

# Bose - Hubbardov model kao primjer tehnika dijagonalizacije u višečestičnim sistemima

---

**Filipović, Filip**

**Master's thesis / Diplomski rad**

**2019**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:600240>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2025-03-01**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

Filip Filipović

Bose-Hubbardov model kao primjer tehnika  
dijagonalizacije u višestručnim sistemima

Diplomski rad

Zagreb, 2019.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ  
FIZIKA; SMJER ISTRAŽIVAČKI

**Filip Filipović**

Diplomski rad

**Bose-Hubbardov model kao primjer  
tehnika dijagonalizacije u  
višečestičnim sistemima**

Voditelj diplomskog rada: izv. prof. dr. sc., Robert Pezer

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2019.

Zahvaljujem svome mentoru izv. prof. dr. sc. Robertu Pezeru na  
svoj pomoći pruženoj pri izradi ovog diplomskog rada.

## Sažetak

U ovom radu razmatra se određivanje vlastitih stanja Hamiltonijana i kvantna dinamika u višečestičnim sistemima na primjeru Bose-Hubbardovog modela. Proučavaju se metode generiranja baze prostora stanja sistema te izračuna matrice Hamiltonijana u odabranim reprezentacijama. Nakon potpune specifikacije sistema određuje se energijski spektar i svojstvena stanja. Korištenjem pogodnih tehnika obavlja se povezivanje indeksa vektora stanja i kvantnih brojeva radi učinkovitoga pristupanja i manipuliranja. Ove tehnike su posebno pogodne pri određivanju fizičkih veličina te simuliranju dinamike u kvantnim međudjelujućim sistemima. Nadalje, promatra se ponašanje karakterističnih veličina poput energijskih procjepa, pobuđenja ovakvog sistema u ovisnosti o parametrima Hamiltonijana, očekivane raspodjele čestica i drugih veličina. U radu je dan i pregled formalizma druge kvantizacije te izvod Bose-Hubbardovog modela u tom formalizmu. Isto tako, promatra se i granica beskonačno jakih odbojnih interakcija između bozona kada sustav pokazuje određene sličnosti sa sustavom neinteragirajućih fermiona te se radi mapiranje jednog sustava na drugi. Na kraju se promatra vremenska evolucija sustava bozona u optičkoj rešetki u prisustvu vanjskog potencijala za slučaj stalnog i vremenski promjenljivog potencijala.

Ključne riječi: Bose-Hubbardov model, optička rešetka, ultrahladni kvantni plin, druga kvantizacija, hardcore bozoni, Hamiltonijan, egzaktna dijagonalizacija

# The Bose-Hubbard model as an example of diagonalization techniques in many body systems

## Abstract

This thesis deals with the determination of the eigenstates of the Hamiltonian and quantum dynamics in many-body interacting systems. As an example, the Bose-Hubbard model is used. Methods of generating the basis of system state space and calculation of Hamiltonian matrix in selected representations are studied. After the complete specification of the system, the energy spectrum and the eigenstates are determined. By using the appropriate techniques, the mapping of the vector index and quantum numbers is established for efficient access and manipulation for physical quantities evaluations and simulating dynamics in quantum interacting systems. Furthermore, the expected distribution of particles and momenta are examined, studying the behaviour of characteristic quantities such as energy gaps, the excitation spectra of such a system as a function of the Hamiltonian parameters is determined for a couple of cases. An overview of the formalism of second quantization is given in the paper as well as the derivation of the Bose-Hubbard model in this formalism. Also, the limit of infinitely strong repulsive interactions between the bosons is investigated when the system shows certain similarities with the system of non-interacting fermions onto which it is mapped. In the end, the time evolution of the system of bosons in an optical lattice is investigated in the presence of an external potential in the case of a constant and a time-varying potential.

Keywords: Bose-Hubbard model, optical lattice, ultracold quantum gas, second quantization, hardcore bosons, Hamiltonian, exact diagonalization

# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Ultrahladni kvantni plin u optičkoj rešetci</b>	<b>4</b>
2.1	Plin atoma u optičkim rešetkama . . . . .	4
2.2	Čestica u optičkoj rešetci . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Višečestični kvantnomehanički formalizam</b>	<b>15</b>
3.1	Uvod u drugu kvantizaciju . . . . .	15
3.2	Bose-Hubbardov model . . . . .	25
3.3	Gutzwillerova valna funkcija . . . . .	33
3.4	Harmonička aproksimacija . . . . .	35
3.5	Parametar preskakanja . . . . .	37
3.6	Bogoljubovljeva aproksimacija . . . . .	39
3.7	Gross-Pitaevskii jednadžba . . . . .	43
3.8	Hardcore bozoni . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Numeričko rješavanje Bose-Hubbardovog modela</b>	<b>53</b>
4.1	Egzaktna dijagonalizacija modela . . . . .	53
4.2	Primjer za nekoliko vrijednosti M i N . . . . .	58
4.3	Potencijal s dvostrukom jamom . . . . .	67
4.4	Vremenski promjenjivi potencijal . . . . .	69
<b>5</b>	<b>Zaključak</b>	<b>77</b>
	<b>Dodaci</b>	<b>79</b>
<b>A</b>	<b>Očuvanje kvazi količine gibanja u Bose-Hubbardovom modelu</b>	<b>79</b>
<b>B</b>	<b>Schrödingerova jednadžba s vremenski ovisnim potencijalom</b>	<b>81</b>
	<b>Literatura</b>	<b>84</b>



# 1 Uvod

Jedan od problema i klasične i kvantne fizike je način kako tretirati višečestične međudjelujuće sustave. U tu svrhu razvijene su razne tehnike za opis takvih sustava ovisno o problemu koji se promatra. U ovom radu razmatra se nekoliko takvih metoda s pomoću općenitog Bose-Hubbardovog (BH) modela, u ovom slučaju sustava bozona spina 0 u optičkoj rešetci (OR). Ovakav sistem opisuje fiziku međudjelujućih čestica u periodičnom vanjskom potencijalu. Čestice se u takvom pojednostavljenom sustavu mogu nalaziti na diskretnim mjestima (čvorovima) rešetke te među njima postoji međudjelovanje kao i mogućnost tuneliranja između čvorova [5]. U ovom slučaju moguće je promatrati sustav tako da se vodi evidencija o broju čestica na pojedinom čvoru te iz ovakva opisa izgraditi prostor stanja, u tzv. Fockovoj bazi. Iz toga je dalje moguće odrediti Hamiltonijan sustava i provesti određivanje vlastitih vektora te promatrati određene fizičke veličine od interesa kao i dinamiku sustava za pojedine situacije. Kod konstrukcije Hamiltonijana potrebno je voditi računa o ispravnom obilježavanju (povezivanju indeksa vektora s kvantnim brojevima) i razlikovanju vektora baze. Dobro poznato obilježje kvantnih sustava je da sa povećanjem broja čestica eksponencijalno raste i dimenzija prostora stanja tako da se javlja problem sa zahtjevima za potrebno vrijeme i računalnu memoriju. Dimenzija baze BH sustava  $D$  se može egzaktno kombinatorički odrediti [23]. Pristup u kojem se koristi potpuni Hamiltonijan i na osnovi njega određuju vlastita stanja se naziva egzaktna dijagonalizacija i predstavlja "čist" i izravan pristup fizičkim problemima te ne uključuje nikakve dodatne aproksimacije što ju čini maksimalno preciznom unutar okvira modela koji se promatra [23]. Treba reći da je Bose-Hubbardov model moguće proširiti na čestice sa spinom različitim od 0 te da je osim bozona moguće promatrati i fermione u optičkoj rešetci kada se model naziva Fermi-Hubbardovim.

U pododjeljku 3.1 na stranici 15 dan je pregled formalizma druge kvantizacije koja predstavlja efikasan način za računanje kod višečestičnih problema. Schrödingerova jednadžba za sustav više interagirajućih čestica je najčešće nerješiva ili su njezina direktna rješenja nepraktična za korištenje pa se u drugoj kvantizaciji umjesto traženja valne funkcije sustava naglasak stavlja na jednočestična stanja i njihova zauzeća [9]. Taj formalizam se zatim primjenjuje na BH model čime se dobiva traženi Hamiltonijan u drugoj kvantizaciji. U ovom tekstu se zadržava na pretpos-

tavci da čestice zauzimaju samo najnižu energijsku vrpcu, da je tuneliranje moguće samo između susjednih čvorova te da samo čestice koje se nalaze na istom čvoru međudjeluju.

U poglavlju 2 ukratko su opisane optičke rešetke; kako se eksperimentalno ostvaruju, neke njihove značajke i upotreba, posebno u kontekstu BH modela. Optičke rešetke su nam posebno privlačan sistem za proučavanje međudjelujućih višečestičnih sistema koji su središnja tema u mnogim granama, a posebno fizici kondenzirane tvari jer imaju niz prednosti koje pregledno donosimo u sljedećem usporednom prikazu nekih obilježja:

Optička rešetka	Kristal u čvrstom stanju
potpuna kontrola, bez defekata i/ili neželjenih vibracija	iznimno složen okoliš kondenzirane tvari
rešetka na skali mikrometara	rešetka na skali Ångströma
zatočeni atomi 10-100 amu	masa elektrona amu/1900
temperatura nK	temperatura 100 K i više

Atome u optičkoj rešetci možemo upotrijebiti kao kvantni sustav koji posjeduje niz važnih obilježja elektrona u kristalnoj rešetci uz znatno pristupačnije mjerenje ključnih fizičkih veličina poput magnetskih i električnih polja.

Bose-Einsteinov kondenzat (BEC) je prvi put eksperimentalno postignut 1995. godine [22], a teorijski je predviđen još dvadesetih godina prošlog stoljeća. Uvjet za realizaciju BEC-a je da je de Broglieva valna duljina bozonskih čestica usporediva s prosječnom međučestičnom udaljenošću u sustavu, što se postiže u rijetkim, slabo interagirajućim i jako ohlađenim (ultrahladnim) plinovima na temperaturama blizu apsolutne nule [12, 22]. Tada gotovo sve čestice plina zauzimaju isto, najniže energijsko stanje tvoreći potpuno koherentan val materije što se može detektirati u eksperimentu. Hlađenje čestica na temperature blizu apsolutne nule je neizbježno jer je tada opis i manipulacija sustava čestica u optičkoj rešetci u kvantnom režimu. Jedna od namjera u istraživanjima je koristiti optičke rešetke kao kvantne simulatore, odnosno u relativno dobro kontroliranim i teorijski poznatim sustavima ultrahladnih atoma u optičkim rešetkama isprobavati teorije iz fizike čvrstog stanja [5, 10]. U Poglavlju 3 je također prikazan pristup preko teorije srednjeg polja gdje se uvodi parametar uređenja sustava [13, 14], zatim Gross-Pitaevskii jednadžba koja dobro

opisuje ponašanje BEC-a [7] te Bogoljubovljeva aproksimacija za mala pobuđenja od osnovnog stanja sustava [9].

U potpoglavlju 3.8 opisan je režim Tonks-Girardeauovog plina, odnosno plina bozona vrlo jakih odbojnih interakcija (kontaktnih) kada se na jednom čvoru optičke rešetke može nalaziti najviše jedna čestica [18, 5]. Takav plin dijeli mnoštvo sličnih značajki s plinom neinteragirajućih fermiona te je moguće napraviti mapiranje jednog sustava na drugi pomoću Jordan-Wignerove transformacije [18]. Promatraju se veličine kao što su raspodjela gustoće čestica, raspodjela količine gibanja i zauzeće prirodnih orbitala te njihova evolucija u vremenu.

## 2 Ultrahladni kvantni plin u optičkoj rešetki

### 2.1 Plin atoma u optičkim rešetkama

Optička rešetka nastaje interferencijom laserskih zraka koje se propagiraju u suprotnim smjerovima čime nastaje potencijal koji može zarobiti atome [5]. Interakcijom s električnim poljem lasera u neutralnom atomu se inducira dipolni moment koji zatim međudjeluje s električnim poljem prema izrazu:

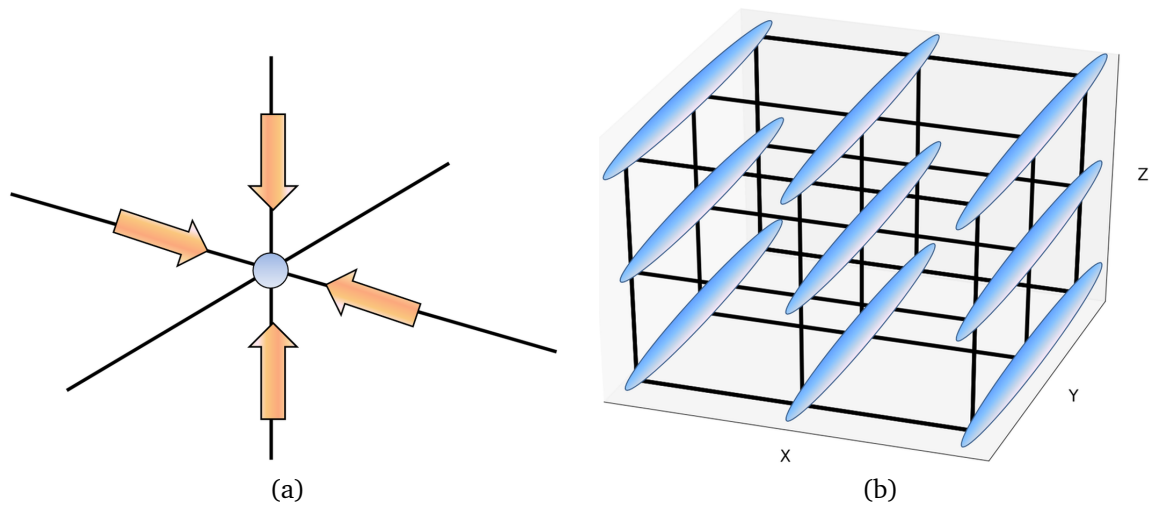
$$V(\vec{r}) = -\vec{p}\vec{E}(\vec{r}) \propto \alpha(\omega_L) \left| \vec{E}(\vec{r}) \right|^2$$

gdje je  $\vec{p}$  dipolni moment atoma,  $\vec{E}(\vec{r})$  električno polje lasera,  $\alpha(\omega_L)$  polarizabilnost atoma, a  $\omega_L$  frekvencija titranja električnog polja [5]. Interferencijom laserskih zraka nastaje optički stojni val koji predstavlja periodični potencijal koji potom može zarobiti atome. Kombiniranjem više laserskih zraka moguće je stvoriti 1D, 2D ili 3D periodične potencijale različitih geometrija ovisno o kutu između zraka. Isto tako, u eksperimentu je moguće mijenjati dubinu potencijala mijenjajući intenzitet laserskih zraka s obzirom da vrijedi  $I \sim \left| \vec{E}(\vec{r}) \right|^2$ . Frekvencija lasera se obično namješta daleko od rezonantne frekvencije atoma kako ne bi došlo do neželjene apsorpcije i emisije zračenja [5]. Jedan mogući oblik periodičnog potencijala koji se može generirati je:

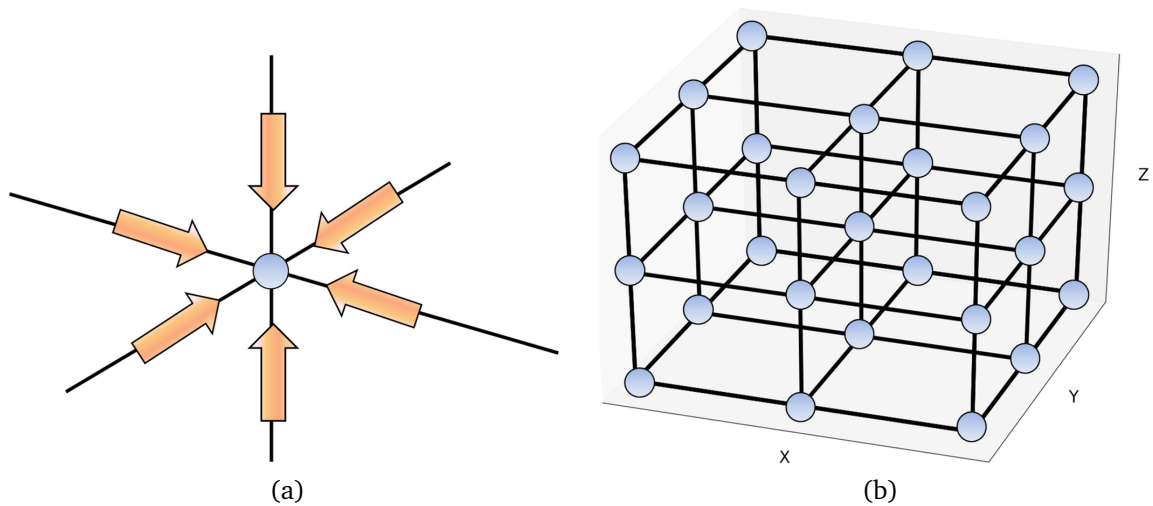
$$V_{lat}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^3 V_{0,i} \sin^2(k_L x_i)$$

gdje su  $k_L = 2\pi/\lambda_L$  valni vektori lasera, a  $V_{0,i}$  dubine potencijala za svaki od tri smjera rešetke te je resultantna rešetka u ovom slučaju kubična. Rešetke u 1D (koje se razmatraju u ovom radu) se dobivaju nametanjem jako dubokih (slika 2.1) potencijala duž dvije osi što rezultira stvaranjem niza "cijevi" u kojima je gibanje ograničeno na samo jednu dimenziju, odnosno kvantna pobuđenja u ravnini sa dubokim potencijalima su jako potisnuta. U posljednjem, slobodnom smjeru se zatim nametne plića periodička rešetka duž koje se promatra dinamika sustava [5]. U slučaju nametanja dubokih potencijala u sva tri smjera (slika 2.2) dobiva se kubična rešetka, odnosno kristal u kojem su čestice zarobljene na pojedinim čvorovima. Prije nametanja vanjskog periodičnog potencijala čestice se obično prvo zarobe potencijalom klopke koji se može aproksimirati harmoničkom funkcijom i koji ne varira previše od jednog

čvora do drugog (slika 2.3). Potencijal klopke također treba uzeti u obzir kod analiza rezultata eksperimenta jer je takav sustav nehomogen i može pokazivati drugačije ponašanje od homogenog slučaja [5, 7]. Ovakav sustav može se eksperimentalno realizirati i ostvariti različite prostorno vremenske konfiguracije iznimno precizno te se mogu promatrati ravnotežni ili neravnotežni fenomeni.



Slika 2.1: Nametanje dubokih potencijala duž dvije osi (a) potiskuje pobuđenja i česticama ostavlja mogućnost gibanja u jednoj dimenziji (b).

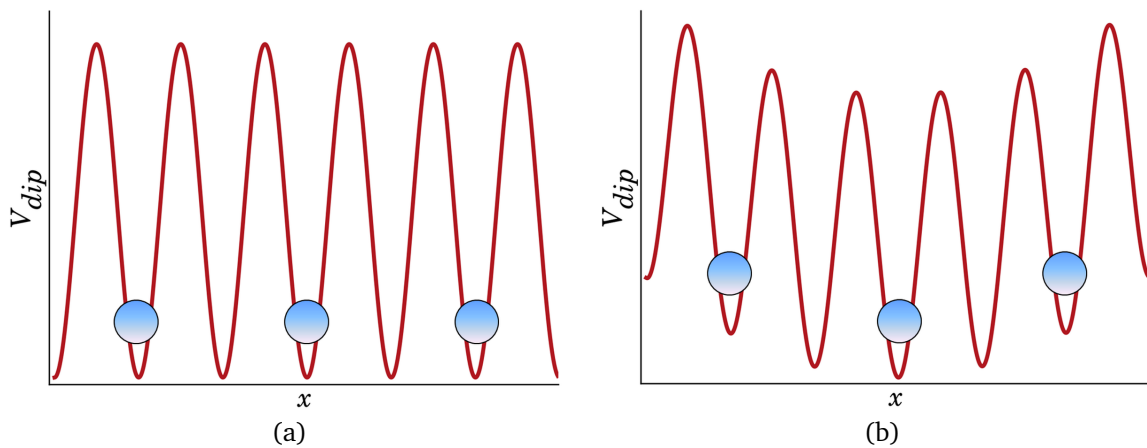


Slika 2.2: Nametanje dubokih potencijala duž sve tri osi (a) zarobljava čestice na njihovim lokacijama (b).

U jednom eksperimentu, primjerice, BEC je zarobljen u svega dvije potencijalne jame između kojih je postojala mogućnost tuneliranja te je mjerena razlika populacija i faza kondenzata u jamama za dva različita režima. U prvom režimu je početna razlika populacija u jamama bila mala te je uočena oscilacija neravnoteže populacija

između dvije jame, dok je u drugom režimu početna razlika populacija bila velika te je ostala gotovo nepromijenjena s vremenom, a razlika faza  $\phi$  između kondenzata se povećavala linearno s vremenom zbog različitih kemijskih potencijala kondenzata,  $\phi = (\mu_1 - \mu_2)t/\hbar$  [5].

U drugom eksperimentu kondenzat je pušten da se propagira kroz optičku rešetku. Količina gibanja valnog paketa se mijenja te je uočen gubitak kondenziranih atoma s njenim povećanjem. Proces počinje kada vrijednost količine gibanja  $q$  prelazi polovicu vrijednosti vektora recipročne rešetke  $q_B$ . To se može objasniti efektivnom masom atoma koja postaje negativna za  $q > q_B/2$  i koja u kombinaciji s odbojnim međudjelovanjem čestica uzrokuje da se sistem ponaša kao da je efektivna masa



Slika 2.3: (a) periodični potencijal optičke rešetke koji zarobljava čestice na diskretnim čvorovima. Čestice međusobno međudjeluju te mogu tunelirati između susjednih čvorova. (b) čestice se u eksperimentu prvo zarobe potencijalom harmoničkog tipa što mijenja izgled ukupnog potencijala.

pozitivna, a međudjelovanje privlačno. Ekstremni slučaj u kojem se ovo javlja je dvostruka jama. Ako u takvom sustavu dođe do neravnoteže populacija čestica u potencijalnim jamama, čestice će, zbog efektivno privlačnog međudjelovanja, težiti povećanju te neravnoteže i prelaziti u jame s više čestica. U rešetci na isti način, zbog dinamičke nestabilnosti, male se fluktuacije u gustoći povećavaju što uzrokuje raspad kondenzata [5].

Sustav čestica zarobljenih u optičkoj rešetci se u slučaju slabih interakcija može dobro opisati Gross-Pitaevskii jednadžbom [22]. Međutim, kada jakost međudjelovanja čestica postane dovoljno velika sistem je složeniji za kvantitativni opis i u prelasku iz jedne granice u drugu javljaju se fenomeni kao što je fazni prijelaz superfluid-Mottov izolator koji zahtijevaju drugačije pristupe problemu [5]. Jedan od istaknutih mo-

dela koji se primjenjuju za opis sustava bozona u optičkoj rešetci je BH model, koji je tema ove teze, i u kojem je Hamiltonijan definiran operatorom [5, 20] u drugoj kvantizaciji:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (2.1)$$

gdje je prvi član kinetička energija i opisuje preskakanje čestica između čvorova u rešetci, a  $a^\dagger(a)$  su operatori stvaranja (poništenja) čestica [5, 23]. Parametri  $J_{ij}$  opisuju vjerojatnost tuneliranja između različitih parova čvorova u rešetci, no, najčešće je dovoljno zadržati se na približenju prvih susjeda gdje se u sumi uzima u obzir samo mogućnost tuneliranja između prvih susjeda (ima ih  $2d$  za kubične rešetke, gdje je  $d$  dimenzija prostora) i unutar iste, najniže, energijske vrpce koju se pretpostavlja da čestice zauzimaju te tada za sve parametre vrijedi  $J_{ij} = J$ . Drugi član u Hamiltonijanu opisuje interakciju čestica sa parametrom jačine interakcije  $U$ , pri čemu su uzete u obzir samo interakcije između čestica na istom čvoru (i unutar iste vrpce) i uračunati su svi parovi čestica na nekom čvoru. Operator  $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$  je operator broja i on daje broj čestica na čvoru  $i$  [5, 23]. Hamiltonijan (2.1) opisuje mrežu čvorova i čestica na njima i tako napisan obuhvaća bilo koji broj dimenzija. Jedna od glavnih razlika između jednodimenzionalnih i višedimenzionalnih sustava je što u 1D sustavima se čestice ne mogu zaobići u slučaju kada primjerice putuju jedna prema drugoj te tako vjerojatnije dolazi do njihove interakcije, što u 2D i 3D sustavima nije slučaj zbog čega 1D i višedimenzionalni sustavi znaju pokazivati znatno drugačije ponašanje. Sustav opisan Hamiltonijanom (2.1) u granici slabih interakcija naspram kinetičke energije  $U/J \ll 1$  tvori Bose-Einsteinov kondenzat u kojemu su čestice delokalizirane preko čitave rešetke (prostorna delokalizacija) čime postaju lokalizirane u impulsnom prostoru. U ovoj granici sustav se može opisati kao val materije i broj atoma po čvoru slijedi Poissonovu distribuciju [5, 20]. U granici jakih interakcija  $U/J \gg 1$ , sustav postaje Mottov izolator i čestice postaju vezane za pojedine lokacije u rešetci te im se broj po čvoru ne mijenja [5, 20]. U eksperimentima se prijelaz iz superfluidnog stanja u Mottov izolator može postići mijenjanjem dubine potencijalne rešetke  $V_0$ . S obzirom da je parametar preskakanja  $J$  puno osjetljiviji na promjene dubine potencijala od parametra interakcije  $U$ , povećanje primjerice dubine potencijala smanjuje vjerojatnost tuneliranja i povećava omjer  $U/J$  čime sustav prelazi u fazu Mottovog izolatora [14, 5].

Za 1D sustav jako interagirajućih bozona (HCB), kada za parametar interakcije vrijedi  $U \rightarrow \infty$ , moguće je napraviti preslikavanje takvog sustava na sustav neinteragirajućih fermiona i tada za valne funkcije vrijedi:

$$\psi_B(x_1, x_2, \dots, x_N) = |\psi_F(x_1, x_2, \dots, x_N)|$$

odnosno bozonska valna funkcija u 1D je jednaka apsolutnoj vrijednosti fermionske za jednak broj čestica [5, 18, 12, 19]. Ovo mapiranje bozonskog sustava na fermionski vrijedi zato jer jako odbojno međudjelovanje kod bozona oponaša Paulijev princip isključenja koji vrijedi za fermione zbog čega sustavi pokazuju sličnosti u direktnom prostoru [5]. Svojstva kao što su energija i gustoća čestica su u ovoj granici identične za bozone i fermione. S druge strane, raspodjela čestica po količini gibanja te prirodne orbitale (svojstvena stanja jednočestične matrice gustoće<sup>1</sup>, više na stranici 46 i izlaganju koje slijedi) su različite za dva slučaja [18]. U eksperimentima je za omjer interakcijske i kinetičke energije sustava  $\gamma = E_{int}/E_{kin}$  postignuto  $\gamma \approx 200$  i za takav sustav se može reći da zadovoljava preduvjete u kojima je mapiranje bozonskog na fermionski sustav korektan opis problema. Takav režim jakog odbojnog međudjelovanja bozona se još naziva i režimom Tonks-Girardeauovog plina [5, 17].

U superfluidnom stanju, koje se postiže u granici  $U/J \rightarrow 0$ , valna funkcija sistema se može zapisati kao produkt lokalnih koherentnih stanja [14]:

$$|\psi(t=0)\rangle = \prod_{i=1}^M e^{-\phi_i^2/2} e^{\phi_i a_i^\dagger} |\text{vac}\rangle = \prod_{i=1}^M e^{-\phi_i^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi_i^n}{\sqrt{n!}} |n_i\rangle \quad (2.2)$$

gdje se promatra sustav s  $M$  čvorova i  $N$  čestica, parametri  $\phi_i$  opisuju lokalno koherentno stanje,  $|n_i\rangle$  su stanja određenog broja čestica na čvoru  $i$ , a  $|\text{vac}\rangle$  je vakuumsko stanje. U eksperimentima se sustav može pripremiti u superfluidnom stanju nakon čega se naglo poveća dubina potencijalne rešetke na iznos koji bi inače odgovarao fazi Mottovog izolatora. Evolucija sistema u vremenu se tada odvija samo s interakcijskim dijelom Hamiltonijana [14]:

$$U(t) = \prod_{i=1}^M e^{iU n_i(n_i-1)t/2}$$

---

<sup>1</sup>Prirodne orbitale možemo promatrati kao efektivna jednočestična stanja.



Za ovisnost valne funkcije o vremenu se tada dobiva:

$$|\psi(t)\rangle = \prod_{i=1}^M e^{-\phi_i^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi_i^n}{\sqrt{n!}} e^{iU n_i(n_i-1)t/2} |n_i\rangle$$

i s obzirom da je  $n_i(n_i - 1)/2$  cijeli broj, valna funkcija će imati periodičnu vremensku ovisnost s periodom  $\tau = 2\pi/U$ . Udio koherentnih atoma će isto tako imati periodičnu ovisnost s istim periodom  $\tau$  [14]:

$$\frac{N_{coh}}{N} = \frac{1}{N} \sum_i |\eta_i(t)|^2$$

gdje je  $\eta_i(t) = \langle \psi(t) | \hat{a}_i | \psi(t) \rangle$ . Stanje dano izrazom (2.2) je superpozicija stanja s različitim brojem čestica, dok je u eksperimentu broj čestica  $N$  zadan. Stoga se za provjeru točnosti opisa sistema koristi početna valna funkcija s fiksnim brojem čestica:

$$|\psi_{BEC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!N^N}} \left( \sum_{i=1}^M \beta_i a_i^\dagger \right)^N |\text{vac}\rangle$$

za koju vrijedi  $|\psi_{BEC}\rangle = P_N |\psi(t=0)\rangle$ , gdje je  $P_N$  projektor na potprostor Hilbertovog prostora s fiksnim brojem čestica  $N$ . Izračuna li se raspodjela količine gibanja za homogeni sistem dobiva se da su rezultati koherentnog i stanja fiksnog broja čestica gotovo identični već za veoma mali broj čvorova  $M \simeq 5$ , dok se u sistemu s klopkom i za  $M = N$  dobiva relativna greška koja ovisi kao  $\sim 1/N$ . Ovaj pristup analizi obnove kvantnih stanja ne uzima u obzir tuneliranje tijekom povećanja dubine potencijala optičke rešetke i utjecaj međučestičnih interakcija koji mijenja izgled početne valne funkcije [14].

