. Für $U \rightarrow 0$ wird $\tau_{D,\min} \approx 1$, der Zerfall findet also auf einer Zeitskala von $\tau = \frac{1}{t}$ statt, also gerade der Zeitskala, die für das Hopping von der Site i_0 benötigt wird, statt. Die letzten beiden Ergebnisse für große U stimmen mit denen von Hoffmann *et al.* aus [12] überein. Dort ist eine störungstheoretische Begründung des Verhaltens gegeben.

Zum Abschluss der Betrachtung der Zerfalldynamik analysieren wir die Frequenz der Schwingung ω_D , die in Abbildung 3.18 dargestellt ist. Auf Grund der kurzen Propagationszeit kann diese Frequenz nicht sinnvoll durch eine Fouriertransformation bestimmt werden. Deswegen wurde sie durch Ablesen des Abstandes $\Delta\tau_\omega$ aufeinander folgender

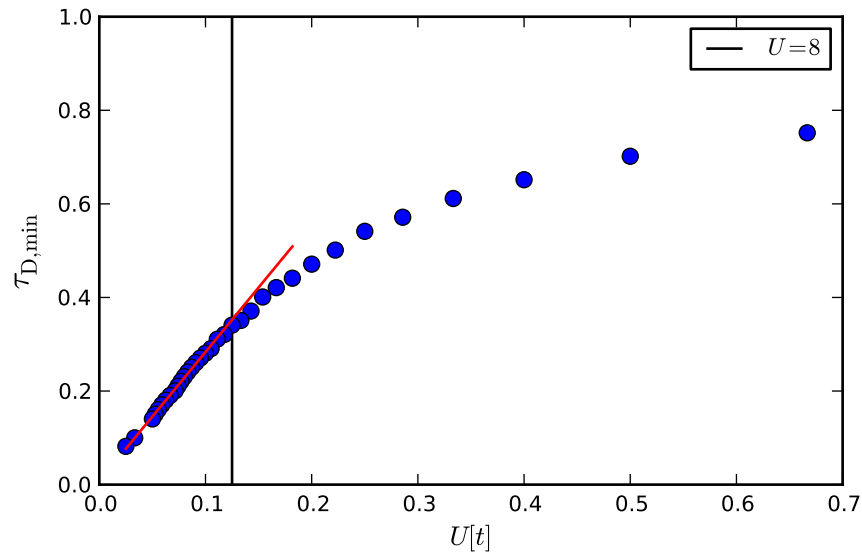


Abbildung 3.17: Linearer Fit zur Zeitskala des anfänglichen Zerfalls der Doppelbesetzung $D(\tau)$ für große U

Minima und Maxima bestimmt:

$$\omega_D = \frac{\pi}{\Delta\tau_\omega}. \quad (3.4)$$

Abgesehen von der Schwingungsfrequenz selbst sind noch die Kurven für $f_1(U) = U$ und $f_2(U) = \sqrt{U^2 + 16t^2}$ dargestellt. Für $U \gtrsim 8$ stellt f_1 eine gute Näherung für die Schwingungsfrequenz dar. Dies ist durch das vorher erwähnte Argument zu verstehen, dass für große U ein Übergang aus einem doppelbesetzten Zustand in einen einfach besetzten Zustand oder umgekehrt einer Energie von $\Delta E \approx U$ entspricht. Da $\hbar = 1$, entspricht dies gerade einer Frequenz von $\omega_D = U$. f_2 stellt eine sehr viel bessere Näherung für die Schwingungsfrequenz dar. Man sieht, dass bis zu $U \approx 7$ fast perfekte Übereinstimmung besteht. In [16] wird dies von Kajala *et al.* als Näherung für die Oszillation der Dichte ungepaarter Fermionen mit Spin \uparrow durch die exakte Lösung des 2-Site Hubbard-Modells benutzt. Die Energie E_- des energetisch günstigsten Zustandes und die Energie E_+ des energetisch ungünstigsten Zustandes sind in diesem Modell durch

$$E_{\pm} = \frac{U}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{16t^2}{U^2}} \right) \quad (3.5)$$

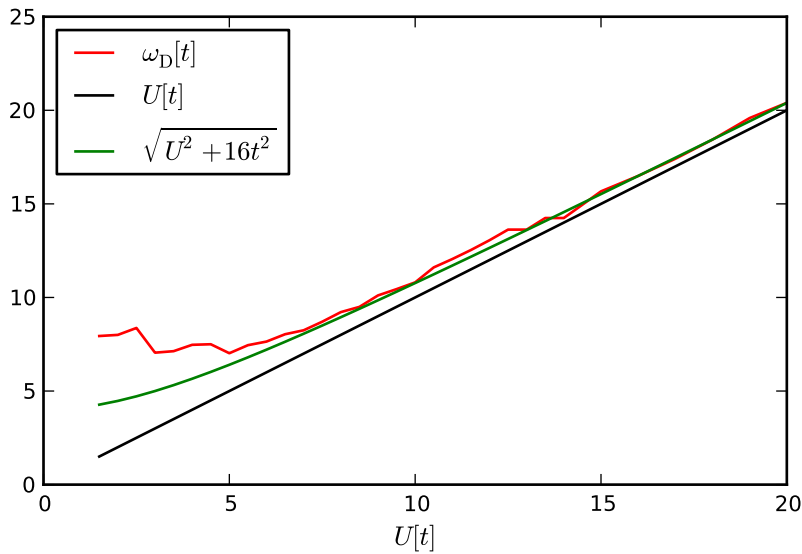


Abbildung 3.18: Schwingungsfrequenz ω_D der Doppelbesetzung $D(\tau)$ mit zwei aus Energieargumenten gewonnenen Vergleichskurven

gegeben. Damit ist

$$E_+ - E_- = 2\frac{U}{2}\sqrt{1 + \frac{16t^2}{U^2}} = \sqrt{U^2 + 16t^2} = f_2(U). \quad (3.6)$$

Somit kann auch dieser Ansatz als ein genauer spezifiziertes Energieargument angesehen werden. Für kleine U wird die Frequenz nicht durch f_2 beschrieben. Für $U \gtrsim 3$ ist die Übereinstimmung noch näherungsweise vorhanden, für $U \lesssim 2.5$ ist die Frequenz in einem Bereich, in dem selbst eine maximale Übergangsenergie von $\Delta E_{\max} = U + 2Nt$ nicht die gemessene Frequenz ergeben würde. Siehe z.B. für $U = 2.5$: $\Delta E_{\max} = 6.5$, $\omega_D \approx 8.5$. Dies legt nahe, dass es sich um kompliziertere Übergänge handelt.

Für die Doppelbesetzung $D(\tau = 4)$, die Zeitskala des anfänglichen Abfalls der Doppelbesetzung $\tau_{D,\min}$ und die Schwingungsfrequenz der Doppelbesetzung ω_D wurde jeweils beobachtet, dass das Verhalten ab $U \approx 8$ zu konvergieren beginnt. In diesem Bereich beginnen störungstheoretische Ansätze die richtigen Proportionalitäten zu liefern. Insbesondere würde man auch vom effektiven Doublon-Hamiltonian erwarten, dass er zumindest ab diesem Bereich die gesamte Dynamik eines Doublons sinnvoll beschreibt. Der

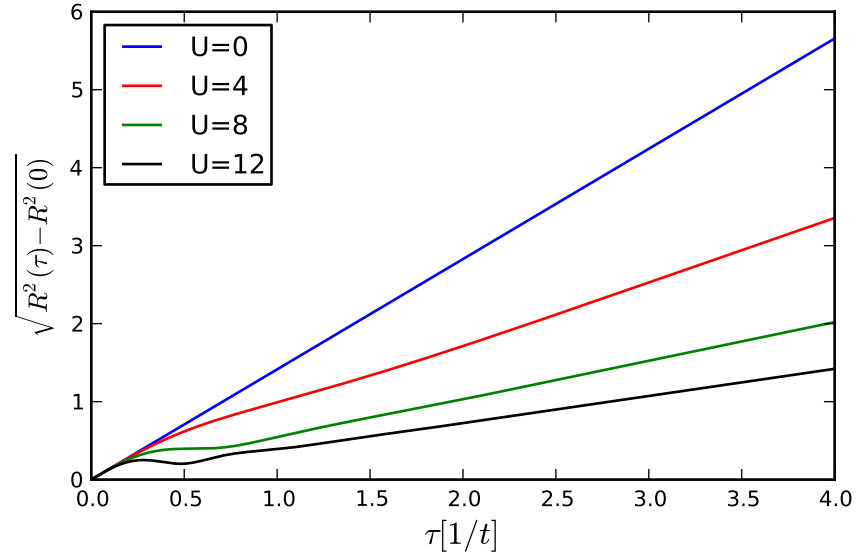


Abbildung 3.19: Zeitabhängigkeit der Breite $\sqrt{R^2(\tau) - R^2(0)}$ im System mit $N_b = 23$ Sites für verschiedene U

Grund für die Konvergenz ist die Aufspaltung des Spektrums in ein Band für Eigenzustände mit Doppelbesetzung und ein Band für Eigenzustände ohne Doppelbesetzung.