Od eksperimentalnih tehnika treba još izdvojiti mjerenja vremena preleta (time of flight - TOF) koja se često koriste [5, 14]. U ovim mjerenjima čestice se puste iz optičke rešetke tako da se rešetka i klopka ugase te čestice potom slobodno ekspanziraju. Interakcije među česticama tijekom ekspanzije se zanemaruju te se pretpostavlja da čestice zadržavaju količinu gibanja koju su imale u optičkoj rešetci [5, 14]. Nakon određenog vremena  $t$  detektira se gustoća čestica iz čega se može rekonstruirati informacija o prostornoj raspodjeli čestica  $n(\vec{r})$  koja je dana izrazom:

$$n(\vec{r}) = \left(\frac{m}{\hbar t}\right)^3 \left| \tilde{w} \left( \vec{k} = \frac{m\vec{r}}{\hbar t} \right) \right|^2 S \left( \vec{k} = \frac{m\vec{r}}{\hbar t} \right)$$

gdje je veličina (strukturni faktor)  $S(\vec{k}) = \sum_{i,j} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \langle a_i^\dagger a_j \rangle$  proporcionalna raspodjeli količine gibanja  $n(\vec{k})$  [14, 18]. Na taj način se iz prostorne raspodjele čestica može izračunati raspodjela količine gibanja čestica u rešetci. Funkcija  $\tilde{w}(\vec{k})$  je Wannierova "omotnica" i odgovara Furierovom transformatu Wannierove funkcije  $w(\vec{r})$  [4]. Za dovoljno duboku optičku rešetku može se valna funkcija čestice na čvoru aproksimirati valnom funkcijom harmoničkog oscilatora te se u računanju raspodjele količine gibanja koristiti Fourierov transformat te funkcije.

## 2.2 Čestica u optičkoj rešetci

Za stjecanje uvida u ponašanje atoma u optičkoj rešetci dobro je prvo promotriti sustav jedne čestice u 1D periodičkom potencijalu. Hamiltonijan takvog sustava je dan sa:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_L(x)$$

gdje se za potencijal može uzeti primjerice  $V_L(x) = V_0 \sin^2(kx)$  i vrijedi  $V_L(x) = V_L(x+a)$ . Rješenja Schrödingerove jednadžbe za periodični potencijal su Blochove funkcije  $\phi_{n,k}(x) = e^{ik\cdot x} u_{n,k}(x)$ , gdje je  $u_{n,k}(x)$  periodična funkcija s periodom jednaki periodu potencijala  $V_L(x)$  ( $u_{n,k}(x) = u_{n,k}(x+a)$ ) [3, 16, 20]. Pošto su potencijal  $V_L(x)$  i funkcije  $u_{n,k}$  periodične funkcije, možemo ih razviti u red po vektorima recipročne rešetke  $G_j = 2\pi j/a$ . Za proizvoljnu energijsku vrpcu vrijedi:

$$V_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} V_j e^{iG_j x}$$

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} u_{k,j} e^{iG_j x}$$

Periodični potencijal  $V_L(x)$  se može odmah razviti u red:

$$V_0 \sin^2(kx) = V_0 (1/2 - e^{iG_1 x}/4 - e^{-iG_1 x}/4)$$

iz čega se mogu iščitati koeficijenti u razvoju. Uvrsti li se u Schrödingerovu jednadžbu pretpostavljeno rješenje, za koeficijente u razvoju funkcije  $u_k(x)$  se dobiva

skup jednadžbi:

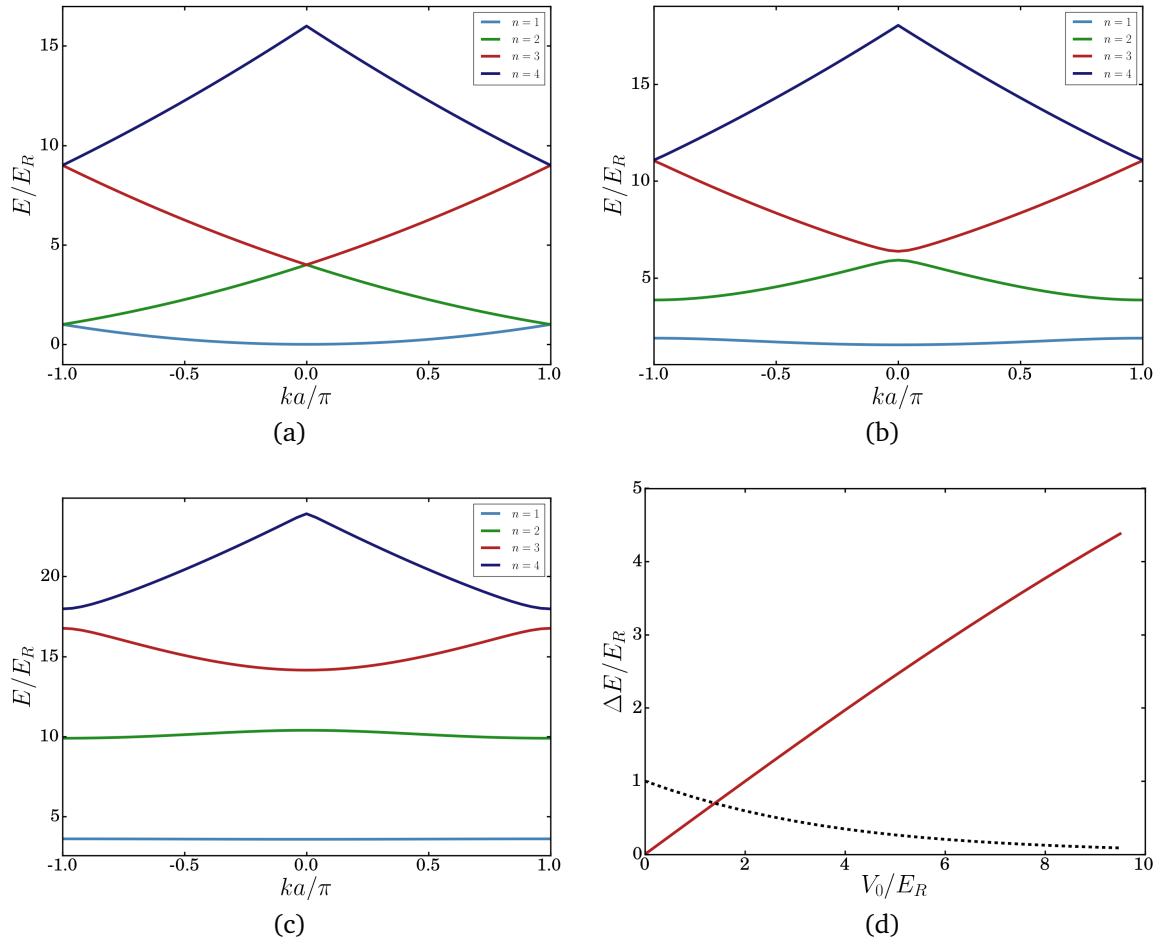
$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( k + \frac{2\pi j}{a} \right)^2 + \frac{V_0}{2} \right] \cdot u_{k,j} - \frac{V_0}{4} u_{k,j-1} - \frac{V_0}{4} u_{k,j+1} = E_k \cdot u_{k,j}$$

koji se može zapisati u matičnom obliku:

$$\begin{pmatrix} \ddots & & & & \ddots \\ \dots & E_{k,j-1}^{(0)} & -V_0/4 & 0 & \dots \\ \dots & -V_0/4 & E_{k,j}^{(0)} & -V_0/4 & \dots \\ \dots & 0 & -V_0/4 & E_{k,j+1}^{(0)} & \dots \\ \ddots & & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ u_{k,j-1} \\ u_{k,j} \\ u_{k,j+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} \vdots \\ u_{k,j-1} \\ u_{k,j} \\ u_{k,j+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

gdje je  $E_{k,j}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k + \frac{2\pi j}{a} \right)^2 + \frac{V_0}{2}$ . Jednadžba (2.3) se može riješiti numerički za konačnu rešetku. Ako optička rešetka ima  $M$  čvorova, tada je kvazi-količina gibanja  $k$  jednoliko raspoređena po prvoj Brillounovoj zoni  $[-\pi/a, \pi/a]$  s razmacima  $dk = \frac{2\pi}{Ma}$ . Matrica u jednadžbi (2.3) je beskonačna pa ju je stoga potrebno odrezati, odnosno odrediti dio koji najviše doprinosi pa ga dijagonalizirati. Pokazuje se da za određeni  $k$  najviše pridonosi dio oko dijagonalnog elementa  $E_{k,j}^{(0)}$  za koji je  $E_{k,j}^{(0)}$  najmanji [3, 20]. Matrica se stoga simetrično odreže oko tog elementa i dijagonalizira te se isto obavi za svaki  $k$  u prvoj Brillounovoj zoni. Rezultati koje odrezana matrica reproducira relativno brzo konvergiraju pa nije potrebna prevelika dimenzija odrezane matrice. Na slici 2.4 su prikazane četiri najniže energijske vrpce za jednu česticu u potencijalu  $V_L(x) = V_0 \sin^2(kx)$  u ovisnosti o dubini potencijala (energija je prikazana u jedinicama  $E_R = \hbar^2 k_M^2 / 2m = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$ ). Za  $V_0 = 0$  razmak između energijskih vrpca iščezava, odnosno dobiva se spektar slobodne čestice upravo što se u ovoj granici treba dobiti. Porastom amplitude periodičnog potencijala vrpce se počinju razdvajati i razmak se povećava s porastom dubine. Isto tako, s porastom dubine potencijala širina energijskih vrpca se smanjuje pa energija u vrpca postaje gotovo konstantna. Na slici 2.4d je prikazana ovisnost najmanjeg razmaka između najniže i prve pobuđene vrpce te širina najniže vrpce gdje se vidi brzi porast razmaka između vrpca i brzo smanjenje širine vrpce s porastom dubine potencijala.

Blochove valne funkcije su delokalizirane preko cijele rešetke pa je za opis čestica



Slika 2.4: Energijske vrpce za jednu česticu u periodičnom potencijalu  $V_L(x) = V_0 \sin^2(kx)$ . (a)  $V_0/E_R = 0$ , (b)  $V_0/E_R = 4$ , (c)  $V_0/E_R = 15$ . Na slici (d) je crnom crtkanom linijom prikazana širina najniže energijske vrpce, a crvenom linijom najmanji razmak između najniže i prve pobuđene vrpce.

koje su lokalizirane na nekom čvoru pogodno koristiti Wannierove funkcije:

$$w_n(\vec{x} - \vec{x}_i) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} \phi_{n,\vec{k}}(\vec{x})$$

gdje je  $M$  broj čvorova u rešetci. Wannierove funkcije su definirane s obzirom na neku lokaciju u rešetci  $\vec{x}_i$  i ovise samo o razlici  $\vec{x} - \vec{x}_i$ . Kao i Blochove funkcije moguće ih je faktorizirati,  $w_n(\vec{x} - \vec{x}_i) = w_{n_x}(x - x_i) w_{n_y}(y - y_i) w_{n_z}(z - z_i)$ , gdje su  $(n_x, n_y, n_z)$  indeksi vrpce po pojedinim osima. Wannierove funkcije nisu jedinstveno definirane zato jer postoji sloboda u izboru faze Blochovih funkcija,  $\phi_{n,\vec{k}}(\vec{x}) \rightarrow e^{i\theta(\vec{k},n)} \phi_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ , što može utjecati na ponašanje Wannierovih funkcija. Za opis čestica koje se nalaze na diskretnim čvorovima u rešetci potrebno je da su i Wannierove funkcije lokalizirane oko tih istih čvorova. Kao kriterij maksimalne lokalizacije Wannierovih funkcija može se odabrati minimiziranje varijance  $\Delta^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ . Moguće je pokazati da su maksimalno lokalizirane Wannierove funkcije uz ovakav kriterij ujedno i realne do na proizvoljnu fazu [15]. Na slikama 2.5 i 2.6 su prikazane maksimalno lokalizirane Wannierove funkcije za dvije najniže energijske vrpce za dubine potencijala  $V_0/E_R = 4$  i  $V_0/E_R = 15$  gdje se vidi da s porastom dubine potencijala Wannierove funkcije postaju jače lokalizirane i da je za više vrpce ovisnost o dubini potencijala manja<sup>2</sup>.

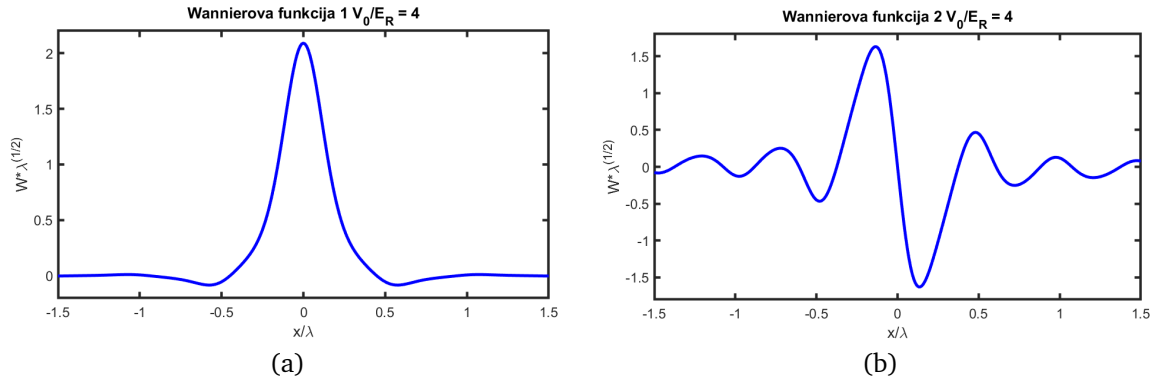
Wannierove funkcije čine bazu na rešetci, ali nisu kao i Blochove funkcije svojstvena stanja Hamiltonijana već vrijedi:

$$\epsilon_n = \langle w_n | \hat{H} | w_n \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}} \langle \phi_{n,\vec{k}} | \hat{H} | \phi_{n,\vec{k}} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}} E_{n,\vec{k}}$$

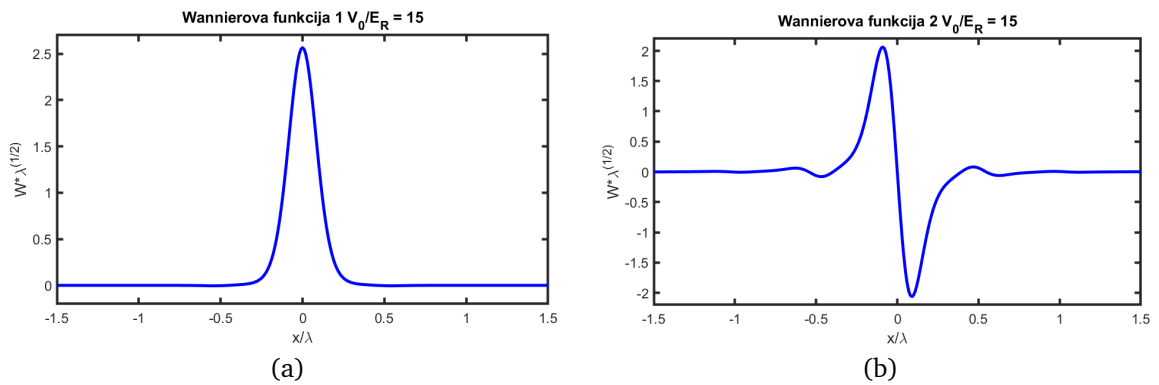
gdje su  $E_{n,\vec{k}}$  svojstvene energije Hamiltonijana koje pripadaju Blochovim stanjima.

---

<sup>2</sup>Za crtanje maksimalno lokaliziranih Wannierovih funkcija korišten je Matlab kod profesora Jakscha, <https://ccpforge.cse.rl.ac.uk/gf/project/mlgws/>. Upute za korištenje su dane u referenci [21]



Slika 2.5: Maksimalno lokalizirane Wannierove funkcije definirane oko točke  $x_i = 0$  za prve dvije najniže vrpce. Dubina potencijala rešetke je  $V_0/E_R = 4$ .



Slika 2.6: Maksimalno lokalizirane Wannierove funkcije definirane oko točke  $x_i = 0$  za prve dvije najniže vrpce. Dubina potencijala rešetke je  $V_0/E_R = 15$ . S porastom dubine potencijala funkcije brže trnu s udaljenosti od čvora  $x_i$ . Za više vrpce ovisnost o dubini potencijala je manja.

## 3 Višečestični kvantnomehanički formalizam

### 3.1 Uvod u drugu kvantizaciju

Druga kvantizacija predstavlja formalizam kojim se opisuju višečestični kvantni sistemi, obično identičnih čestica. Umjesto praćenja pojedinačnih čestica i stanja koja zauzimaju u drugoj kvantizaciji se promatraju stanja i njihova zauzeća s time da u slučaju fermiona može biti najviše jedna čestica u nekom jednočestičnom stanju, dok ih u slučaju bozona može biti više. Tako definirana stanja čine potpuni skup i nazivaju se Fockovim stanjima i sva druga, uključujući i svojstvena stanja, se mogu izraziti preko njih. Osim toga, druga kvantizacija uvodi operatore stvaranja i poništenja čestica u jednočestičnim stanjima kojima se prate i mijenjaju zauzeća tih stanja. Pomoću ovih operatora moguće je izraziti druge operatore kao primjerice Hamiltonijan sustava, kinetičku energiju ili količinu gibanja. Tekst u nastavku ovog potpoglavlja je baziran na izvorima [6] i [9].

Ako imamo dva operatora,  $a$  i  $a^\dagger$ , koja zadovoljavaju relaciju:

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (3.1)$$

od njih možemo konstruirati hermitski operator:

$$a^\dagger a = \hat{n}$$

S obzirom da je operator hermitski svojstvene vrijednosti su mu realne. Promotri li se djelovanje operatora  $\hat{n}$  na svojstveni vektor:

$$\hat{n} |\phi\rangle = \phi |\phi\rangle$$

može se pokazati da su mu svojstvene vrijednosti pozitivne:

$$\phi = \langle \phi | \hat{n} | \phi \rangle = \langle \phi | a^\dagger a | \phi \rangle = \|a |\phi\rangle\|^2 \geq 0$$

Nadalje, upotrebom komutacijske relacije iz jednadžbe 3.1 dobiva se:

$$\hat{n} a |\phi\rangle = \phi a |\phi\rangle + [\hat{n}, a] |\phi\rangle = (\phi - 1) a |\phi\rangle$$

što povlači:

$$a|\phi\rangle \propto |\phi - 1\rangle$$

Na potpuno analogan način se dobiva:

$$a^\dagger|\phi\rangle \propto |\phi + 1\rangle$$

Slijedi, ako je  $\phi$  svojstvena vrijednost, onda su to i  $\phi \pm 1, \phi \pm 2, \dots$ . Za svaki  $m > 0$ ,  $\phi - m$  je svojstvena vrijednost operatora  $\hat{n}$  sve dok vrijedi  $\|(a)^m|\phi\rangle\| \geq 0$ , odnosno dok je  $\phi - m \geq 0$ . Ako je  $|\phi_0\rangle$  svojstveno stanje operatora  $\hat{n}$  s najmanjom svojstvenom vrijednošću, tada vrijedi  $\|a|\phi_0\rangle\| = 0$  jer  $a|\phi_0\rangle$  generira stanje za koje je svojstvena vrijednost  $\phi_0 - 1$  negativna što nije dopušteno. Iz toga slijedi:

$$\langle\phi_0|\hat{n}|\phi_0\rangle = \|a|\phi_0\rangle\|^2 = \phi_0 = 0$$

odnosno najniža svojstvena vrijednost operatora  $\hat{n}$  je 0. Skup svojstvenih vrijednosti operatora  $\hat{n}$  čine brojevi  $0, 1, 2, \dots, \infty$ . Označe li se svojstvena stanja s  $|n\rangle$ , gdje je  $n$  svojstvena vrijednost, slijedi:

$$\|a^\dagger|n-1\rangle\|^2 = \langle n-1|aa^\dagger|n-1\rangle = \langle n-1|a^\dagger a + 1|n-1\rangle = n \quad (3.2)$$

Isto tako:

$$\|a|n\rangle\|^2 = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = n \quad (3.3)$$

Uzmu li se u obzir izrazi (3.2) i (3.3) za djelovanje operatora  $a$  i  $a^\dagger$  slijedi:

$$\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \end{aligned}$$

Proizvoljno svojstveno stanje se tada može zapisati kao:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

Gore opisana algebra, iskoristi li se za opis višestrukih sustava, odgovara bozonskim česticama s obzirom da zauzeće pojedinog stanja može biti proizvoljno veliko.

U slučaju fermiona jedno kvantno stanje može biti popunjeno s najviše jednom



česticom. Zbog toga operatori  $a$  i  $a^\dagger$  zadovoljavaju nešto drugačiju algebru:

$$\begin{aligned}\{a, a^\dagger\} &= 1 \\ \{a, a\} &= 0 \\ \{a^\dagger, a^\dagger\} &= 0\end{aligned}$$

Iz izraza:

$$||a^\dagger |\phi\rangle||^2 = \langle\phi|aa^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle - \langle\phi|a^\dagger a|\phi\rangle = (1 - \phi) \quad (3.4)$$

je vidljivo da mora vrijediti  $\phi \leq 1$ . Nadalje, iz antikomutacijskih relacija slijedi:

$$\hat{n}a|\phi\rangle = a^\dagger aa|\phi\rangle = 0$$

što znači da ili imamo  $||a|\phi\rangle||^2 = \phi = 0$  ili  $a|\phi\rangle \propto |0\rangle$ , odnosno jedna svojstvena vrijednost je  $\phi = 0$  i pripadni svojstveni vektor je  $|0\rangle$ . Promotrimo li:

$$\hat{n}a^\dagger|0\rangle = a^\dagger aa^\dagger|0\rangle = a^\dagger(1 - \hat{n})|0\rangle = a^\dagger|0\rangle$$

vidimo da je druga svojstvena vrijednost  $\phi = 1$  i da vrijedi  $a^\dagger|0\rangle \propto |1\rangle$ . Normalizacija za operator  $a^\dagger$  se može dobiti iz jednadžbe (3.4) stavi li se  $\phi = 0$ . Analogno tome:

$$||a|\phi\rangle||^2 = \langle\phi|a^\dagger a|\phi\rangle = \phi$$

pa sve skupa u slučaju fermiona vrijedi:

$$\begin{aligned}a|1\rangle &= |0\rangle \\ a^\dagger|0\rangle &= |1\rangle \\ a|0\rangle &= 0 \\ a^\dagger|1\rangle &= 0\end{aligned}$$

Kod valne funkcije više identičnih čestica treba uzeti u obzir nerazpoznatljivost čestica, odnosno očekivane vrijednosti opservabli se ne smiju mijenjati na zamjenu čestica. Isto tako, u slučaju fermiona valna funkcija mora biti asimetrična na zamjenu čestica u stanjima zbog Paulijevog principa isključenja, dok bozonska valna funkcija mora

biti simetrična. Valna funkcija sustava više identičnih čestica je dana s izrazom:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \zeta^p |\psi_{p(1)}\rangle |\psi_{p(2)}\rangle \cdots |\psi_{p(N)}\rangle \quad (3.5)$$

gdje je  $N$  ukupan broj čestica, a suma ide po svim permutacijama jednočestičnih valnih funkcija  $|\psi_{p(i)}\rangle$ . Faktor ispred sume normalizira valnu funkciju tako da vrijedi  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ . Za fermione je  $\zeta = -1$  što osigurava asimetričnost ukupne valne funkcije, dok je za bozone  $\zeta = 1$  te je valna funkcija zbog toga simetrična. U slučaju bozona moguće je da više čestica zauzima isto jednočestično stanje pa je potrebna dodatna normalizacija:

$$|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\cdots n_k!}} |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$$

gdje je  $k$  broj različitih jednočestičnih stanja sustava, a  $n_i$  broj čestica u  $i$ -tom stanju. U nastavku se ova normalizacija podrazumijeva bez pisanja. Ako imamo drugo  $N$ -čestično stanje:

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \zeta^p |\chi_{p(1)}\rangle |\chi_{p(2)}\rangle \cdots |\chi_{p(N)}\rangle$$

možemo promotriti skalarni produkt dvaju stanja:

$$\begin{aligned} \langle\chi|\psi\rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \zeta^{P+Q} \langle\chi_{Q(1)}|\psi_{P(1)}\rangle \langle\chi_{Q(2)}|\psi_{P(2)}\rangle \cdots \langle\chi_{Q(N)}|\psi_{P(N)}\rangle \\ &= \sum_p \zeta^p \langle\chi_1|\psi_{P(1)}\rangle \langle\chi_2|\psi_{P(2)}\rangle \cdots \langle\chi_N|\psi_{P(N)}\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

S obzirom da se permutiranjem stanja u valnoj funkciji  $|\chi\rangle$  članovi u sumi ponavljaju, dovoljno je napraviti permutacije u valnoj funkciji  $|\psi\rangle$  i pomnožiti izraz s  $N!$ . Izraz iz jednadžbe (3.6) se može zapisati na drugi način:

$$\langle\chi|\psi\rangle_\zeta = \begin{vmatrix} \langle\chi_1|\psi_1\rangle & \cdots & \langle\chi_1|\psi_N\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle\chi_N|\psi_1\rangle & \cdots & \langle\chi_N|\psi_N\rangle \end{vmatrix}_\zeta$$

gdje se za  $\zeta = -1$  radi o determinanti, dok je za  $\zeta = 1$  gornji izraz permanenta. Dopusti li se fluktuacija broja čestica u sustavu, ukupni prostor stanja postaje direktna

suma po Hilbertovim potprostorima  $\mathcal{H}_i$  s  $i$  čestica:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_N \oplus \cdots$$

gdje se  $\mathcal{H}$  naziva Fockovim prostorom stanja. Proizvoljno stanje  $|\psi\rangle$  u Fockovom prostoru se može zapisati kao suma stanja po potprostorima  $\mathcal{H}_i$ :

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + \cdots + |\psi^{(N)}\rangle + \cdots$$

Za dva stanja iz različitih potprostora mora vrijediti  $\langle\psi^{(m)}|\psi^{(n)}\rangle = 0$ , za  $m \neq n$ . S obzirom da su jednočestična stanja ortonormirana, za skalarni produkt dvaju stanja slijedi:

$$\langle\alpha|\beta\rangle_{\zeta} = \delta_{mn} \begin{vmatrix} \delta_{\alpha_1\beta_1} & \cdots & \delta_{\alpha_1\beta_N} \\ \vdots & & \vdots \\ \delta_{\alpha_N\beta_1} & \cdots & \delta_{\alpha_N\beta_N} \end{vmatrix}_{\zeta}$$

Označimo li s  $|\alpha\rangle = |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$  valnu funkciju u potprostoru s  $N$  čestica, možemo napisati relaciju potpunosti za taj potprostor:

$$\frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \langle\alpha_1, \dots, \alpha_N| = \hat{I}^{(N)}$$

gdje suma ide po svim jednočestičnim stanjima. U slučaju superpozicije stanja s različitim brojem čestica relacija potpunosti glasi:

$$\sum_N \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \langle\alpha_1, \dots, \alpha_N| = \hat{I}$$

gdje su uzeti u obzir svi potprostori.

Ako imamo jednočestično stanje  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_1$ , možemo definirati operator koji stvara česticu u tom stanju:

$$\hat{a}^{\dagger}(\phi) |0\rangle_{\zeta} = |\phi\rangle_{\zeta}$$

U slučaju stanja  $N$  nerazpoznatljivih čestica operator  $\hat{a}^{\dagger}(\phi)$  stvara dodatnu česticu u sustavu koja se nalazi u stanju  $|\phi\rangle$ :

$$\hat{a}^{\dagger}(\phi) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_{\zeta} = |\phi, \psi_1, \dots, \psi_N\rangle_{\zeta} \quad (3.7)$$

Djelovanje operatora adjungiranog operatoru stvaranja možemo dobiti iz izraza:

$$\begin{aligned}
{}_{\zeta} \langle \chi_1, \dots, \chi_{N-1} | \hat{a}(\phi) | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_{\zeta} &= {}_{\zeta} \langle \psi_1, \dots, \psi_N | \hat{a}^{\dagger}(\phi) | \chi_1, \dots, \chi_{N-1} \rangle_{\zeta}^* \\
&= {}_{\zeta} \langle \psi_1, \dots, \psi_N | \phi, \chi_1, \dots, \chi_{N-1} \rangle_{\zeta}^* \\
&= \left| \begin{array}{cccc} \langle \psi_1 | \phi \rangle & \langle \psi_1 | \chi_1 \rangle & \cdots & \langle \psi_1 | \chi_{N-1} \rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle \psi_N | \phi \rangle & \langle \psi_N | \chi_1 \rangle & \cdots & \langle \psi_N | \chi_{N-1} \rangle \end{array} \right|_{\zeta}^*
\end{aligned}$$

Dobiveni izraz je moguće razviti po prvom stupcu pa se dobiva:

$${}_{\zeta} \langle \chi_1, \dots, \chi_{N-1} | \hat{a}(\phi) | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_{\zeta} = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \phi | \psi_k \rangle \langle \chi_1, \dots, \chi_{N-1} | \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_N \rangle$$

gdje  $\hat{\psi}_k$  označava odsutnost stanja  $\psi_k$  iz višestaničnog stanja. Usporedi li se dobivena jednadžba s polaznim izrazom iz (3.7), za djelovanje operatora  $\hat{a}(\phi)$  slijedi:

$$\hat{a}(\phi) | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \phi | \psi_k \rangle | \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_N \rangle$$