3.1.2 Ausbreitungsdynamik

Die auf 1 normierte Breite R eines Zustandes ist durch

$$\begin{aligned}
 R^2(\tau) &= \frac{1}{N} \left(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \right) = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=0}^{N_b-1} \langle \hat{n}_i \rangle i^2 - \left(\sum_{i=0}^{N_b-1} \langle \hat{n}_i \rangle i \right)^2 \right) = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=0}^{N_b-1} \langle \hat{n}_i \rangle i^2 \right) - i_0^2 \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N_b-1} \langle \hat{n}_i \rangle (i^2 + i_0^2 - 2i_0 i) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N_b-1} \langle \hat{n}_i \rangle (i^2 + i_0^2) - 2i_0 \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N_b-1} \langle \hat{n}_i \rangle i \\
 &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_i \rangle (i - i_0)^2
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

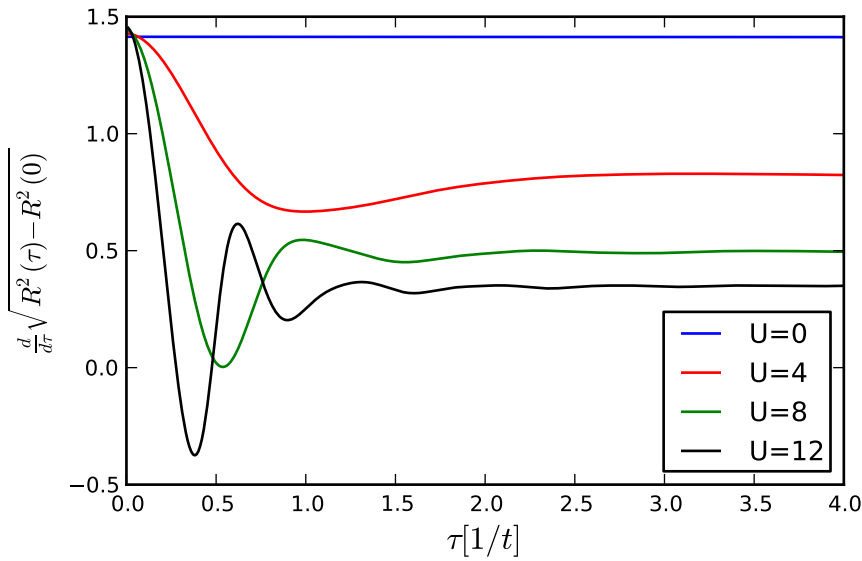


Abbildung 3.20: Zeitabhängigkeit der Ableitung der Breite $\sqrt{R^2(\tau) - R^2(0)}$ im gleichen System

gegeben. Für die Beschreibung der Ausbreitungsdynamik definiere ich die Ausbreitungsgeschwindigkeit v_r wie Ronzheimer *et al.*[8]

$$v_r := \frac{d}{d\tau} \sqrt{R^2(\tau) - R^2(0)} \quad (3.8)$$

als Ableitung der Breite. Der Term $R^2(0)$ berücksichtigt die anfängliche Ausdehnung des Zustandes. Im Fall des Doublons ist $R^2(0) = 0$. Dass die Größe v_r als nicht zeitabhängig angenommen wird, ist eigentlich nicht korrekt. Wir sehen im Anschluss, dass diese Definition als Limes großer Zeiten zu verstehen ist. In Abbildung 3.19 ist der Verlauf der Breite zu sehen.

Die Breite beginnt unabhängig von U stets bei einem Wert von 0. Für $U = 0$ ist sie eine Gerade, für größere U beginnt sie linear mit der gleichen Steigung, knickt ab, schwingt sich ein und verläuft dann linear mit einer geringeren Steigung. Je größer U ist, desto geringer ist die für große Zeiten angenommene Steigung. Ein linearer Zusammenhang zwischen Ausbreitung und Zeit bedeutet eine ballistische Ausbreitung [9]. Für $U = 0$ ist die Ausbreitung also von Anfang an ballistisch, für andere U beginnt sie ballistisch, hat dann einen komplexeren Verlauf und wird im Limes großer Zeiten wieder

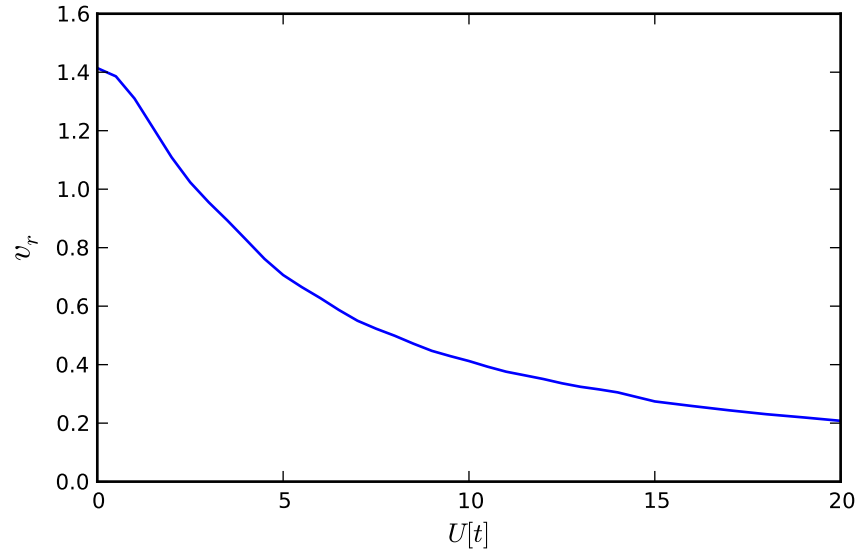


Abbildung 3.21: Ausbreitungsgeschwindigkeit $v_r := \frac{d}{d\tau} \sqrt{R^2(\tau) - R^2(0)}$ im Limes großer Zeiten

ballistisch. In Abbildung 3.20 ist die Ableitung der Breite zu sehen, die wir in (3.8) als Ausbreitungsgeschwindigkeit definiert hatten. Für $U \neq 0$ ist sie offensichtlich eine zeitabhängige Größe. Für sehr große U , z.B. $U = 12$, erreicht sie zwischendurch sogar negative Werte, die Ausbreitung der Wolke verringert sich. Wie Abbildung 3.19 bereits nahelegte, erreicht sie im Limes großer Zeiten aber einen festen Wert. Dieser feste Wert ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit in (3.8). Um unsere Definition der Geschwindigkeit zu untermauern, begründen wir, warum die Ausbreitungsgeschwindigkeit für $U = 0$ gerade $\sqrt{2}$ ist [9].

Die Gruppengeschwindigkeit einer Welle ist durch

$$v_g := \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon(k)}{dk} \quad (3.9)$$

gegeben. Nach der Dispersionsrelation (3.3) ergibt sich für die Expansionsgeschwindigkeit eines Zustandes im Tight-Binding Hamiltonian

$$v_{\text{exp}}^2 = \langle v_g^2 \rangle = \left\langle \left(\frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon(k)}{dk} \right)^2 \right\rangle = 4 \frac{t^2}{\hbar^2} \langle \sin^2(k) \rangle = 2, \quad (3.10)$$

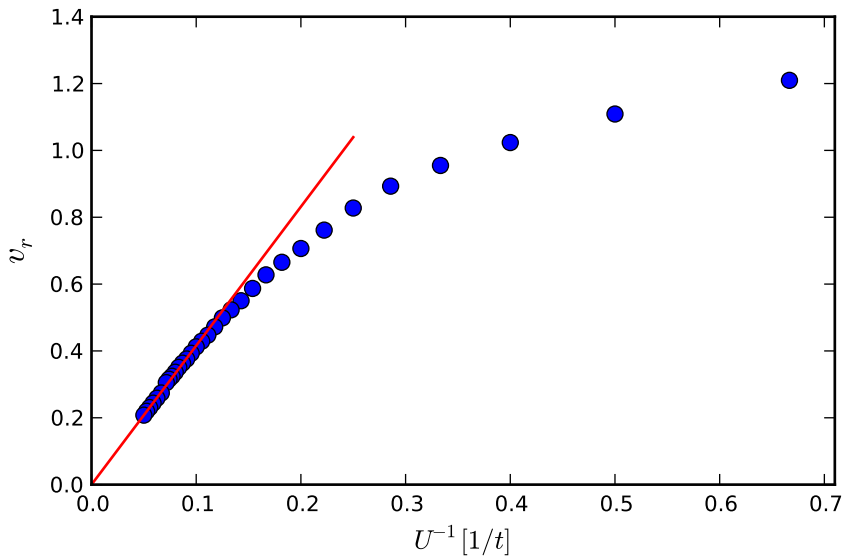


Abbildung 3.22: Linearer Fit zur Ausbreitungsgeschwindigkeit v_r

da für einen perfekt lokalisierten Zustand, in dem alle k -Werte mit dem gleichen Gewicht auftauchen,

$$\langle \sin^2(k) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2(k) dk = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \sin^2(k) + \cos^2(k) dk = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2} 2\pi = \frac{1}{2} \quad (3.11)$$

und $\hbar = t = 1$ ist. Damit ist die Expansionsgeschwindigkeit $v_{\text{exp}} = \sqrt{2}$, was mit dem Ergebnis unserer Definition v_r für $U = 0$ übereinstimmt. Insbesondere sagt uns dies auch, dass die maximale Geschwindigkeit $v_{\text{exp,max}} = 2$ und die minimale Geschwindigkeit $v_{\text{exp,min}} = 0$ ist. Beide Werte erfordern, dass nur ein k -Wert im Zustand vorkommt, also eine homogene Dichteverteilung vorliegt.

In Abbildung 3.21 ist v_r abhängig von U dargestellt. Sie beginnt wie bereits erwähnt für $U = 0$ bei $\sqrt{2}$ und geht dann monoton gegen 0. Je größer die Wechselwirkung der Teilchen, desto langsamer breiten sie sich aus. Dies ist anhand des effektiven Doublon-Hamiltonians (2.48) und Abbildung 3.14 leicht zu verstehen. Es verbleibt ein größerer Anteil im doppelbesetzten Zustand und dieser Anteil hat eine Ausbreitungsgeschwindigkeit $\propto \frac{1}{U}$. Diese Proportionalität ist in Abbildung 3.22 bestätigt, in der v_r gegen U^{-1} geplottet ist. Für $U \gtrsim 8$ folgt v_r in dieser Darstellung einer Geraden, ist also $\propto \frac{1}{U}$. Dies ist der Bereich, in dem der von (2.48) nicht vorhergesagte Doublon-Zerfall nahe-