Iz gornje jednadžbe se vidi da vrijedi:

$$[\hat{a}(\phi_1), \hat{a}(\phi_2)]_{\zeta} = 0$$

gdje je za  $\zeta = 1$  (bozoni) riječ o komutatoru, a za  $\zeta = -1$  (fermioni) o antikomutatoru. Za operatore stvaranja iz definicije vrijedi:

$$\hat{a}^{\dagger}(\phi_1) \hat{a}^{\dagger}(\phi_2) = \zeta \hat{a}^{\dagger}(\phi_2) \hat{a}^{\dagger}(\phi_1)$$

pa i oni zadovoljavaju:

$$[\hat{a}^{\dagger}(\phi_1), \hat{a}^{\dagger}(\phi_2)]_{\zeta} = 0$$

Preostalu jednakost za  $[\hat{a}(\phi_1), \hat{a}^{\dagger}(\phi_2)]_{\zeta}$  možemo dobiti iz izraza:

$$\begin{aligned}
\hat{a}(\phi_1) \hat{a}^{\dagger}(\phi_2) | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle &= \hat{a}(\phi_1) | \phi_2, \psi_1, \dots, \psi_N \rangle \\
&= \sum_{k=1}^N \zeta^k \langle \phi_1 | \psi_k \rangle | \phi_2, \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_N \rangle + \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle
\end{aligned}$$

Isto tako:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(\phi_2)\hat{a}(\phi_1)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle &= \hat{a}^\dagger(\phi_2) \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \phi_1 | \psi_k \rangle \left| \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_N \right\rangle \\ &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \phi_1 | \psi_k \rangle \left| \phi_2, \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_N \right\rangle\end{aligned}\quad (3.8)$$

iz čega slijedi:

$$[\hat{a}(\phi_1)\hat{a}^\dagger(\phi_2) - \zeta\hat{a}^\dagger(\phi_2)\hat{a}(\phi_1)]|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$$

odnosno (anti)komutacijska relacija glasi:

$$[\hat{a}(\phi_1), \hat{a}^\dagger(\phi_2)]_\zeta = \delta_{\phi_1, \phi_2}$$

Stanja  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$  se u drugoj kvantizaciji prikazuju u N-representaciji zauzeća jednočestičnih stanja  $|n_1, n_2, \dots\rangle$ , gdje je  $n_i$  broj čestica u stanju  $\psi_i$  i vrijedi  $n_1 + n_2 + \dots = N$ , odnosno suma zauzeća svih stanja mora dati ukupan broj čestica u sustavu. U N-representaciji zauzeća (Fockova stanja) djelovanje operatora stvaranja i poništenja čestica u stanjima na normirana stanja sustava je dano sa:

$$\begin{aligned}\hat{a}_\alpha^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1} |n_1, n_2, \dots, n_\alpha + 1, \dots\rangle \\ \hat{a}_\alpha |n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha} |n_1, n_2, \dots, n_\alpha - 1, \dots\rangle\end{aligned}$$

Srednja vrijednost operatora  $\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$  tada daje broj čestica u stanju  $|\psi_\alpha\rangle$ :

$$\hat{n}_\alpha |n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle = n_\alpha |n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle$$

jer je dijagonalan u Fockovoj bazi. Ako se kao jednočestična baza izaberu vlastita stanja operatora položaja ili količine gibanja vrijedi:

$$\begin{aligned}[\hat{a}(\vec{x}_1), \hat{a}^\dagger(\vec{x}_2)]_\zeta &= \delta^d(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \\ [\hat{a}(\vec{p}_1), \hat{a}^\dagger(\vec{p}_2)]_\zeta &= (2\pi)^d \delta^d(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)\end{aligned}$$

gdje je  $d$  dimenzija prostora. Ako imamo superpoziciju dva jednočestična stanja:

$$|\chi\rangle = A|\psi\rangle + B|\phi\rangle \quad (3.9)$$

tada za operatore stvaranja i poništenja vrijede relacije:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\chi) &= A\hat{a}^\dagger(\psi) + B\hat{a}^\dagger(\phi) \\ \hat{a}(\chi) &= A^*\hat{a}(\psi) + B^*\hat{a}(\phi) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Prelazak iz koordinatne u impulsnu reprezentaciju je Fourierov transformat:

$$|\vec{p}\rangle = \int d^d x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \int d^d x |\vec{x}\rangle e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

i obrnuto:

$$|\vec{x}\rangle = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} |\vec{p}\rangle e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

Za operatore stvaranja i poništenja iz izraza 3.9 i 3.10 tada analogno slijedi:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\vec{p}) &= \int d^d x \hat{a}^\dagger(\vec{x}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \\ \hat{a}^\dagger(\vec{x}) &= \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \hat{a}^\dagger(\vec{p}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \end{aligned}$$

Važna klasa operatora definirana djelovanjem na višestruka stanja  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$  se može zapisati kao suma jednočestičnih operatora:

$$\sum_{i=1}^N \hat{O}_i$$

gdje svaki operator  $\hat{O}_i$  djeluje samo na stanje  $i$ -te čestice:

$$\hat{O} |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = |\psi'_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle + \dots + |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi'_N\rangle$$

U slučaju da su stanja  $|\psi_i\rangle$  svojstvena stanja operatora  $\hat{O}_i$  sa svojstvenim vrijednostima  $o_i$  vrijedi:

$$\hat{O} |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = (o_1 + o_2 + \dots + o_N) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$$

Ako su svi jednočestični operatori oblika  $\hat{O}_i = |\alpha\rangle \langle\beta|$ , gdje su  $|\alpha\rangle$  i  $|\beta\rangle$  jednočestična stanja, tada je djelovanje ukupnog operatora  $\hat{O}$  dano sa:

$$\hat{O} |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta = \langle\beta|\psi_1\rangle |\alpha, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle_\zeta + \dots + \langle\beta|\psi_N\rangle |\psi_1, \dots, \psi_{N-1}, \alpha\rangle_\zeta$$

Usporedi li se dobiveno s djelovanjem operatora  $\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta$  iz jednadžbe (3.8):

$$\begin{aligned} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle\beta|\psi_k\rangle |\alpha, \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_N\rangle_\zeta \\ &= \sum_{k=1}^N \langle\beta|\psi_k\rangle |\psi_1, \dots, (\alpha \text{ umjesto } \psi_k), \dots, \psi_N\rangle_\zeta \end{aligned}$$

slijedi da se operator  $\hat{O}$  u ovom slučaju može zapisati kao:

$$\hat{O} = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta$$

Općenito se jednočestični operator može zapisati kao:

$$\hat{O}^{(1)} = \sum_{\alpha, \beta} |\alpha\rangle \langle\alpha| \hat{O}^{(1)} |\beta\rangle \langle\beta|$$

pa za ukupni operator slijedi:

$$\hat{O} = \sum_{\alpha, \beta} \langle\alpha| \hat{O}^{(1)} |\beta\rangle \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta$$

U slučaju da je jednočestični operator dan s dekompozicijom jedinice  $\hat{O}^{(1)} = \hat{I} = \sum_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha|$  za ukupni operator se dobije operator broja čestica u sustavu:

$$\hat{N} = \sum_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$$

U koordinatnoj i impulsnoj reprezentaciji operator glasi:

$$\hat{N} = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \hat{a}^\dagger(\vec{p}) \hat{a}(\vec{p}) = \int d^d x \hat{a}^\dagger(\vec{x}) \hat{a}(\vec{x})$$

Operatori potencijalne energije i količine gibanja su dani s izrazima:

$$\hat{V} = \int d^d x V(\vec{x}) \hat{a}^\dagger(\vec{x}) \hat{a}(\vec{x})$$

$$\hat{P} = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \hat{a}^\dagger(\vec{p}) \hat{a}(\vec{p}) \vec{p} = \int d^d x \hat{a}^\dagger(\vec{x}) (-i\hbar\nabla) \hat{a}(\vec{x})$$

Za Hamiltonijan neinteragirajućih čestica u vanjskom potencijalu  $V(\vec{x})$  se dobiva:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \int d^d x \hat{a}^\dagger(\vec{x}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right] \hat{a}(\vec{x})$$

Osim interakcije s vanjskim poljem, moguće su i interakcije između čestica koje u vrlo važnoj klasi predstavljaju dvočestične operatore. Dvočestični operator djeluje na  $N$ -čestično stanje na sljedeći način:

$$\hat{U} |x_1, \dots, x_N\rangle = \sum_{n < m}^N U(x_n, x_m) |x_1, \dots, x_N\rangle = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m}^N U(x_n, x_m) |x_1, \dots, x_N\rangle \quad (3.11)$$

Iskoristi li se dekompozicija jedinice vektorskog prostora i ortogonalnost vlastitih stanja, operator se može zapisati na način:

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \int dx \int dx' |x, x'\rangle U(x, x') \langle x, x'|$$

Za oblik dvočestičnog operatora u formalizmu druge kvantizacije s obzirom na dosad napisano se može pretpostaviti:

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \int dx \int dx' a^\dagger(x) a^\dagger(x') U(x, x') a(x') a(x)$$

Kako bi se vidjelo da je tako napisan operator ispravan potrebno je prvo promotriti:

$$a(x') a(x) |x_1, \dots, x_N\rangle = a(x') \sum_{n=1}^N \zeta^{n-1} \delta(x - x_n) |x_1, \dots, (\text{bez } x_n), \dots, x_N\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^N \zeta^{n-1} \delta(x - x_n) \sum_{m=1, m \neq n}^N \eta_{mn} \delta(x' - x_m) |x_1, \dots, (\text{bez } x_n, x_m), \dots, x_N\rangle$$



gdje je  $\eta_{mn} = \zeta^{m-1}$  za  $m < n$ , i  $\eta_{mn} = \zeta^m$  za  $m > n$ . Nadalje, vrijedi:

$$\begin{aligned}
& \hat{a}^\dagger(x) \hat{a}^\dagger(x') \hat{a}(x') \hat{a}(x) |x_1, \dots, x_N\rangle = \\
& = \sum_{m,n,(m \neq n)}^N \zeta^{n-1} \eta_{mn} \delta(x - x_n) \delta(x' - x_m) |x, x', x_1, \dots, (\text{bez } x_n, x_m), \dots, x_N\rangle \\
& = \sum_{m \neq n}^N \zeta^{n-1} \eta_{mn} \delta(x - x_n) \delta(x' - x_m) |x_n, x_m, x_1, \dots, (\text{bez } x_n, x_m), \dots, x_N\rangle \\
& = \sum_{m \neq n}^N \delta(x - x_n) \delta(x' - x_m) |x_1, \dots, x_N\rangle
\end{aligned}$$

Množenjem gornje jednadžbe s  $U(x, x')/2$  i integriranjem po  $x$  i  $x'$  dobiva se:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int dx \int dx' a^\dagger(x) a^\dagger(x') U(x, x') a(x') a(x) |x_1, \dots, x_N\rangle = \\
& = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m}^N U(x_n, x_m) |x_1, \dots, x_N\rangle
\end{aligned}$$

što je upravo oblik djelovanja operatora dvočestične interakcije koji smo zadali u (3.11).

### 3.2 Bose-Hubbardov model

Hamiltonijan BH modela u formalizmu druge kvantizacije za čestice spina 0 se definiira izrazom [13]:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (3.12)$$

gdje je  $J$  energija preskakanja, a  $U$  energija međudjelovanja čestica (slično kao u izrazu (2.1) uz ograničenje tuneliranja na prve susjede i dodatak kemijskog potencijala). S  $\mu$  je zadan kemijski potencijal. Dio Hamiltonijana s kemijskim potencijalom se izostavlja ukoliko imamo fiksni broj čestica u sistemu. Ako je sustav nehomogen, kao primjerice u slučaju prisustva vanjske klopke, posljednji član bi poprimio oblik  $\sum_i (\mu - \epsilon_i) \hat{n}_i$ , gdje se uzima u obzir lokalna varijacija kemijskog potencijala. Hamiltonijan iz jednadžbe (3.12) je moguće izvesti iz ekvivalentnog Hamiltonijana

zapisanog formalizmom prve kvantizacije [13]:

$$H = \sum_i \left[ \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V_0 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x}_i) + V_{trap}(\vec{x}_i) \right] + \frac{2\pi\hbar^2 a_s}{m} \sum_{i \neq j} \delta^3(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$

Hamiltonijan sadrži kinetički član, potencijal optičke rešetke, potencijal klopke te kontaktanu dvočestičnu interakciju. Prelazak u drugu kvantizaciju se izvodi projiciranjem gornjeg Hamiltonijana na bozonski operator polja  $\hat{\psi}(\vec{x})$  koji je moguće razviti u bazi Wannierovih funkcija [13, 22]:

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \sum_{i,n} \hat{a}_{i,n} w_n(\vec{x} - \vec{x}_i)$$

gdje je  $w_n(\vec{x} - \vec{x}_i)$  Wannierova funkcija  $n$ -te energijske vrpce lokalizirana oko  $i$ -tog čvora u rešetki, a operator  $\hat{a}_{i,n}$  poništava česticu na lokaciji  $i$  u Wannierovom stanju  $w_n(\vec{x} - \vec{x}_i)$ . Wannierove funkcije se mogu izraziti pomoću Blochovih valnih funkcija koje su rješenja Schrödingerove jednačbe za periodični potencijal:

$$w_n(\vec{x} - \vec{x}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} \phi_{n,\vec{k}}(\vec{x})$$

gdje je  $\phi_{n,\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} u_{\vec{k}}(\vec{x})$  Blochova valna funkcija, a  $u_{\vec{k}}(\vec{x})$  funkcija s periodom jednakim periodu potencijala. S obzirom na strukturu Blochovih funkcija, Wannierove funkcije ovise samo o razlici  $\vec{x} - \vec{x}_i$ . Kinetički dio Hamiltonijana i potencijal optičke rešetke u formalizmu druge kvantizacije glase:

$$\begin{aligned} & \int d^d x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x}) \right] \hat{\psi}(\vec{x}) = \\ & = \int d^d x \sum_{i,n} \hat{a}_{i,n}^\dagger w_n^*(\vec{x} - \vec{x}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x}) \right] \sum_{j,m} \hat{a}_{j,m} w_m(\vec{x} - \vec{x}_j) \\ & = \sum_{i,j,n} J_n(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \hat{a}_{i,n}^\dagger \hat{a}_{j,n} \end{aligned}$$

S obzirom da su Blochove funkcije ortogonalne, zanemare li se interakcije, slijedi da su samo prijelazi unutar iste energijske vrpce dozvoljeni. Općenito, za dovoljno duboke optičke rešetke razmak između najniže i prve sljedeće energijske vrpce postaje velik (vidi sliku 2.4) pa u osnovnom stanju ultrahladne čestice popunjavaju samo najnižu vrpcu  $n = 0$  što je približenje koje se koristi u ovom tekstu. Ovakav mo-

del vrijedi u granici kada je energija po atomu atom-atom međudjelovanja mala prema energiji procjepa između vrpce. Nadalje, pošto Wannierove funkcije za duboke rešetke brzo trnu s udaljenošću od pripadnog čvora uzimaju se u obzir samo koeficijenti preskakanja između bliskih čvorova. Uz sve to za kinetički dio i potencijal optičke rešetke slijedi [13, 20]:

$$\int d^d x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x}) \right] \hat{\psi}(\vec{x}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (3.13)$$

gdje suma ide samo po prvim susjedima, a koeficijent preskakanja je dan sa:

$$J = \int d^d x w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_i) \left( \frac{p^2}{2m} + V_0 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x}) \right) w_0(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad (3.14)$$

Dijagonalni doprinos u izrazu (3.13) je zanemaren zato jer on samo pomiče položaj najniže energijske vrpce. Interakcijski član Hamiltonijana u formalizmu druge kvantizacije glasi:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int d^d x_i \int d^d x_j \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}_j) \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta^3(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \hat{\psi}(\vec{x}_j) \hat{\psi}(\vec{x}_i) = \\ & = \frac{1}{2} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int d^d x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) \\ & = \frac{1}{2} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \sum_{i,j,k,l} \int d^d x w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_i) w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_j) w_0(\vec{x} - \vec{x}_k) w_0(\vec{x} - \vec{x}_l) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \\ & = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} U_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \end{aligned}$$

gdje su koeficijenti  $U_{ijkl}$  dani s izrazom:

$$U_{ijkl} = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int d^d x w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_i) w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_j) w_0(\vec{x} - \vec{x}_k) w_0(\vec{x} - \vec{x}_l)$$

Zbog brzog opadanja Wannierovih funkcija s udaljenošću od čvora oko kojeg su definirane za duboke optičke rešetke, preklapanja Wannierovih funkcija za različite čvorove se mogu zanemariti pa interakcijski član Hamiltonijana postaje:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} U_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l = \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i = \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$$

gdje je koeficijent  $U$  jednak:

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int d^d x |w_0(\vec{x})|^4 \quad (3.15)$$

Parametar  $a_s$  je duljina raspršenja i opisuje amplitudu raspršenja čestica u prvom redu aproksimativnog razvoja, odnosno vrijedi za niske energije. Za potencijal klopke se dobiva:

$$\begin{aligned} \int d^d x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) V_{trap}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_{i,j} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \int d^d x w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_i) V_{trap}(\vec{x}) w_0^*(\vec{x} - \vec{x}_j) = \\ &= \sum_i \hat{n}_i \int d^d x |w_0(\vec{x} - \vec{x}_i)|^2 V_{trap}(\vec{x}) \end{aligned}$$

S obzirom da se potencijal klopke sporo mijenja od jednog čvora do drugog i da Wannierove funkcije brzo trnu zanemarena su preklapanja između različitih čvorova. Potencijal klopke se kombinira s lokalnim kemijskim potencijalom tako da se reproducira zadnji član u Hamiltonijanu (3.12):

$$\mu = \mu_{local} + V_{trap}$$

Za ultrahladni kvantni plin zanimljivo je promatrati dvije granice:

1. granicu jakog međudjelovanja
2. granicu jakog tuneliranja

U granici jakih interakcija i s iščezavajućim tuneliranjem ( $J \rightarrow 0$ ) Hamiltonijan postaje suma nezavisnih doprinosa po čvorovima s energijama [13, 7]:

$$\epsilon(n) = \frac{U}{2} n(n-1) - \mu n \quad (3.16)$$

U ovoj granici čestice ne mogu prelaziti na druge čvorove i sustav je Mottov izolator. Zbog odbojnih međučestičnih interakcija sustav preferira ravnomjernu raspodjelu čestica po čvorovima pa je valna funkcija u ovom slučaju dana sa [20]:

$$|\psi\rangle_{MI} \propto \prod_{i=1}^M |\bar{n}\rangle_i$$

gdje je  $\bar{n} = N/M$  prosječni broj čestica po čvoru. Odnos između kemijskog potencijala

$\mu$  i broja čestica po čvoru u fazi Mottovog izolatora možemo dobiti iz izraza (3.16) i uvjeta stabilnosti sustava  $\delta\epsilon \leq 0$  iz čega slijedi [13]:

$$\begin{aligned}\delta\epsilon &= \epsilon_n - \epsilon_{n\pm 1} \leq 0 \\ \mu_+ &\leq Un \\ \mu_- &\leq U(n-1)\end{aligned}$$

odnosno za određenu popunjenost čvorova rešetke  $n$  kemijski potencijal se nalazi u rasponu  $U(n-1) \leq \mu \leq Un$ .

Druga zanimljiva granica koja se promatra je granica jakog tuneliranja sa zanemarivim međudjelovanjem ( $U \rightarrow 0$ ). U ovoj granici čestice su delokalizirane preko čitave rešetke i sustav poprima obilježja superfluidnoga stanja. Valna funkcija superfluidnog stanja može se dobiti promotri li se operator stvaranja čestice u stanju kvazi-količine gibanja  $\vec{k}$ , koji je s operatorima stvaranja čestica na čvorovima vezan relacijom:

$$\hat{b}_{\vec{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \hat{a}_i^\dagger$$

U osnovnom stanju sustava sve čestice imaju kvazi-količinu gibanja  $\vec{k} = 0$ , pa je valna funkcija superfluida dana sa [7, 14, 20]:

$$|\psi\rangle_{SF} = \frac{(\hat{b}_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M \hat{a}_i^\dagger \right)^N |0\rangle \quad (3.17)$$

Korelacijska funkcija između dvije točke u superfluidnom stanju ne ovisi o relativnoj udaljenosti točaka:

$${}_{SF} \langle \psi | \hat{a}^\dagger(r_2) \hat{a}(r_1) | \psi \rangle_{SF} = \langle N, 0, \dots, 0 | \frac{1}{M} \sum_{k,k'} \hat{b}_k^\dagger e^{-ikr_2} \hat{b}_{k'} e^{ikr_1} | N, 0, \dots, 0 \rangle = \frac{N}{M}$$

zbog čega se kaže da u sustavu postoji dugodosežno uređenje. Za razliku od korelacijske funkcije očekivana vrijednost operatora  $\hat{a}^\dagger(r)$  i  $\hat{a}(r)$  iščezava za valnu funkciju danu izrazom (3.17),  $\langle \psi | \hat{a}^\dagger(r) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{a}(r) | \psi \rangle = 0$ . Zbog toga se uvodi koherentna valna funkcija definirana s:

$$|\psi\rangle = e^{-\alpha^2/2} e^{\alpha \hat{b}_{k=0}^\dagger} |0\rangle \quad (3.18)$$

Pokazuje se da je raspodjela čestica po čvorovima Poissonova,  $p(n) = \frac{\bar{n}^n e^{-\bar{n}}}{n!}$ , parametar  $\alpha$  poprima vrijednost  $\alpha = \sqrt{N}$ . Tada se za očekivanu vrijednost operatora  $\hat{a}^\dagger(r)$  i  $\hat{a}(r)$  dobiva:

$$\begin{aligned}
\phi &= \langle \psi | \hat{a}(r) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{a}^\dagger(r) | \psi \rangle = \\
&= \langle 0 | \left( 1 + \alpha b_0 + \alpha^2 \frac{b_0^2}{2} + \dots \right) e^{-\alpha^2} \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k b_k^\dagger e^{-ikr} \left( 1 + \alpha b_0^\dagger + \alpha^2 \frac{b_0^{\dagger 2}}{2} + \dots \right) | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{M}} \left( 1 - \alpha^2 + \frac{\alpha^4}{2} - \frac{\alpha^6}{6} + \dots \right) \left( \alpha + \alpha^3 + \frac{\alpha^5}{2} + \frac{\alpha^7}{6} + \dots \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{M}} \left( \alpha + \alpha^3 - \alpha^3 + \frac{\alpha^5}{2} - \alpha^5 + \frac{\alpha^5}{2} + \dots \right) \\
&= \sqrt{\frac{N}{M}} = \sqrt{\bar{n}}
\end{aligned}$$

Može se pokazati da je valna funkcija (3.18) u koordinatnoj bazi dana sa [14, 20]:

$$|\psi\rangle = \prod_i^M |\psi_i\rangle, \quad |\psi_i\rangle = e^{-\phi^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}} |n_i\rangle$$

Iz gornje jednadžbe je vidljivo da je raspodjela čestica na čvoru Poissonova. Razlog upotrebe koherentnog stanja (3.18) je što ono olakšava izračune, no, stanje (3.18) nema točno zadan broj čestica. S obzirom da operator ukupnog broja čestica  $\hat{N} = \sum_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$  komutira s Hamiltonijanom (3.12) slijedi da koherentno stanje (3.18) nije svojstveno stanje Hamiltonijana [7]. Unatoč tome, stanje (3.18) ima neke poželjne značajke kao što je očekivani broj čestica:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle &= e^{-\alpha^2} \langle 0 | \left( 1 + \alpha b_0 + \alpha^2 \frac{b_0^2}{2} + \dots \right) \sum_k b_k^\dagger b_k \left( 1 + \alpha b_0^\dagger + \alpha^2 \frac{b_0^{\dagger 2}}{2} + \dots \right) | 0 \rangle \\
&= \left( 1 - \alpha^2 + \frac{\alpha^4}{2} - \frac{\alpha^6}{6} + \dots \right) \left( \alpha^2 + \alpha^4 + \frac{1}{2}\alpha^6 + \frac{1}{6}\alpha^8 + \dots \right) \\
&= \alpha^2 = N
\end{aligned}$$

k tome su fluktuacije broja čestica u termodinamičkoj granici  $N \gg 1$  zanemarive [7]:

$$\Delta N = \left( \langle \psi | (\hat{N} - N)^2 | \psi \rangle \right)^{1/2} = N^{1/2}$$

Za promatranje kvantnog faznog prijelaza između Mottovog izolatora i superfluida može se koristiti aproksimacija srednjeg polja. U sustavu se definira parametar

srednjeg polja  $\phi$  na način [13, 22]:

$$\phi = \langle \psi^{(0)} | \hat{a} | \psi^{(0)} \rangle = \langle \hat{a} \rangle = \langle \hat{a}^\dagger \rangle$$

gdje je  $|\psi^{(0)}\rangle$  valna funkcija osnovnog stanja sustava. Parametar uređenja je za superfluid različit od 0, dok je za Mottov izolator jednak 0. Energija sustava se stoga, prema Landauovoj teoriji faznih prijelaza za male parametre uređenja može razviti u red [11, 20, 14]:

$$E(\phi) = \alpha + \beta |\phi|^2 + \mathcal{O}(|\phi|^4)$$

gdje koeficijenti  $\alpha$  i  $\beta$  ovise o parametrima modela  $\{U, t, \mu\}$ . Za ultrahladni sustav na konstantnoj temperaturi fazni prijelaz se događa kada koeficijent  $\beta$  mijenja predznak u ovisnosti o parametrima sustava. Za male fluktuacije srednjeg polja, operatori stvaranja i poništenja se mogu pogodno zapisati u obliku fluktuacija oko srednjeg polja (parametra uređenja):

$$\hat{a}^\dagger = (\langle \hat{a}^\dagger \rangle + \hat{a}^\dagger - \langle \hat{a}^\dagger \rangle) = (\langle \hat{a}^\dagger \rangle + \delta \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{a} = (\langle \hat{a} \rangle + \hat{a} - \langle \hat{a} \rangle) = (\langle \hat{a} \rangle + \delta \hat{a})$$

Ova transformacija ne mijenja interakcijski dio Hamiltonijana i dio s kemijskim potencijalom jer se operatori broja čestica  $\hat{n}_i$  ne mijenjaju. Za kinetički dio Hamiltonijana ako se zanemare kvadratni članovi u fluktuaciji slijedi [13]:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{kin} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \langle \hat{a}_j \rangle \right) - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle \right] \\ &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( \phi \hat{a}_i + \hat{a}_j^\dagger \phi \right) - \phi^2 \right] \\ &= -2dt \sum_i \left[ \left( \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i \right) \phi - \phi^2 \right] \end{aligned}$$

gdje je  $2d$  broj susjednih čvorova oko svakog pojedinog čvora, a  $d$  dimenzija sustava. Dobiveno je da je u aproksimaciji srednjeg polja Hamiltonijan suma nezavisnih doprinosa po čvorovima:

$$\hat{H}_i = \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i - 2dt \left[ \left( \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i \right) \phi - \phi^2 \right]$$

Kako bi se dobio energijski funkcional  $E(\phi)$  dovoljno je promatrati samo jedan dopri-

nos Hamiltonijana na nekom čvoru. U računu smetnje Hamiltonijan se može rastaviti na način [22, 2]:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \phi \hat{H}^{(1)}$$

gdje su:

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(0)} &= \frac{U}{2} \hat{n} (\hat{n} - 1) - \mu \hat{n} + 2dt\phi^2 \\ \hat{H}^{(1)} &= -2dt (\hat{a}^\dagger + \hat{a})\end{aligned}$$

Energija se u računu smetnje razvija po potencijama parametra smetnje:

$$E_n = E_n^{(0)} + \phi E_n^{(1)} + \phi^2 E_n^{(2)} + \dots$$

Svojevstvena stanja nesmetanog dijela Hamiltonijana su stanja broja čestica na čvoru  $|n\rangle$ . Popravak energije u prvom redu računa smetnje iščezava:

$$E_0^{(1)} = \langle n | -2dt (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n \rangle = 0$$

U drugom redu računa smetnje se dobiva [22, 14]:

$$\begin{aligned}E_0^{(2)} &= \sum_{n \neq \bar{n}} \frac{|\langle \bar{n} | \hat{H}^{(1)} | n \rangle|^2}{E_{\bar{n}} - E_n} = \frac{|\langle \bar{n} | 2dt\hat{a}^\dagger | \bar{n} + 1 \rangle|^2}{E_{\bar{n}} - E_{\bar{n}+1}} + \frac{|\langle \bar{n} | 2dt\hat{a} | \bar{n} - 1 \rangle|^2}{E_{\bar{n}} - E_{\bar{n}-1}} \\ &= \frac{4d^2t^2(\bar{n} + 1)}{\mu - U\bar{n}} + \frac{4d^2t^2\bar{n}}{U(\bar{n} - 1) - \mu}\end{aligned}$$

gdje je  $\bar{n}$  popunjenje svakog čvora u rešetci u fazi Mottovog izolatora. Prelaskom u superfluidnu fazu broj čestica na čvorovima u rešetci nije više nužno isti i to je upravo doprinos energiji u drugom redu računa smetnje. Energija razvijena po parametru uređenja sada glasi:

$$E(\phi) = \frac{U}{2} \bar{n} (\bar{n} - 1) - \mu \bar{n} + \left( \frac{4d^2t^2(\bar{n} + 1)}{\mu - U\bar{n}} + \frac{4d^2t^2\bar{n}}{U(\bar{n} - 1) - \mu} + 2dt \right) \phi^2 + \mathcal{O}(\phi^4)$$

Uvjet faznog prijelaza je da član uz  $\phi^2$  iščezava [22, 20, 14]:

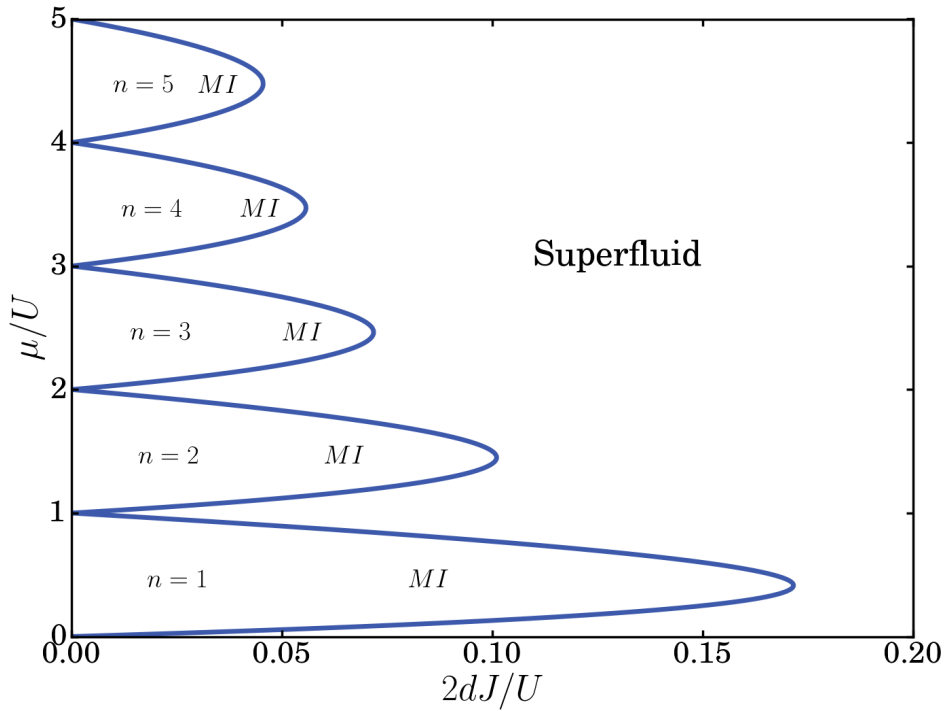
$$\frac{4d^2t^2(\bar{n} + 1)}{\mu - U\bar{n}} + \frac{4d^2t^2\bar{n}}{U(\bar{n} - 1) - \mu} + 2dt = 0$$



Rješenje gornje jednačbe je:

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{2} [U(2n - 1) - 2dt] \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 - 4dtU(2n + 1) + 4d^2t^2} \quad (3.19)$$

Dobivena jednakost definira fazni prijelaz između Mottovog izolatora i superfluida ovisno o parametrima sustava  $\{U, t, \mu\}$  za neki broj čestica po čvoru  $\bar{n}$  u fazi Mottovog izolatora. Na slici 3.1 je prikazana granica između faza gdje se vidi da se s porastom  $\bar{n}$  smanjuje područje koje odgovara Mottovom izolatoru.