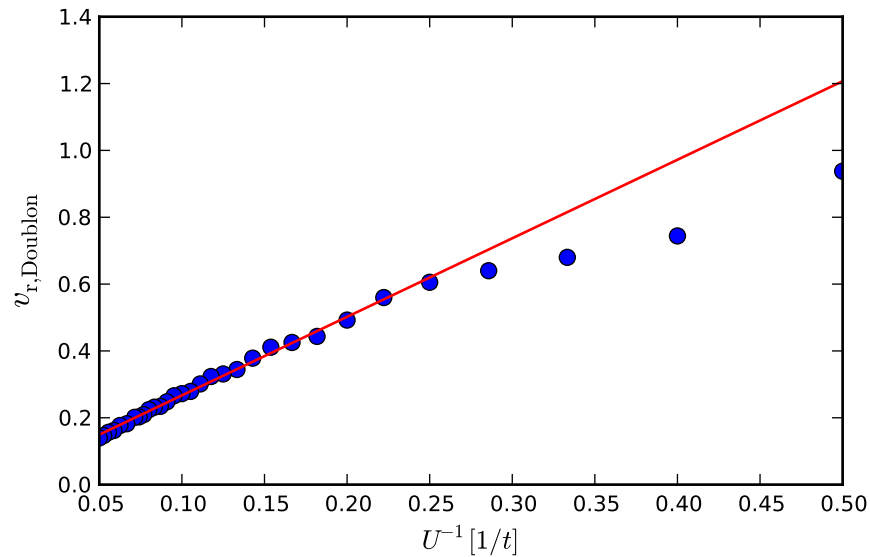


Abbildung 3.23: Doublon-Ausbreitungsgeschwindigkeit $v_{r,\text{Doublon}}$ im Limes großer Zeiten

ungsweise zu vernachlässigen ist, der Einzelteilchen-Anteil also keine Rolle mehr spielt, weswegen die gesamte Ausbreitungsgeschwindigkeit der von (2.48) vorhergesagten Proportionalität folgt. Wie am Anfang dieses Abschnitts erwähnt, beobachtet man auch schon für kleinere U eine Aufspaltung in zwei diskrete Dynamiken. Falls einer dieser Anteile als Doublon-Anteil zu beschreiben ist, würde man von ihm erwarten, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit dieses Anteils $\propto \frac{1}{U}$ ist. Um dies zu bestätigen, definieren wir die Doublon-Breite

$$R_D^2(\tau) := \frac{1}{D(\tau)} \sum_i \langle \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow \rangle (i - i_0)^2 \quad (3.12)$$

und die Doublon-Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$v_{r,\text{Doublon}} := \frac{d}{d\tau} \sqrt{R_D^2(\tau) - R_D^2(0)}. \quad (3.13)$$

Dabei ist (3.12) analog zu (3.7) und (3.13) analog zu (3.8) definiert. Der Unterschied ist, dass (3.12) und (3.13) den Erwartungswert $\langle \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow \rangle = \langle \hat{n}_i^d \rangle$ für die Doublon-Dichte auf der i -ten Site statt der Einteilchen-Dichte verwenden. In Abbildung 3.23 ist $v_{r,\text{Doublon}}$

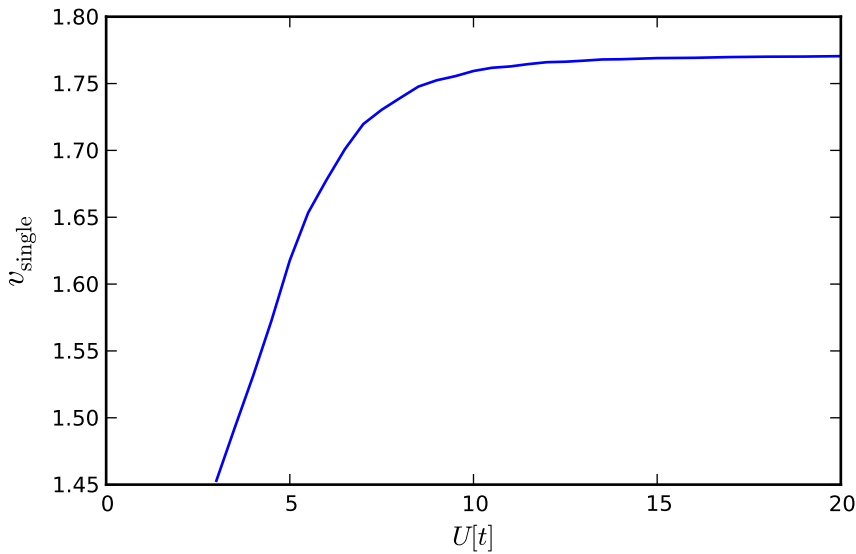


Abbildung 3.24: Einzelteilchen-Ausbreitungsgeschwindigkeit v_{single} für $\tau = 4$

gegen U^{-1} geplottet. Man sieht, dass $v_{r,\text{Doublon}}$ ab $U \gtrsim 3 \propto \frac{1}{U}$ zu verlaufen beginnt. Damit wird die Dynamik durch (2.48) beschrieben, der Begriff Doublon ist also gerechtfertigt. Um zu bestätigen, dass es sich in der Tat um zwei diskrete Dynamiken handelt, müssen wir noch die Geschwindigkeit des Einzelteilchen-Anteils bestimmen und zeigen, dass beide Geschwindigkeiten addiert v_r ergeben. Eine Definition der Einzelteilchen-Geschwindigkeit v_{single} analog zu (3.13) ist problematisch, da bei großen U nur ein sehr kleiner Einzelteilchen-Anteil vorhanden ist und dieser bei $\tau = 4$ etwa die Größe der Schwingungen der Doppelbesetzung hat. Deswegen definieren wir v_{single} geometrisch durch Betrachten der Abbildungen 3.1 bis 3.6. Man sieht, dass die Einzelteilchen-Arme durch eine Lücke bei der Site 7 von den Doublon-Armen getrennt sind. v_{single} wird als die Strecke definiert, die die Einzelteilchen-Arme im Mittel in der Zeit $\tau = 4$ zurückgelegt haben, also

$$v_{\text{single}} := \left(i_0 - \frac{\sum_{i=0}^7 \langle \hat{n}_i \rangle i}{\sum_{i=0}^7 \langle \hat{n}_i \rangle} \right) \tau^{-1}, \tau = 4. \quad (3.14)$$

Diese Größe ist in Abbildung 3.24 für $U \geq 3$ geplottet. Für kleinere U lassen sich Doublon- und Einzelteilchen-Arme nicht klar trennen. Der Verlauf beginnt bei einem Wert $\approx \sqrt{2}$, was die Geschwindigkeit im nicht wechselwirkenden Fall war, steigt dann linear mit U und beginnt bei $U \approx 8$ gegen einen festen Wert zu konvergieren. Der lineare

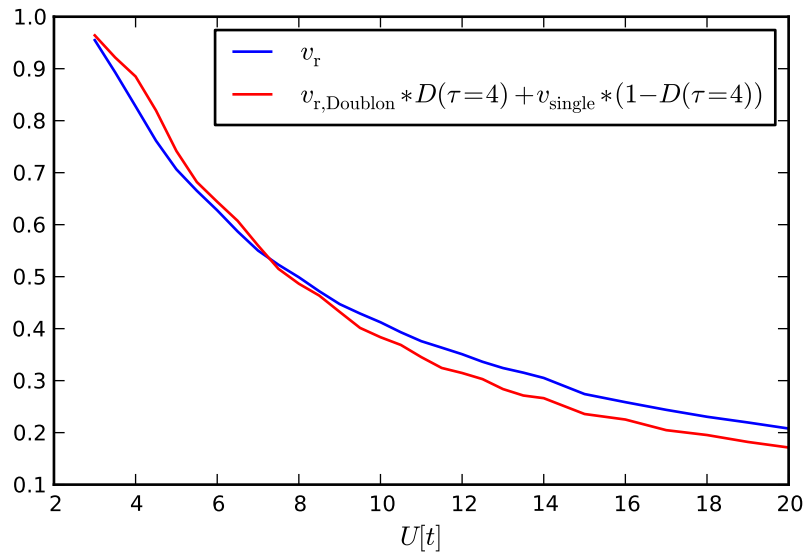


Abbildung 3.25: Vergleich der aus $v_{r,Doublon}$ und v_{single} rekonstruierten Gesamtgeschwindigkeit und der Ausbreitungsgeschwindigkeit v_r

Anstieg lässt sich so verstehen, dass die Anfangsenergie proportional zu U wächst und deswegen auch die kinetische Energie des Einzelteilchen-Anteils größer werden muss, damit das Doublon zerfallen kann. Der letztendlich erreichte Wert $v_{single,max} \approx 1,77$ ist offenbar durch das in Abschnitt 3.1.1 erwähnte Maß der Delokalisierung vorgegeben: Während der Einschwingphase zerfällt das Doublon in die beiden Anteile. Gegen Ende der Einschwingphase haben die Einzelteilchen-Arme eine gewisse Breite erreicht. Die Fouriertransformation dieses Zustandes gibt die kinetische Energie und die Gruppengeschwindigkeit vor. Um also zu beweisen, dass $v_{single,max} \approx 1,77$ in der Tat die maximal mögliche Geschwindigkeit ist, müsste man die Fouriertransformation des Einzelteilchen-Anteils bilden. Dies ist in dieser Arbeit nicht durchgeführt. In Abbildung 3.25 ist einerseits die Ausbreitungsgeschwindigkeit v_r nach (3.8) und andererseits eine aus $v_{r,Doublon}$ nach (3.13) und v_{single} nach (3.14) rekonstruierte Gesamtgeschwindigkeit dargestellt, wobei $v_{r,Doublon}$ und v_{single} nach ihrem Anteil am Gesamtzustand gewichtet wurden. Beide Werte stimmen durchgehend gut überein und belegen, dass die Definitionen sinnvoll sind und diese Dynamik gut beschreiben.

Damit ist insgesamt gezeigt, dass die Dynamik ab $U \gtrsim 3$ in einen Einzelteilchen-Anteil, der durch (2.35) beschrieben wird, und einen Doublon-Anteil, der durch (2.48) beschrieben wird, aufspaltet. Die Einteilung, die am Anfang nach Betrachten des Dichteverlaufs gemacht wurde, kann also präzisiert werden. Die Ergebnisse werden zusammengefasst:

- Im Bereich von $U = 0$ bis $U \approx 1$ wird die Dynamik qualitativ durch (2.35) richtig beschrieben.
- Im Bereich von $U \approx 1$ bis $U \approx 3$ lässt sich das Verhalten weder durch (2.35) noch durch (2.48) oder eine Kombination der beiden beschreiben. Störungstheoretische Ansätze bleiben erfolglos.
- Im Bereich von $U \approx 3$ bis $U \approx 8$ spaltet die Dynamik in der erläuterten Weise auf. Obwohl (2.35) und (2.48) für sich genommen inadequate Beschreibungen darstellen und jeweils für diesen Bereich nicht haltbare Annahmen machen, stellt eine Kombination der beiden die Dynamik richtig dar. Doublons sind nicht vollständig stabil, der erhaltene Anteil verhält sich aber nach (2.48).
- Im Bereich von $U \approx 8$ bis $U \rightarrow \infty$ konvergieren störungstheoretische Ansätze der Ordnung $\frac{1}{U}$. $D(\tau = 4)$, $\tau_{D,\min}$, ω_D und v_r besitzen die Proportionalitäten, die diese Ansätze vorhersagen. Doublons sind stabil.

3.2 Zwei Fermionen in einer harmonischen Falle

In diesem Abschnitt werden die vorhergehenden Betrachtungen auf den Fall zweier Fermionen in einer harmonischen Falle erweitert. Der dafür betrachtete Hamiltonian ist

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_i \frac{1}{2} \hat{n}_i \omega^2 (i - i_0)^2, \quad \tau = 0 \\ \hat{\mathcal{H}} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad \tau > 0.\end{aligned}\tag{3.15}$$

Anstatt einer vollständig doppelbesetzten Site i_0 ist der anfängliche Zustand abhängig von U und ω ausgeschmiert. Für $\omega \rightarrow \infty$ erhält man wieder die Situation des Doublons. Der harmonische Oszillator spiegelt also die Tatsache wider, dass ein Einschlusspotential in der Regel nicht perfekt ist. Ziel des Studiums der Konfiguration ist es, die Anwendbarkeit der in Abschnitt 3.1 gewonnenen Ergebnisse auf anfänglich nur teilweise doppelbesetzte Zustände zu untersuchen. Die Vorgehensweise ist dabei analog.

In den Abbildungen 3.26 bis 3.31 ist der Verlauf der Dichte für ausgewählte U für $\omega = 3$ zu sehen, in den Abbildungen 3.32 bis 3.37 ist er für $\omega = 5$ gezeigt. Bei $\omega = 3$ entspricht der Verlauf für $U = 0$ und $U = 1$ etwa dem der Doublon-Konfiguration. Für $U = 4$ sind die zwei getrennten Arme zu erkennen. Für größere U ähnelt der Verlauf dann wieder dem von $U = 1$ mit zwei dichten äußeren Armen und einer diffusen Mitte. Ein Vergleich mit den Abbildungen 3.38 bis 3.43 begründet dieses Verhalten. Für $U = 0$ oder $U = 1$ entspricht auch hier das Verhalten dem der Doublon-Konfiguration. Für $U = 4$ erkennt man die Struktur der inneren Arme von Abbildung 3.28, wobei die Mitte in einem gewissen Maße von einem diffusen Hintergrund überlagert ist, also keine klare Aufteilung vorhanden ist. Bei größeren U ist insgesamt nur wenig Doppelbesetzung vorhanden. Der Verlauf entspricht zwar dem eines Doublon-Anteils, die Farbkodierungen stimmen jedoch nicht überein. Die Doppelbesetzung scheint auch nach dem ersten Entkopplungsprozess noch weniger zu werden, es ist also offensichtlich kein im Sinne von 3.1 stabiler Doublon-Anteil im Zustand vorhanden. Für $\omega = 5$ ergibt sich im betrachteten Bereich ein anderes Bild. Wie in den Abbildungen 3.32 bis 3.37 zu sehen ist, zeigt sich bis $U = 4$ ein ähnliches Bild mit einer allmählichen Ausbildung zweier Dynamiken. Wegen des stärkeren Einschlusses setzt sich dies jedoch für größere U fort, so dass für $U = 14$ etwa gleich viel Dichte in den inneren und äußeren Armen ist.

Dichteverlauf für $\omega = 3$:

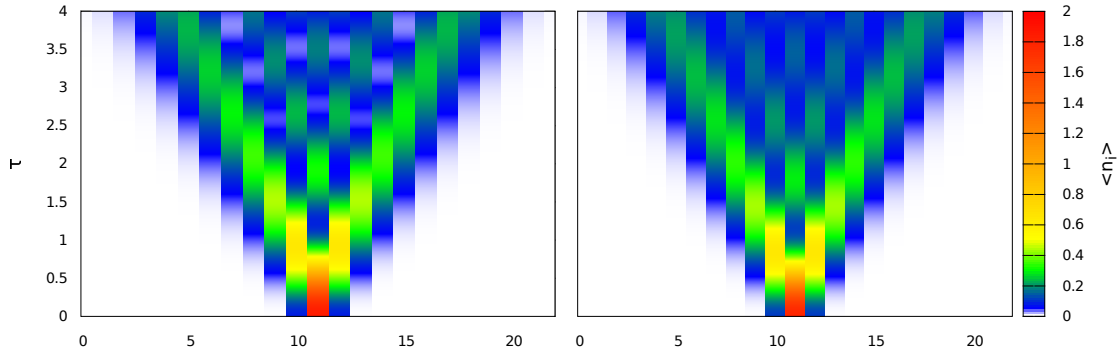


Abbildung 3.26: $U = 0$

Abbildung 3.27: $U = 1$

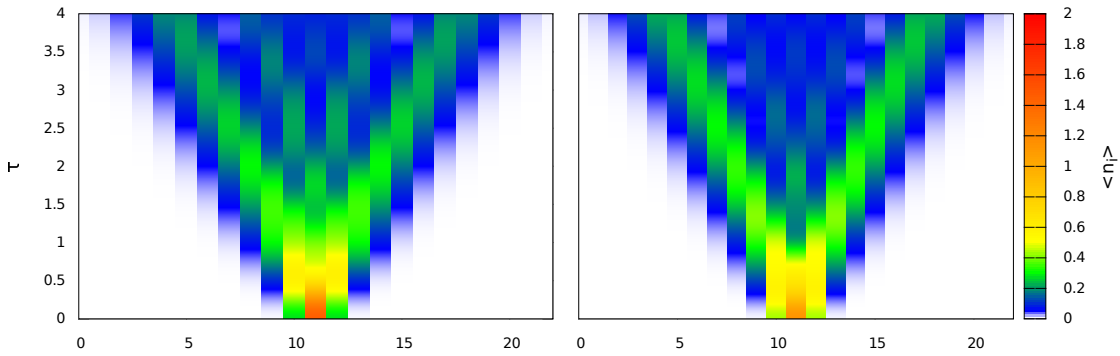


Abbildung 3.28: $U = 3$

Abbildung 3.29: $U = 7$

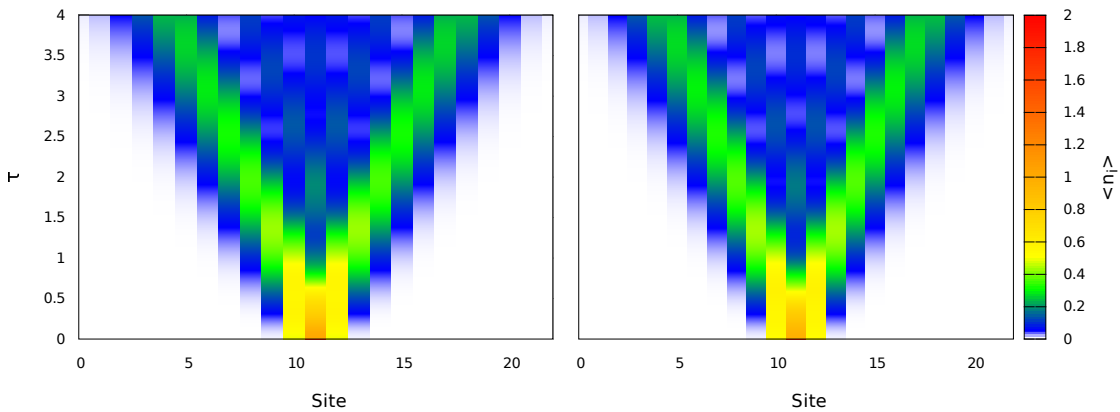


Abbildung 3.30: $U = 10$

Abbildung 3.31: $U = 14$

Dichteverlauf für $\omega = 5$:

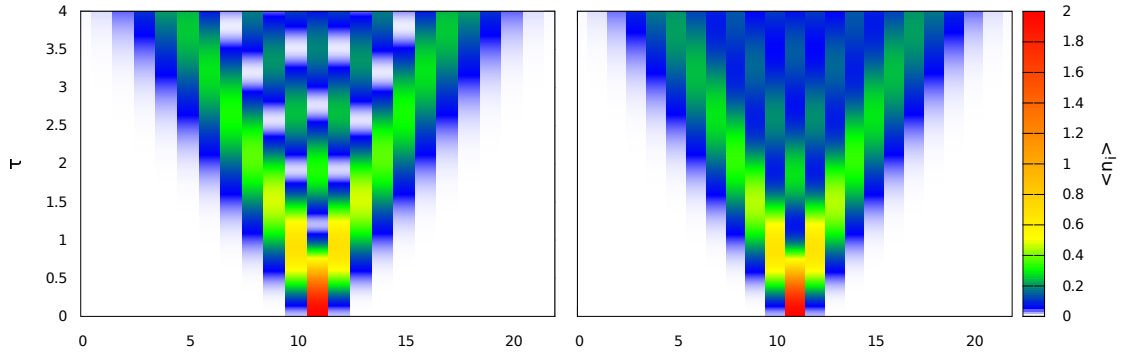


Abbildung 3.32: $U = 0$

Abbildung 3.33: $U = 1$

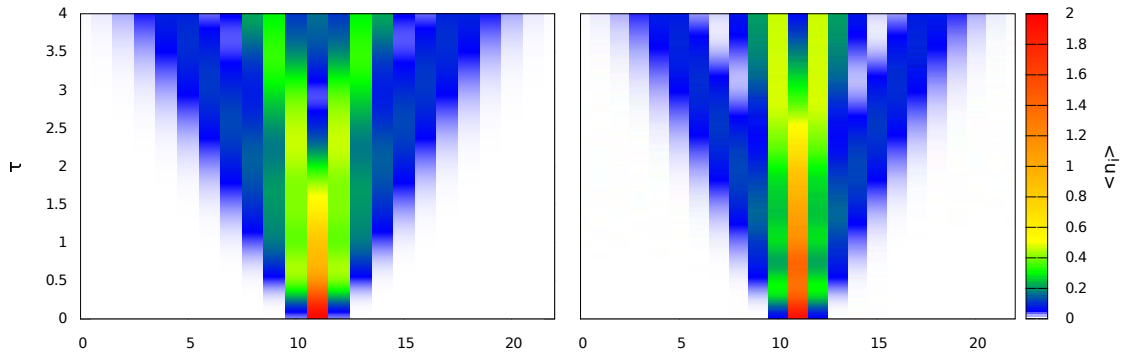


Abbildung 3.34: $U = 4$

Abbildung 3.35: $U = 7$

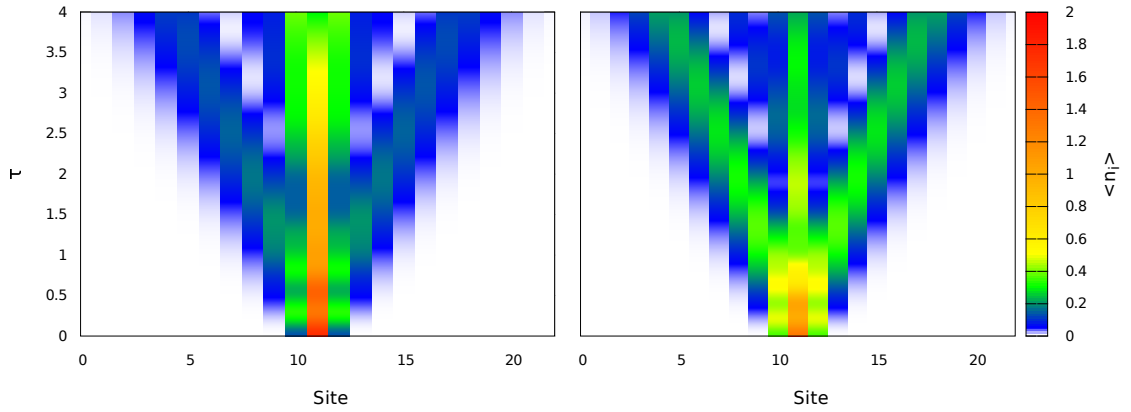


Abbildung 3.36: $U = 10$

Abbildung 3.37: $U = 14$

Verlauf der Doublon-Dichte für $\omega = 3$:

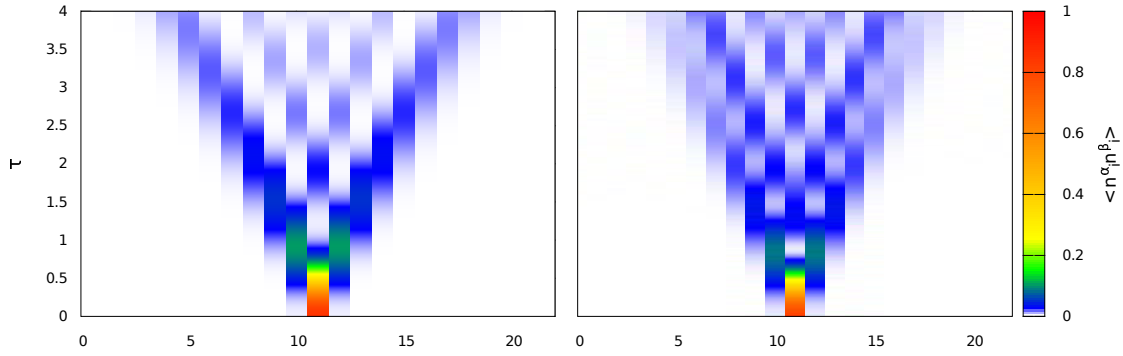


Abbildung 3.38: $U = 0$

Abbildung 3.39: $U = 1$

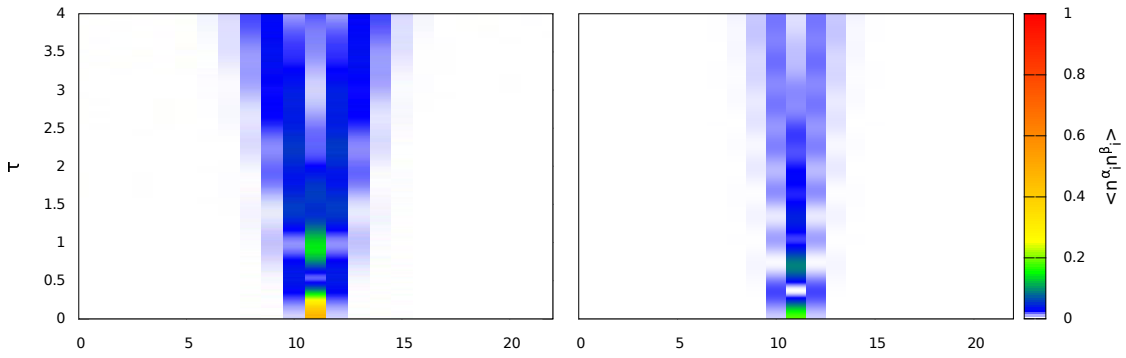


Abbildung 3.40: $U = 4$

Abbildung 3.41: $U = 7$

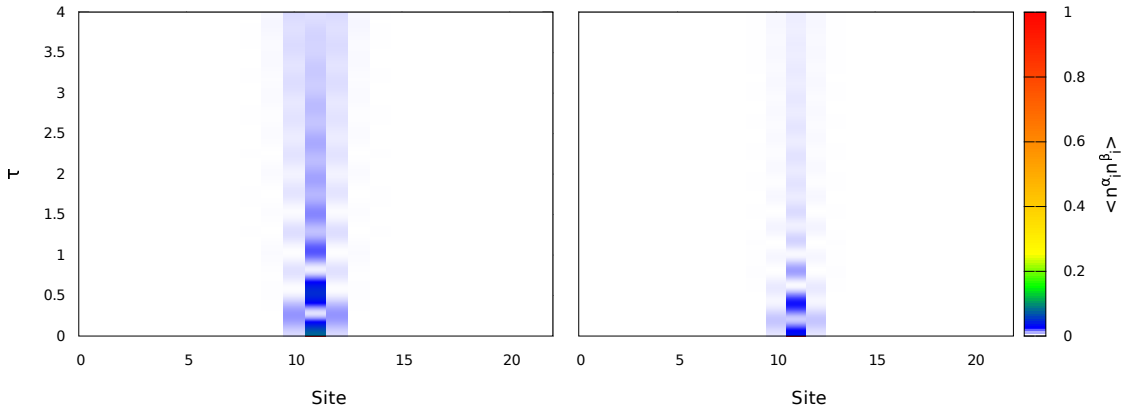


Abbildung 3.42: $U = 10$

Abbildung 3.43: $U = 14$

Verlauf der Doublon-Dichte für $\omega = 5$:

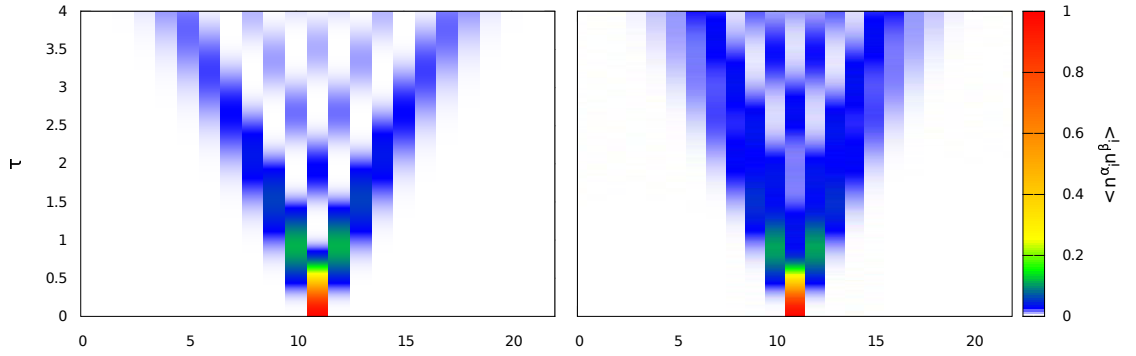


Abbildung 3.44: $U = 0$

Abbildung 3.45: $U = 1$

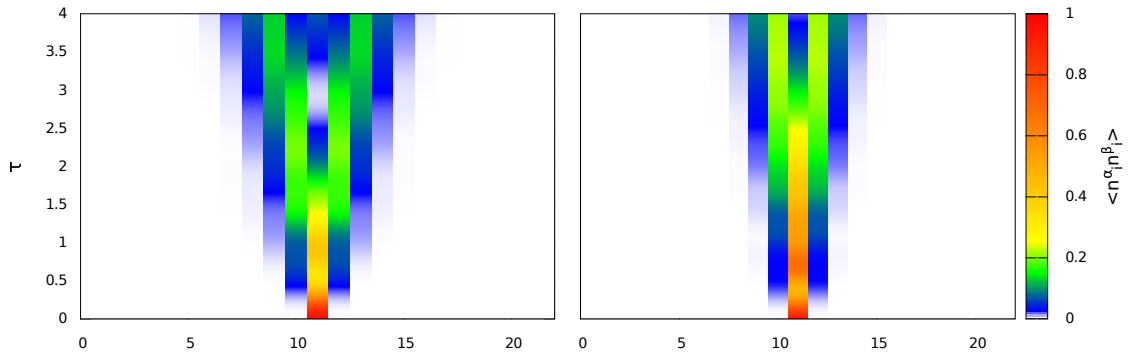


Abbildung 3.46: $U = 4$

Abbildung 3.47: $U = 7$

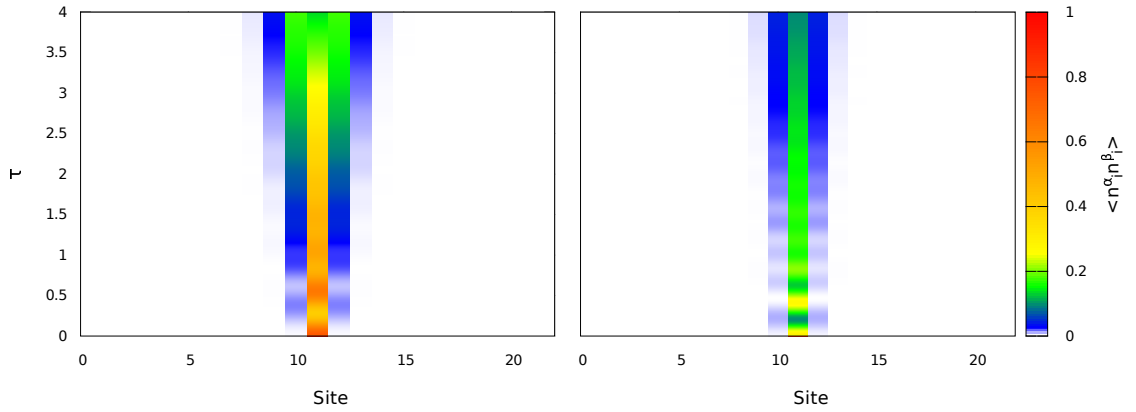


Abbildung 3.48: $U = 10$

Abbildung 3.49: $U = 14$

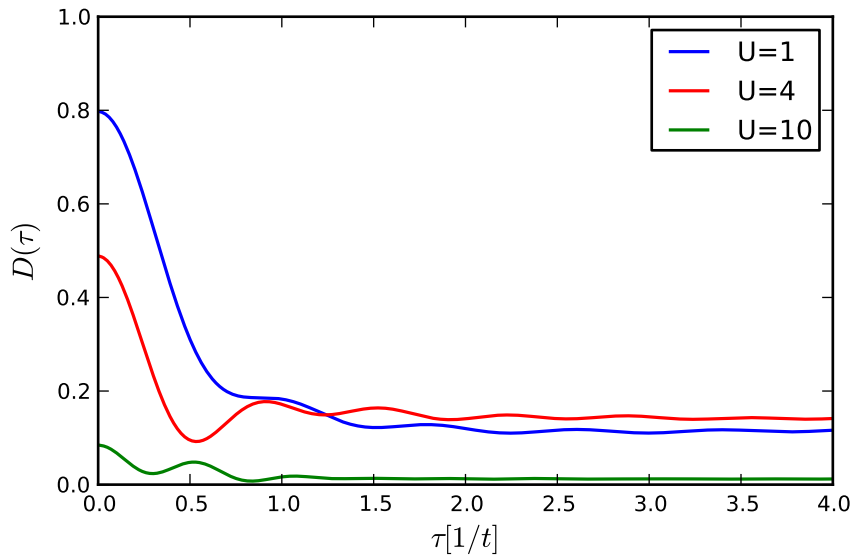


Abbildung 3.50: Verlauf der Doppelbesetzung $D(\tau)$ für $\omega = 3$ in einem System mit $N_b = 23$ Sites

Es ist daher zu vermuten, dass bei $U = 14$ immer noch die Aufteilung in Doublon- und Einzelteilchendynamik gegeben ist. Ein Vergleich mit den Abbildungen 3.44 bis 3.49 zeigt, dass die Übereinstimmung der Farbkodierungen, die zwischen den Abbildungen 3.34 bis 3.36 und 3.46 bis 3.48 noch sehr überzeugend ist, bei den Abbildungen 3.37 bis 3.49 schon leicht eingeschränkt ist.

3.2.1 Zerfallsdynamik

Als ersten Schritt der Betrachtung der Zerfallsdynamik sehen wir uns nun die Entwicklung der Doppelbesetzung für ausgewählte U an. Sie ist in den Abbildungen 3.50 für $\omega = 3$ und 3.51 für $\omega = 5$ dargestellt.

Der Verlauf für $U = 1$ in Abbildung 3.50 ähnelt dem in Abbildung 3.13. Für $U = 4$ erkennt man ebenfalls die für die Trennung der Dynamik übliche Struktur schnellen anfänglichen Abfalls, Erreichen des Minimums und folgender Schwingung um einen Mittelwert, der deutlich über diesem Minimum liegt. Für $U = 10$ bleibt zwar, ähnlich wie z.B. für $U = 1$ in Abbildung 3.13, für größere Zeiten ein etwa konstanter doppelbesetzter Anteil übrig. Nach Erreichen des ersten Minimums schwingt die Kurve jedoch, ebenfalls wie für $U = 1$ in Abbildung 3.13, erst einmal weiter nach unten. Dies deutet eine andere

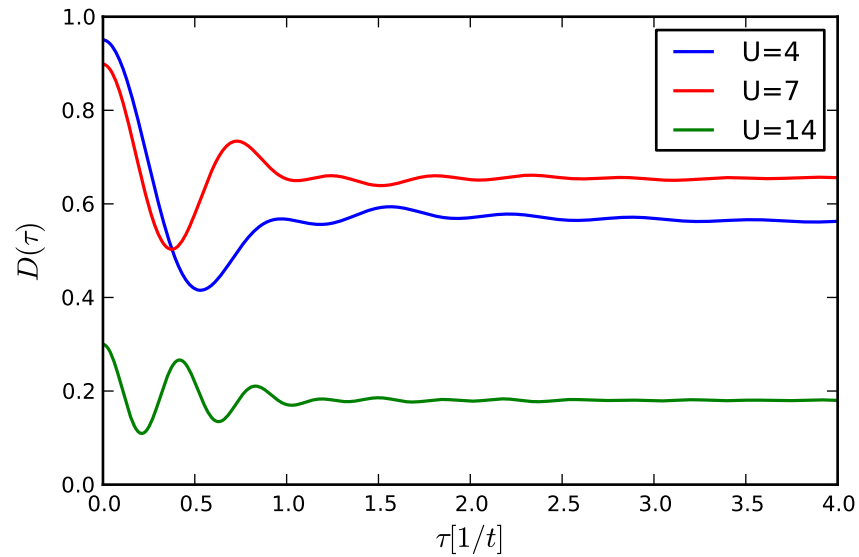


Abbildung 3.51: Verlauf der Doppelbesetzung $D(\tau)$ für $\omega = 5$ in einem System mit $N_b = 23$ Sites

Form der Dynamik an.

Die Ergebnisse für $\omega = 5$ in Abbildung 3.51 bestätigen die Vermutungen des vorherigen Abschnitts. Alle drei Kurven zeigen jeweils das aus Abbildung 3.13 bekannte charakteristische Verhalten. Man vergleiche die Tiefe des Minimums und der letztlich erreichten Dichte für $U = 14$ in 3.51 mit denselben Größen in 3.13 für $U = 12$. Das Minimum in Abbildung 3.13 liegt bei $D \approx 0.9$, was 0.1 unter dem Anfangswert liegt. Das Minimum in Abbildung 3.51 bei $D \approx 0.15$, was 0.15 unter dem Anfangswert liegt. Der erreichte Endwert $D(\tau = 4)$ liegt in Abbildung 3.13 etwa 0.05 unter dem Anfangswert, in Abbildung 3.51 etwa 0.11 unter dem Anfangswert. Trotz der stärkeren Wechselwirkung zerfällt also ein absolut größerer Teil der Doppelbesetzung, es wird also deutlich mehr Wechselwirkungsenergie in kinetische Energie umgewandelt. Ein möglicher Grund ist, dass die anfängliche Ausdehnung es einerseits erlaubt, einen Anfangszustand mit negativer kinetischer Energie einzunehmen und andererseits auch einen höheren möglichen Endwert der kinetischen Energie zulässt.

In Abbildung 3.52 ist der Anteil der erhaltenen Doppelbesetzung für verschiedene ω dargestellt. Der Autor weist erneut darauf hin, dass für einen korrekten Kurvenverlauf

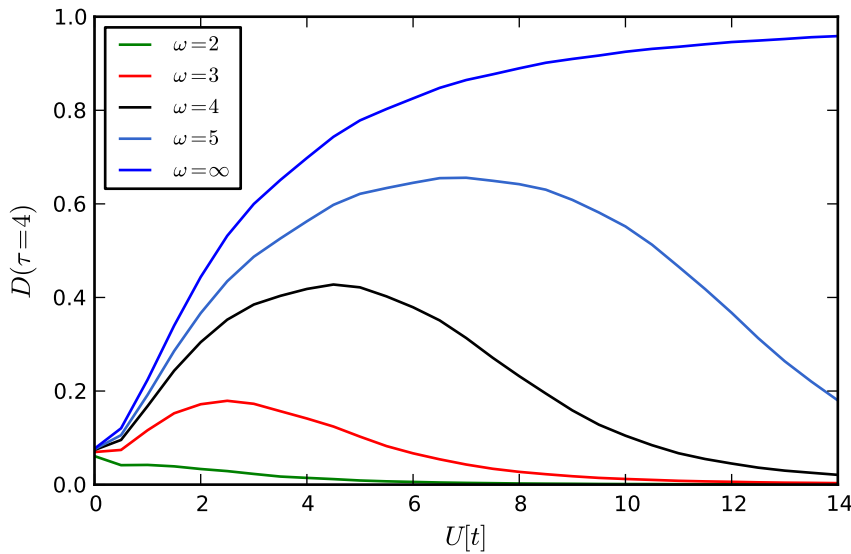


Abbildung 3.52: Anteil der erhaltenen Doppelbesetzung $D(\tau = 4)$ im gleichen System

im Limes großer Zeiten die Kurve von großen U kommend nach 0 durchgezogen werden müsste. Die insgesamt erhaltene Doppelbesetzung erreicht für ein endliches ω bei endlichen U ein Maximum. Dieses Maximum verschiebt sich für größere ω zu größeren U . Es ergibt sich aus dem Wechselspiel zwischen größerer Stabilität von Doublons bei starker Wechselwirkung und der kleiner werdenden Doppelbesetzung im Anfangszustand. Wie eben besprochen, spielt die anfängliche Ausdehnung unabhängig von der jeweiligen Anfangsdoppelbesetzung ebenfalls eine Rolle, da sie größere Unterschiede in der kinetischen Energie ermöglicht. Wir werden sehen, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit stark mit der erhaltenen Doppelbesetzung zusammenhängt.