Slika 3.1: Fazni dijagram u aproksimaciji srednjeg polja zadan jednačbom (3.19). Unutar izbočenih dijelova sustav je Mottov izolator, dok je izvan njih superfluid.

### 3.3 Gutzwillerova valna funkcija

Za analizu faznog prijelaza između superfluida i Mottovog izolatora moguće je koristiti Gutzwillerovu valnu funkciju zbog svoje numeričke praktičnosti (analizirali su se sustavi veličine i do  $65^3$  čvorova) uz netrivialnu fiziku [14, 7]:

$$|\psi_G\rangle = \prod_i^M \left( f_0 + f_1 b_i^\dagger + f_2 \frac{b_i^{\dagger 2}}{\sqrt{2}} + \dots \right) |0\rangle = \prod_i^M \left[ \sum_{n_i=0}^{\infty} f_{n_i} |n_i\rangle \right]$$

gdje vrijedi normalizacija:

$$\sum_{n_i} |f_{n_i}|^2 = 1 \quad (3.20)$$

Za Gutzwillerovu valnu funkciju se uzima da je jednaka produktu valnih funkcija po čvorovima što se može opravdati činjenicom da su u fazama superfluida i Mottovog izolatora valne funkcije također produkt funkcija po čvorovima. Ovakva valna funkcija daje vrlo dobre rezultate u 3D slučaju dok je za niže dimenzije zbog dimenzijskog povećanja korelacija nešto manje korektan opis. Gutzwillerovu valnu funkciju treba shvatiti kao varijacijski ansatz gdje se koeficijenti  $f_{n_i}$  nalaze minimiziranjem  $\langle \psi_G | \hat{H} | \psi_G \rangle$ . Za očekivanu vrijednost Hamiltonijana (3.12) u Gutzwillerovom stanju se dobiva:

$$\begin{aligned} \langle H_U + H_\mu \rangle &= \sum_i \sum_{n_i} |f_{n_i}|^2 \left( \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \right) \\ \langle H_t \rangle &= -2dt \sum_i \left| \sum_{n_i=0} \sqrt{n_i + 1} f_{n_i}^* f_{n_i+1} \right|^2 \end{aligned}$$

U stanju Mottovog izolatora sustav ima točno određen broj čestica  $n$  po čvoru. Promotri li se mala fluktuacija oko tog stanja može se za koeficijente odabrati:

$$f_n = (1 - 2\alpha^2)^{1/2}, \quad f_{n-1} = f_{n+1} = \alpha$$

gdje je  $\alpha$  malen i svi ostali koeficijenti  $f_{n_i}$  su nula te vrijedi normalizacija (3.20). Razvoj kinetičke energije do  $\alpha^2$  glasi:

$$\begin{aligned} \langle H_t \rangle &= -2dt \sum_i \left| \alpha (1 - 2\alpha^2)^{1/2} \sqrt{n} + \alpha (1 - 2\alpha^2)^{1/2} \sqrt{n+1} \right|^2 \approx \\ &\approx -2dt \sum_i \alpha^2 \left| \sqrt{n} + \sqrt{n+1} \right|^2 \end{aligned}$$

Za točku na sredini Mottove razine broja čestica  $n$  vrijedi:

$$\mu = U \left( n - \frac{1}{2} \right)$$

Interakcijski dio Hamiltonijana je tada jednak:

$$\langle H_U + H_\mu \rangle = \sum_i \left[ -\frac{U}{2} n^2 (1 - 2\alpha^2) - \frac{U}{2} \alpha^2 (n^2 - 1) - \frac{U}{2} \alpha^2 (n^2 - 1) \right]$$

Za očekivanu vrijednost Hamiltonijana sve skupa slijedi [7]:

$$\langle H \rangle = \sum_i \left[ -\frac{U}{2}n^2 + \frac{U}{2}2\alpha^2 - 2dt\alpha^2 \left| \sqrt{n} + \sqrt{n+1} \right|^2 \right]$$

Energija je suma identičnih članova po čvorovima. Fazni prijelaz se događa kada koeficijent ispred  $\alpha^2$  mijenja predznak. U slučaju velikih vrijednosti  $n$  se dobiva:

$$U = 8ndt$$

Promotri li se vremenski promjenljiva situacija valna funkcija mora zadovoljiti jednadžbu [14]:

$$\langle \psi_G | i \frac{d}{dt} - \hat{H} | \psi_G \rangle = 0$$

iz čega slijede jednadžbe za koeficijente:

$$i \frac{d}{dt} f_{n_i} = \frac{U}{2}n(n-1)f_{n_i} - J\Phi_i^* \sqrt{n+1}f_{n_i+1} - J\Phi_i \sqrt{n}f_{n_i-1}$$

gdje je:

$$\Phi_i = \sum_{\langle i,j \rangle} \langle a_j \rangle = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{n_j} \sqrt{n_j} f_{n_j-1}^* f_{n_j}$$

Pristup preko Gutzwillerove valne funkcije spada u teorije srednjeg polja i kao i ostale takve teorije ne daje pretjerano dobru procjenu točke faznog prijelaza. Isto tako, Gutzwillerov pristup ne funkcionira dobro za srednje vrijednosti omjera  $U/J$  te ne obuhvaća korelacije između različitih čvorova. Međutim, moguće je napraviti poboljšanja Gutzwillerovog pristupa kada on daje bolje rezultate te je općenito koristan za stjecanje uvida u režime kada egzaktna numerička rješenja nisu lako ostvariva [14, 7].

### 3.4 Harmonička aproksimacija

Wannierove funkcije, koje opisuju čestice lokalizirane na čvorovima optičke rešetke, za najnižu energijsku vrpcu pokazuju veliko preklapanje s valnom funkcijom osnovnog stanja harmoničkog oscilatora čak i za relativno plitke potencijale [4]. Zbog toga se može promotriti granica u kojoj se potencijal rešetke oko  $x = 0$  aproksimira

potencijalom harmoničkog oscilatora:

$$V_L(x) = V_0 \sin^2(k_L x) \approx \frac{m}{2} \omega^2 x^2, \quad \omega^2 = \frac{2k_L^2}{m} V_0$$

Valna funkcija osnovnog stanja harmoničkog oscilatora je dana izrazom [2, 16]:

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-x^2/2b^2}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (3.21)$$

Koristeći valnu funkciju (3.21) moguće je izračunati parametre Bose-Hubbardovog modela u harmoničkoj aproksimaciji (izrazi (3.14) i (3.15)). Za parametar interakcije se dobiva:

$$\begin{aligned} U &= \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int dx |\psi_0(x)|^4 = 4\omega\hbar a_s \int e^{-2\left(\frac{x}{b}\right)^2} dx = 4\omega\hbar a_s \sqrt{\frac{\pi b^2}{2}} \\ &= E_R \frac{8a_s}{k_L} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{V_0}{E_R}\right)^{1/4} \end{aligned}$$

gdje je  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$  karakteristična energija za rešetku s razmacima između čvorova jednakim  $a$ . Za izračun koeficijenta preskakanja možemo se poslužiti valnom funkcijom (3.21) i originalnim potencijalom rešetke  $V_L = V_0 \sin^2(k_L x)$ . Za dva čvora, jedan na koordinati  $x_1 = na$  i drugi na  $x_2 = la$ , koeficijent preskakanja je dan sa:

$$\begin{aligned} J &= \int dx w_0^*(x - x_1) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2(k_L x) \right) w_0(x - x_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}b} \int e^{-(x-na)^2/2b^2} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2(k_L x) \right) e^{-(x-la)^2/2b^2} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}b} \int e^{-(x-na)^2/2b^2} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{(x-la)^2}{b^4} - \frac{1}{b^2} \right) + V_0 \sin^2(k_L x) \right] e^{-(x-la)^2/2b^2} dx \end{aligned}$$

Ako se za položaj drugog čvora uzme  $l = n \pm Ra$ , gdje  $R$  označava broj čvorova za koliko su čvorovi  $x_1$  i  $x_2$  udaljeni, mogu se pojedini članovi pojednostaviti:

$$\begin{aligned} (x - na)^2 + (x - la)^2 &= 2 \left[ \left( x - a \left( n \pm \frac{R}{2} \right) \right)^2 + \frac{1}{4} R^2 a^2 \right] \\ (x - la)^2 &= \left( x - a \left( n \pm \frac{R}{2} \right) \right)^2 \pm Ra \left( x - a \left( n \pm \frac{R}{2} \right) \right) + \frac{1}{4} R^2 a^2 \end{aligned}$$

Za kinetički dio integrala se dobiva:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2mb\sqrt{\pi}} \int e^{-\frac{1}{b^2}(x-a(n\pm\frac{R}{2}))^2} e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} \left[ \frac{1}{b^4} \left( x - a \left( n \pm \frac{R}{2} \right) \right)^2 \right. \\
& \left. + \frac{a^2R^2}{4} \pm a \left( x - a \left( n \pm \frac{R}{2} \right) \right) - \frac{1}{b^2} \right] \\
& = -\frac{\hbar^2}{2mb\sqrt{\pi}} e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} \left[ \frac{1}{2b^4} \sqrt{\pi b^6} + \frac{a^2R^2}{4b^4} \sqrt{\pi b^2} - \frac{1}{b^2} \sqrt{\pi b^2} \right] \\
& = -\frac{E_R}{\pi^2} e^{-\frac{\pi^2R^2}{8}} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \left( \frac{V_0\pi^4R^2}{4E_R} - \sqrt{\frac{V_0\pi^4}{4E_R}} \right)
\end{aligned}$$

Potencijal rešetke se može zapisati kao  $V_L(x) = V_0(1 - \cos(2k_Lx))/2$  pa za potencijalni dio integrala slijedi:

$$\begin{aligned}
& \frac{V_0}{2b\sqrt{\pi}} \int e^{-\frac{1}{b^2}(x-a(n\pm\frac{R}{2}))^2} e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} (1 - \cos(2k_Lx)) dx = \\
& = \frac{V_0}{2b\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi b^2} e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} - \frac{V_0}{2b\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \left[ \int e^{-\frac{1}{b^2}(x-a(n\pm\frac{R}{2}))^2} e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} e^{-i2k_Lx} dx \right] \\
& = \frac{V_0}{2b\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi b^2} e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} - \frac{V_0}{2b\sqrt{\pi}} \operatorname{Re} \left[ e^{-\frac{a^2R^2}{4b^2}} e^{-i2k_La(n\pm\frac{R}{2})} \int e^{-\frac{x^2}{b^2}} e^{-i2k_Lx} dx \right]
\end{aligned}$$

U gornjem izrazu se pojavljuje Fourierov transformat Gaussijana čiji je rezultat poznat [1]. Uzimanjem realnog dijela integrala dobiva se predznak  $\cos(2k_La(n\pm R/2)) = \mp 1$  jer je  $k_L$  valni vektor laserskih zraka koje imaju dvostruko veću valnu duljinu od potencijala optičke rešetke. Negativni predznak se odnosi na neparni  $R$ , odnosno neparnu udaljenost čvorova dok je pozitivan predznak za parni  $R$ . Sveukupno za koeficijent preskakanja u harmoničkoj aproksimaciji se dobiva:

$$\begin{aligned}
\frac{J}{E_R} = & -\frac{1}{\pi^2} e^{-\frac{\pi^2R^2}{8}} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \left( \frac{V_0\pi^4R^2}{4E_R} - \sqrt{\frac{V_0\pi^4}{4E_R}} \right) \\
& + \frac{V_0}{2E_R} e^{-\frac{\pi^2R^2}{8}} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \left( 1 \pm e^{-\sqrt{\frac{E_R}{V_0}}} \right) \quad (3.22)
\end{aligned}$$

### 3.5 Parametar preskakanja

U Bose-Hubbardovom modelu parametar preskakanja između čvorova i vrpci je dan izrazom [14]:

$$J_{n,m}(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \int d^3x w_n^*(\vec{x} - \vec{x}_i) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right) w_m(\vec{x} - \vec{x}_j)$$

Parametar preskakanja opisuje vjerojatnost tuneliranja i u Bose-Hubbardovom modelu se obično uzimaju u obzir samo tuneliranja između najbližih susjeda. Za periodički potencijal rješenja Schrödingerove jednadžbe su Blochove funkcije pa se za parametar preskakanja dobiva:

$$\begin{aligned}
J_{n,m}(\vec{x}_i, \vec{x}_j) &= \langle w_n(\vec{x} - \vec{x}_i) | \hat{H} | w_m(\vec{x} - \vec{x}_j) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}_j} \langle \phi_{n, \vec{k}} | \hat{H} | \phi_{m, \vec{k}'} \rangle \\
&= \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}_j} \langle \phi_{n, \vec{k}} | E_{m, \vec{k}'} | \phi_{m, \vec{k}'} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}_j} E_{m, \vec{k}'} \delta_{n,m} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\
&= \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} E_{n, \vec{k}} = \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}} e^{ik_x a_x} e^{ik_y a_y} e^{ik_z a_z} (E_{n_x, k_x} + E_{n_y, k_y} + E_{n_z, k_z}) \\
&= \frac{1}{M} \sum_{\vec{k}} \cos(k_x a_x) \cos(k_y a_y) \cos(k_z a_z) (E_{n_x, k_x} + E_{n_y, k_y} + E_{n_z, k_z})
\end{aligned} \tag{3.23}$$

gdje je  $\vec{a} = \vec{x}_i - \vec{x}_j$ . Članovi u sumi s  $\sin(k_i a_i)$  iščezavaju zato jer je prva Brillounova zona definirana simetrično oko nule. U 1D slučaju parametar preskakanja se svodi na:

$$J = \frac{1}{M} \sum_k \cos(Rka) E_{n,k}$$

gdje je  $R$  broj čvorova između kojih nas zanima iznos parametra preskakanja.