In Abbildung 3.53 ist die Position des ersten Minimums in der Doppelbesetzung dargestellt, die wir als Maß für die Zeitskala des Entkopplungsprozesses herangezogen hatten. Man erkennt, dass sie unabhängig von ω und damit unabhängig von der anfänglichen Doppelbesetzung ist. Sie ist damit keine Eigenschaft des Zustandes, sondern eine Eigenschaft des Systems selbst. Dies passt zu der in Abschnitt 3.1 gegebenen Begründung durch ein Zeitskalen-Argument aus der Energie des Übergangs zwischen einfach- und doppelbesetzten Zuständen.

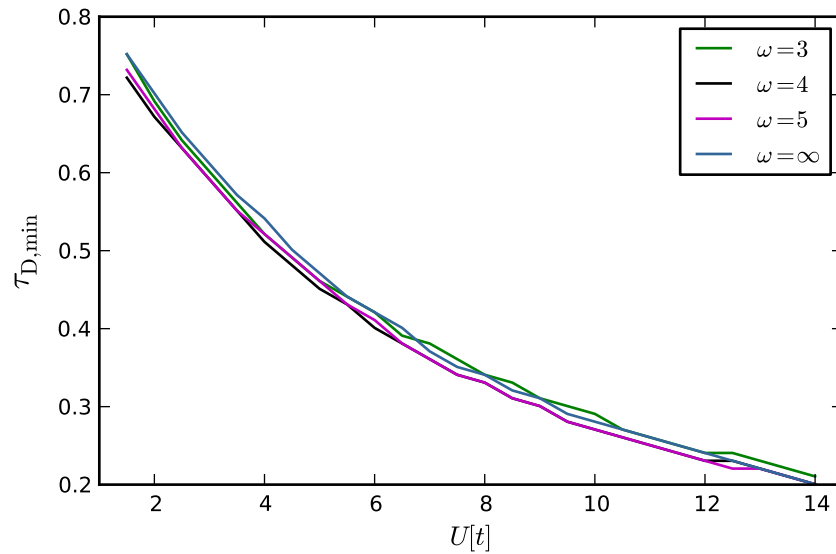


Abbildung 3.53: Zeitskala des anfänglichen Zerfalls der Doppelbesetzung $D(\tau = 4)$ im gleichen System

3.2.2 Ausbreitungsdynamik

Wir wenden uns nun kurz der Ausbreitungsdynamik dieser Konfiguration zu. Dazu nutzen wir die in (3.8) gegebene Definition von v_r , die erneut im Sinne eines Limes großer Zeiten zu verstehen ist. In Abbildung 3.54 ist v_r für verschiedene ω dargestellt. Je kleiner ω , desto kleiner ist v_r bei kleinen U . Ein kleineres ω ermöglicht einen ausgebreiteten Anfangszustand, was nach (3.10) einer kleineren Geschwindigkeit entsprechen kann. Für $\omega = 3, 4$ oder 5 hat die Ausbreitungsgeschwindigkeit ein Minimum, das für größere ω bei größeren U liegt. Sowohl das Minimum von v_r als auch das Maximum der erhaltenen Doppelbesetzung liegen für $\omega = 5$ bei $U \approx 6.5$. Selbiges gilt für $\omega = 4$ mit Maximum und Minimum bei $U \approx 4.5$ und $\omega = 3$ mit Maximum und Minimum bei $U \approx 2.5$. Diese Übereinstimmung kann durch die Dominanz des Einzelteilchen-Anteils verstanden werden. Beim Minimum von v_r für $\omega = 5$ liegt der Anteil der erhaltenen Doppelbesetzung bei etwa 0.6, Einzelteilchen und Doublons haben also einen etwa gleichen Anteil am Gesamtzustand. Für $U = 6.5$ ist die Doublon-Ausbreitungsgeschwindigkeit nach Abbildung 3.23 bei etwa 0.4. Die Einzelteilchen-Ausbreitungsgeschwindigkeit ist von der Größenordnung $\sqrt{2}$. Damit trägt der Einzelteilchen-Anteil etwa 3.5 mal so stark zur Ausbreitungsgeschwindigkeit bei wie der Doublon-Anteil. Der Abfall der erhaltenen

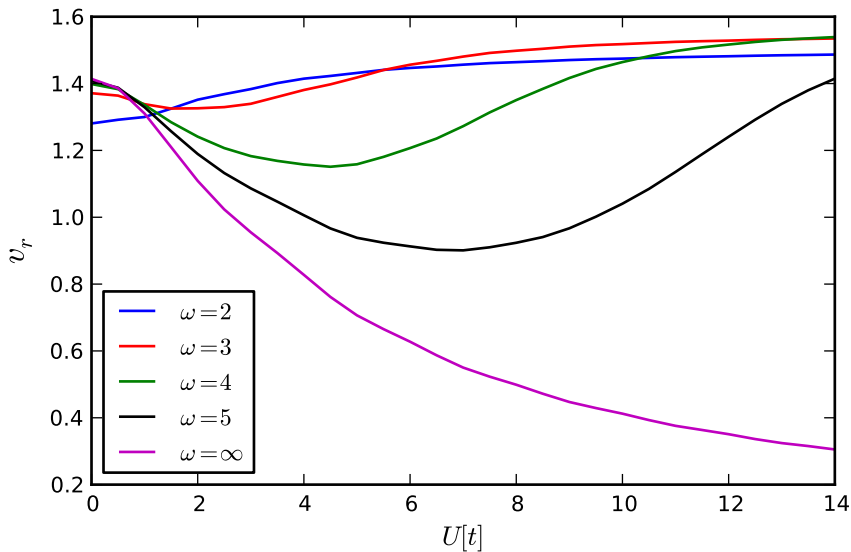


Abbildung 3.54: Ausbreitungsgeschwindigkeit $v_r := \frac{d}{d\tau} \sqrt{R^2(\tau) - R^2(0)}$ zur Zeit $\tau = 4$ für verschiedene ω

Doppelbesetzung für größere U erhöht v_r daher sehr viel schneller als die langsamere Ausbreitungsgeschwindigkeit dieses Anteils v_r verringert.

In Abbildung 3.55 ist die Doublon-Ausbreitungsgeschwindigkeit $v_{r,\text{Doublon}}$ nach der Definition (3.13) für $\omega = 3$ und $\omega = 5$ aufgetragen. Während man für $\omega = 5$ ab $U \approx 3$, 5 eine Konvergenz zur in Abschnitt 3.1 beobachteten Proportionalität zu $\frac{1}{U}$ erkennt, folgt die Kurve für $\omega = 3$ zu keinem Zeitpunkt einem derartigen Verlauf. Die starke Schwankung, durch die $v_{r,\text{Doublon}}$ zwischendurch sogar negative Werte erreicht, deutet darauf hin, dass $v_{r,\text{Doublon}}$ in diesem Bereich keine sinnvolle Größe beschreibt. Die Doppelbesetzung selbst ist in diesem Bereich aber, wie Abbildung 3.50 zeigt, konstant, die Schwankung kommt also nicht durch eine Schwingung des Termes $\frac{1}{D(\tau)}$ in (3.13) zustande. Dies stellt noch einmal den konzeptionellen Unterschied zwischen einem lediglich für lange Zeiten teilweise erhaltenem Anteil der gesamten Doppelbesetzung und einer gemeinsamen Propagation desselben als Quasiteilchen klar. In Abbildung 3.56 ist die Wechselwirkungsenergie E_{WW} zum Zeitpunkt $\tau = 0$ dargestellt. Die horizontale Gerade für $E = 3$ kennzeichnet die aus dem Energieargument folgende Grenze für das Doublon-Verhalten. Während sich die Kurve für $\omega = 5$ ab $U \approx 3$ konstant über diesem Grenzwert befindet, überschreitet

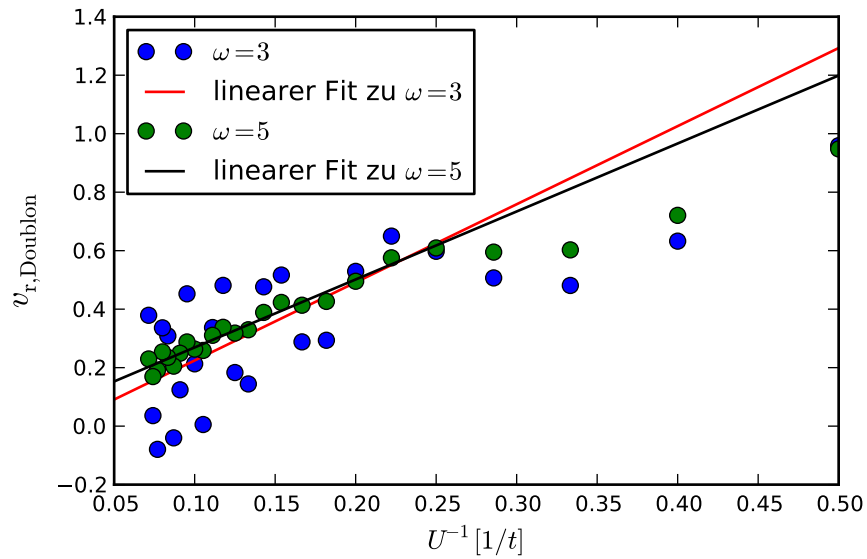


Abbildung 3.55: Doublon-Ausbreitungsgeschwindigkeit $v_{r,\text{Doublon}}$ für $\omega = 3$ und $\omega = 5$ zur Zeit $\tau = 4$

die Kurve für $\omega = 3$ ihn nicht. Es ist daher verständlich, dass $v_{r,\text{Doublon}}$ für $\omega = 3$ der Proportionalität $\propto \frac{1}{U}$ nicht folgt.

Zusammenfassend stellt der Autor fest, dass neben einer Bestätigung einiger Ergebnisse des Abschnitts 3.1 zwei Ergebnisse herauszustellen sind:

- Ist ein relevanter Anteil eines Zustandes nicht doppelbesetzt, so dominiert dieser Anteil die Ausbreitungsgeschwindigkeit im Sinne der Definition (3.8). Die Ausbreitungsgeschwindigkeit wird durch das Wechselspiel zwischen Doublon-Bildung und Doublon-Zerfall bestimmt, die Geschwindigkeit der gebildeten Doublons ist für die Ausbreitungsgeschwindigkeit nicht relevant.
- Eine konstante Doppelbesetzung bei großen U bedeutet nicht automatisch ein Verhalten dieser Doppelbesetzung nach (2.48). Dieses Verhalten ist nur gegeben, wenn dieser Anteil wegen der Energieerhaltung notwendigerweise stabil ist.

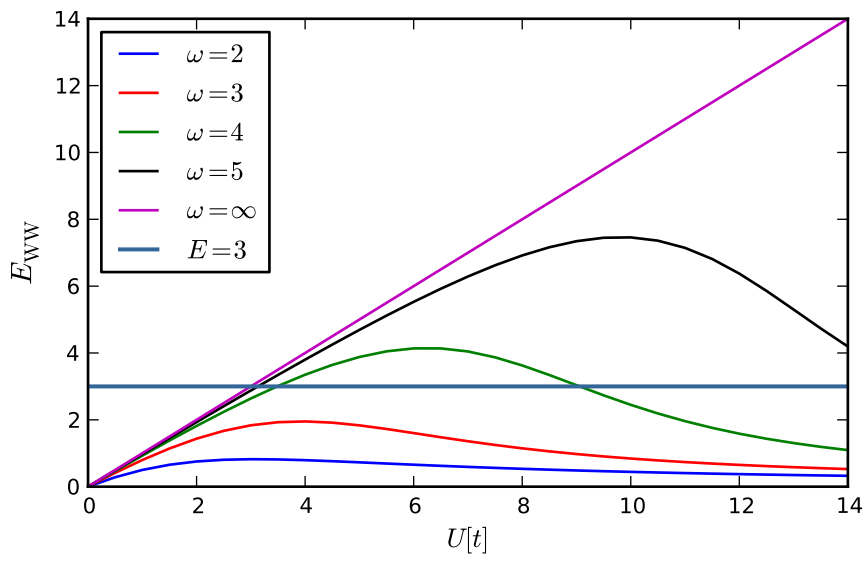


Abbildung 3.56: Wechselwirkungsenergie $E_{\text{WW}} = D(\tau) \cdot U$ für $\tau = 0$

4 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel werden die in dieser Arbeit gewonnenen Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere denkbare Forschungsfelder gegeben.

4.1 Zusammenfassung

Das eindimensionale Hubbard-Modell wurde betrachtet. Zur numerisch exakten Lösung wurde Full CI verwendet. Zuerst wurde die Ausbreitung zweier zu Anfang auf einer Site lokalisierter Fermionen in einer eindimensionalen Kette untersucht. Eine hohe Wechselwirkungsstärke U führt zu einer erhöhten Stabilität des Doublon-Anteils. Die Stabilität wurde durch ein Energieargument begründet. Daraus wurde eine Grenze für Doublon-Verhalten abgeschätzt, die etwa der einfachen Bandbreite des nicht wechselwirkenden Hubbard-Hamiltonians entsprach. Die Eigenschaften des Verlaufes der Doppelbesetzung wurden betrachtet und Proportionalitäten für große U gefunden. Die Grenze des Übergangs zu diesen Proportionalitäten entsprach etwa der doppelten Bandbreite. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit nahm monoton mit U ab. Sie verlief ab einem U , das der doppelten Bandbreite entspricht, nach der Proportionalität, die von einem störungstheoretisch für große U hergeleitetem effektiven Hamiltonian vorhergesagt wurde. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Doublon-Anteils folgte etwa ab der einfachen Bandbreite der vorhergesagten Proportionalität. Die ab der einfachen Bandbreite definierte Ausbreitungsgeschwindigkeit des Einzelteilchen-Anteils hing nur schwach von der Wechselwirkung ab. Zusammen ergaben Einzelteilchen- und Doublon-Ausbreitungsgeschwindigkeit die gesamte Ausbreitungsgeschwindigkeit, was für $U \gtrsim 3$ eine Aufspaltung in Einzelteilchen- und Doublon-Dynamik zeigte. Damit konnte die Dynamik abhängig von der Wechselwirkung in vier Bereiche eingeteilt werden.

Anschließend wurden die Betrachtungen auf den Fall eines anfangs nur teilweise lokalisierten Zustandes erweitert. Für verschiedene Einschlusspotentiale wurde erneut die Zerfalls- und Ausbreitungsdynamik untersucht. Die Eigenschaften der Zerfallsdynamik

wurden anhand der Erklärungen des ersten Abschnitts qualitativ begründet. Die Abhängigkeit der erhaltenen Doppelbesetzung von der Wechselwirkung begründete den Verlauf der Ausbreitungsgeschwindigkeit. Das im ersten Abschnitt für die Abschätzung der Grenze des Doublon-Verhaltens herangezogene Energieargument begründete, warum sich der Doublon-Anteil für ein schwaches Einschlusspotential nicht wie vom effektiven Hamiltonian vorhergesagt verhielt. Dies führte zur Wechselwirkungsenergie im Anfangszustand als Kriterium für Doublon-Verhalten.

4.2 Ausblick

Eine offensichtliche Erweiterung der Doublon-Konfiguration ist die Betrachtung vieler Doublons in einer 1D-Kette. Dies wurde von Kajala *et al.* in [16] durchgeführt. Das Paper findet ebenfalls eine Aufspaltung in Doublon- und Einzelteilchendynamik ab $U \gtrsim 3$. Die genannten Energieargumente gelten wegen der Abwesenheit von einfach besetzten Sites im Anfangszustand unverändert weiter. Für mehrere Teilchen ergibt sich ein Zwei-Flüssigkeiten-Modell für Doublons- und Einzelteilchen. Dieses ist jedoch nicht im Sinne einer Menge von Teilchen zu verstehen, von denen sich manche wie Einzelteilchen und manche wie Doublons verhalten, sondern als Aufteilung der Dynamik der Einzelteilchen- und Doublon-Anteile des Zustandes unabhängig von der Zuordnung zu Teilchen. Dieses Zwei-Flüssigkeiten-Modell ist, wie in Abschnitt 3.2 gezeigt wurde, jedoch kritisch zu sehen, wenn der Anfangszustand auch einen Einzelteilchen-Anteil hat. In diesem Fall ist die Grenze $U \gtrsim 3$ nicht notwendigerweise zutreffend, da die Grenze durch die Wechselwirkungsenergie im Anfangszustand bestimmt wird. Die Anwesenheit von einzelnen Teilchen zusätzlich zu vollständigen Doublons führt jedoch nicht automatisch zu einer Aufweichung der Doublon-Eigenschaften und kann Doublons sogar stabilisieren [12]. Weitere zu studierende Konfigurationen wären

- Ein einzelnes Doublon in 2D oder 3D. Die Dispersionsrelation lautet dort $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$ beziehungsweise $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z))$. Man könnte somit in einer groben Abschätzung Doublon-Verhalten ab $U \gtrsim 6$ beziehungsweise $U \gtrsim 9$ erwarten. Da U aber auf alle Aspekte der Dynamik Einfluss hat, muss diese Annahme nicht zwangsweise korrekt sein.
- Eine 1-D Kette von Fermionen ähnlich zu [8]. Für die Ausbreitungsdynamik einer solchen Konfiguration sollte nach Abschnitt 3.2 primär das genannte Wechselspiel

zwischen Doublon-Bildung und Doublon-Zerfall relevant sein. Dies gilt es zu bestätigen. Insbesondere wären auch die Eigenschaften der dynamischen Ausbildung von Doublons interessant.

- Die Manipulation von Doublons oder der Doublon- und Einzelteilchen-Anteile durch elektrische Felder. Hierbei könnte man untersuchen, wie man Doublons gezielt durch ein Gitter propagieren kann oder ob Doublon- und Einzelteilchen-Anteile eines Zustandes getrennt durch eine geschickte Wahl elektrischer Felder angesprochen werden können.

5 Literaturverzeichnis

- [1] J. Hubbard, Royal Society of London Proceedings Series A **276**, 238 (1963).
- [2] F. Essler, *The One-Dimensional-Hubbard-Model* (Cambridge University Press, 2005).
- [3] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and J. Keller, Phys. Rev. Lett. **85**, 1524 (2000).
- [4] A. Hemmerich and T. W. Hänsch, Phys. Rev. Lett. **70**, 410 (1993).
- [5] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).
- [6] S. Peil, J. V. Porto, B. L. Tolra, J. M. Obrecht, B. E. King, M. Subbotin, S. L. Rolston, and W. D. Phillips, Phys. Rev. A **67**, 051603 (2003).
- [7] P. Rabl, A. J. Daley, P. O. Fedichev, J. I. Cirac, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **91**, 110403 (2003).
- [8] J. P. Ronzheimer, M. Schreiber, S. Braun, S. S. Hodgman, S. Langer, I. P. McCulloch, F. Heidrich-Meisner, I. Bloch, and U. Schneider, Phys. Rev. Lett. **110**, 205301 (2013).
- [9] U. Schneider, L. Hackermüller, J. Ronzheimer, S. Will, S. Braun, I. Best, T. and Bloch, E. Demler, S. Mandt, D. Rasch, and A. Rosch, Nature Physics **8**, 213–218 (2012).
- [10] A. Rosch, D. Rasch, B. Binz, and M. Vojta, Phys. Rev. Lett. **101**, 265301 (2008).
- [11] N. Strohmaier, D. Greif, R. Jördens, L. Tarruell, H. Moritz, T. Esslinger, R. Sensarma, D. Pekker, E. Altman, and E. Demler, Phys. Rev. Lett. **104**, 080401 (2010).
- [12] F. Hoffmann and M. Potthoff, Phys. Rev. B **85**, 205127 (2012).

- [13] D. Hochstuhl, *Multiconfiguration methods for the numerical simulation of photoionization processes of many-electron atoms*, Ph.D. thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel (2013).
- [14] A. Szabo and N. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry* (Dover Publications, 1996).
- [15] A. H. MacDonald, S. M. Girvin, and D. Yoshioka, Phys. Rev. B **37**, 9753 (1988).
- [16] J. Kajala, F. Massel, and P. Törmä, Phys. Rev. Lett. **106**, 206401 (2011).

Erklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst habe, keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, und die Arbeit in keinem anderen Prüfungsverfahren eingereicht habe.

(Ort) (Datum) (Unterschrift)