Parametar preskakanja za neku vrpcu  $n$  je moguće dobiti promotri li se isti Hamiltonijan u formalizmu druge kvantizacije:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,n} J_n(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \hat{a}_{i,n}^\dagger \hat{a}_{j,n}$$

gdje operator  $\hat{a}_{i,n}^\dagger$  ( $\hat{a}_{i,n}$ ) stvara (poništava) česticu u  $n$ -toj vrpici na lokaciji  $\vec{x}_i$ . Dijago-

naliziramo li Hamiltonijan dobivamo [4]:

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_{n,\vec{k}} | \hat{H} | \phi_{n,\vec{k}} \rangle = E_n(\vec{k}) \\
& = \frac{1}{M} \int d\vec{x} \sum_i w_n^*(\vec{x} - \vec{x}_i) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} \sum_{l,l',m} J_m(\vec{x}_l - \vec{x}_{l'}) \hat{a}_{l,m}^\dagger \hat{a}_{l',m} \sum_j w_n(\vec{x} - \vec{x}_j) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_j} \\
& = \frac{1}{M} \int d\vec{x} \sum_i w_n^*(\vec{x} - \vec{x}_i) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} \sum_{l,l'} J_n(\vec{x}_l - \vec{x}_{l'}) w_n(\vec{x} - \vec{x}_l) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_{l'}} \\
& = \frac{1}{M} \sum_{l,l'} J_n(\vec{x}_l - \vec{x}_{l'}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_{l'} - \vec{x}_l)} \\
& = \sum_{\vec{R}} J_n(\vec{R}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}
\end{aligned} \tag{3.24}$$

gdje su  $\vec{R}$  udaljenosti između čvorova. Parametri preskakanja se dobiju rješavanjem sustava jednadžbi  $Ax = b$  gdje su u vektor  $x$  spremljeni parametri preskakivanja između različitih čvorova, a u vektor  $b$  Blochove energije koje ovise o valnom vektoru.

U slučaju da je potencijal optičke rešetke dan s  $V(x) = V_0 \cos(kx)$  Schrödingero-va jednadžba poprima oblik Mathieuove jednadžbe i parametar preskakanja se tada može približno dobiti iz širine najniže energijske vrpce [7, 4]:

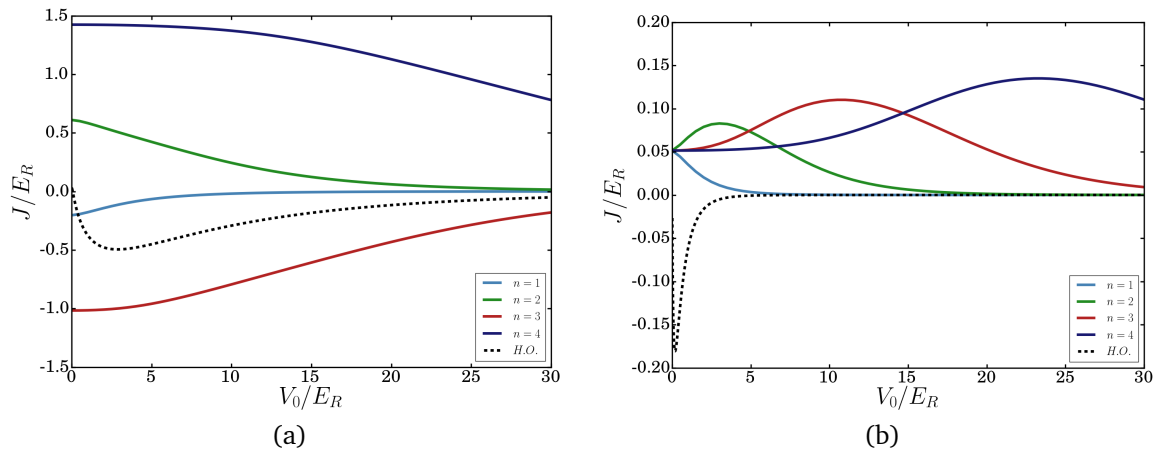
$$\frac{J}{E_R} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{V_0}{E_R} \right)^{3/4} \exp \left[ -2 \left( \frac{V_0}{E_R} \right)^{1/2} \right] \tag{3.25}$$

### 3.6 Bogoljubovljeva aproksimacija

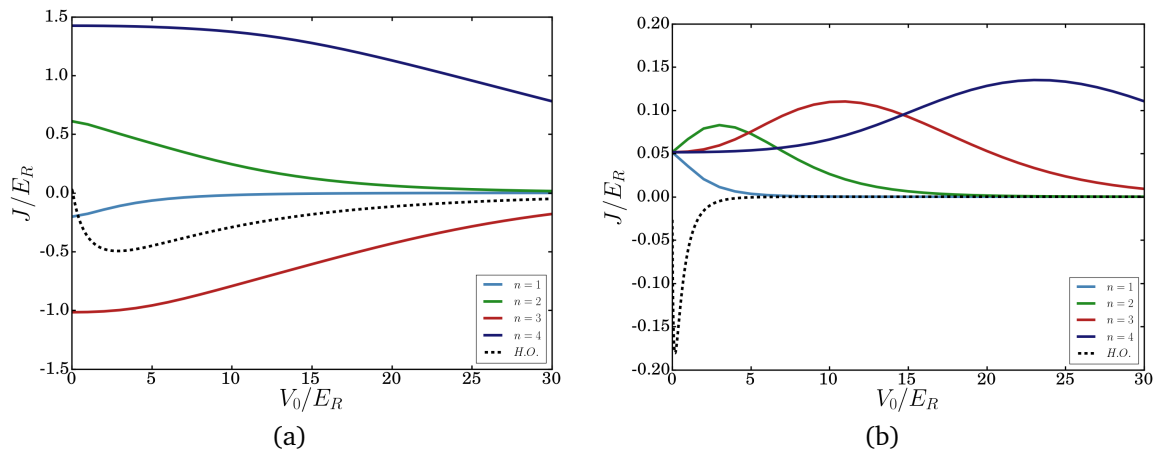
Bogoljubovljeva transformacija omogućuje približnu dijagonalizaciju nekih Hamiltonijana među koje spada i onaj Bose-Hubbardovog modela. Promotrimo li plin interagirajućih bozona, Hamiltonijan je dan sa [9, 7]:

$$\hat{H} = \sum_p \varepsilon_p b_p^\dagger b_p + \frac{U}{2V} \sum_{p_1, p_2, p_3, p_4} b_{p_1}^\dagger b_{p_2}^\dagger b_{p_3} b_{p_4} \delta_{p_1+p_2, p_3+p_4}$$

gdje je  $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$  energija bozona, a  $V$  volumen sistema. U sistemu se ukupno nalazi  $N$  čestica dok ih  $N_0$  ima količinu gibanja  $p = 0$  te vrijedi  $N - N_0 \ll N$ . S obzirom

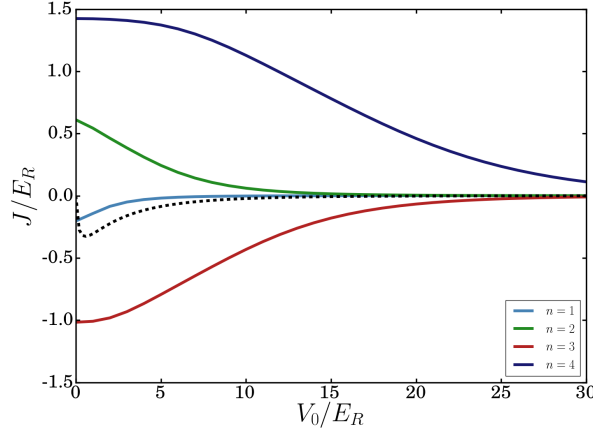


Slika 3.2: Parametar preskakanja za četiri najniže energijske vrpce u jedinicama  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$  zajedno s harmoničkom aproksimacijom (izraz (3.22)) za potencijal  $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ . (a) Između prvih susjeda. (b) Između drugih susjeda. Parametri su dobiveni iz izraza (3.23).



Slika 3.3: Parametar preskakanja za četiri najniže energijske vrpce u jedinicama  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$  zajedno s harmoničkom aproksimacijom (izraz (3.22)) za potencijal  $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ . (a) Između prvih susjeda. (b) Između drugih susjeda. Parametri su dobiveni rješavanjem sustava jednadžbi (3.24). Vidljivo je da su rezultati isti kao i na slici 3.2.





Slika 3.4: Parametar preskakanja između prvih susjeda za četiri najniže energijske vrpce u jedinicama  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$  za potencijal  $V(x) = V_0 \cos(kx)$ . Crnom crtanom linijom je prikazan parametar preskakanja za najnižu vrpcu prema jednačbi (3.25).

na to moguće je napraviti zamjenu  $b_0^\dagger, b_0 \rightarrow \sqrt{N_0}$ , i u Hamiltonijanu zadržati članove reda  $N_0$  i  $N_0^2$  [9]:

$$\begin{aligned} H_{int} &= \frac{U}{2V} \left[ b_0^\dagger b_0^\dagger b_0 b_0 + \sum_{p'} \left( 2b_p^\dagger b_0^\dagger b_p b_0 + 2b_{-p}^\dagger b_0^\dagger b_{-p} b_0 + b_p^\dagger b_{-p}^\dagger b_0 b_0 + b_0^\dagger b_0^\dagger b_p b_{-p} \right) \right] \\ &= \frac{U}{2V} \left[ N_0^2 + 2N_0 \sum_{p'} \left( b_p^\dagger b_p + b_{-p}^\dagger b_{-p} \right) + N_0 \sum_{p'} \left( b_p^\dagger b_{-p}^\dagger + b_p b_{-p} \right) \right] \end{aligned}$$

gdje  $p'$  označava sumu po  $p \neq 0$ . Operator broja čestica je dan izrazom:

$$\hat{N} = N_0 + \frac{1}{2} \sum_{p'} \left( b_p^\dagger b_p + b_{-p}^\dagger b_{-p} \right)$$

Eliminira li se  $N_0$  uz  $N = \langle \hat{N} \rangle$  i zadrže li se članovi reda  $N^2$  i  $N$  dobiva se konačni Hamiltonijan:

$$\hat{H} = \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{p'} \left[ (\varepsilon_p + nU) \left( b_p^\dagger b_p + b_{-p}^\dagger b_{-p} \right) + nU \left( b_p^\dagger b_{-p}^\dagger + b_p b_{-p} \right) \right] \quad (3.26)$$

gdje je  $n = N/V$ . Hamiltonijan (3.26) možemo pokušati dijagonalizirati uvođenjem novih operatora dizanja i spuštanja [9, 7, 14]:

$$b_p = u_p \alpha_p - v_p \alpha_{-p}^\dagger, \quad b_p^\dagger = u_p \alpha_p^\dagger - v_p \alpha_{-p}$$

Ovim operatorima dizanja i spuštanja nametnemo iste komutacijske relacije:

$$[\alpha_p, \alpha_{p'}^\dagger] = \delta_{pp'}, \quad [\alpha_{p'}, \alpha_p] = [\alpha_{p'}^\dagger, \alpha_p^\dagger] = 0$$

što je zadovoljeno ako vrijedi:

$$u_p^2 - v_p^2 = 1 \quad (3.27)$$

za svaki  $p$ . Zamjenom starih operatora dizanja i spuštanja s novima dobiva se transformirani Hamiltonijan:

$$\begin{aligned} H = & \frac{UN^2}{2V} + \sum_{p'} [(\varepsilon_p + nU) v_p^2 - nU u_p v_p] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{p'} \left\{ [(\varepsilon_p + nU) (u_p^2 + v_p^2) - 2nU u_p v_p] (\alpha_p^\dagger \alpha_p + \alpha_{-p}^\dagger \alpha_{-p}) \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{p'} \left\{ [nU (u_p^2 + v_p^2) - 2u_p v_p (\varepsilon_p + nU)] (\alpha_p^\dagger \alpha_{-p}^\dagger + \alpha_p \alpha_{-p}) \right\} \end{aligned}$$

Jednadžba (3.27) postavlja samo jedan uvjet na koeficijente  $u_p$  i  $v_p$ . S obzirom na to moguće je izabrati njihov omjer te to činimo tako da zadnji član u Hamiltonijanu iščezne [9]:

$$nU (u_p^2 + v_p^2) = 2u_p v_p (\varepsilon_p + nU)$$

Hamiltonijan tada postaje dijagonalan u bazi svojstvenih stanja operatora  $\alpha_p^\dagger \alpha_p$ . Koeficijenti se mogu zapisati kao:

$$u_p = \cosh(\phi_p), \quad v_p = \sinh(\phi_p), \quad \tanh(2\phi_p) = \frac{nU}{\varepsilon_p + nU}$$

Rješavanjem uz upotrebu poznatih relacija između hiperbolnih funkcija dobiva se:

$$v_p^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\varepsilon_p + nU}{E_p} - 1 \right), \quad u_p^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\varepsilon_p + nU}{E_p} + 1 \right)$$

gdje je uvedena zamjena  $E_p = [(\varepsilon_p + nU)^2 - (nU)^2]^{1/2}$ . Hamiltonijan je tada dan sa:

$$H = \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{p'} (E_p - \varepsilon_p + nU) + \frac{1}{2} \sum_{p'} E_p (\alpha_p^\dagger \alpha_p + \alpha_{-p}^\dagger \alpha_{-p})$$

Operatori  $\alpha_p^\dagger \alpha_p$  imaju svojstvene vrijednosti  $0, 1, 2, \dots$ . Zbog toga u osnovnom stanju  $|\psi_G\rangle$  mora vrijediti  $\alpha_p |\psi_G\rangle = 0$ , za  $p \neq 0$ . Energija osnovnog stanja je dana sa [9]:

$$E = \langle \psi_G | H | \psi_G \rangle = \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{p'} (E_p - \varepsilon_p + nU)$$

### 3.7 Gross-Pitaevskii jednadžba

Za plin interagirajućih bozona u vanjskom potencijalu Hamiltonijan u formalizmu druge kvantizacije je dan s izrazom [22, 20, 7]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2m} \int d^3r |\nabla \hat{a}(\vec{r})|^2 + \int d^3r V(\vec{r}, t) \hat{a}^\dagger(\vec{r}) \hat{a}(\vec{r}) + \\ & \frac{U}{2} \int d^3r \hat{a}^\dagger(\vec{r}) \hat{a}^\dagger(\vec{r}) \hat{a}(\vec{r}) \hat{a}(\vec{r}) - \mu \int d^3r \hat{a}^\dagger(\vec{r}) \hat{a}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Uz upotrebu komutacijskih relacija za operatore dizanja i spuštanja:

$$[\hat{a}^\dagger(\vec{r}), \hat{a}^\dagger(\vec{r}')] = [\hat{a}(\vec{r}), \hat{a}(\vec{r}')] = 0, \quad [\hat{a}(\vec{r}), \hat{a}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Heisenbergova jednadžba za operator  $\hat{a}(\vec{r}, t)$  glasi:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \hat{a}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= [\hat{a}(\vec{r}, t), \hat{H}] \\ &= -\frac{1}{2m} \nabla^2 \hat{a}(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \hat{a}(\vec{r}, t) + U \hat{a}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{a}(\vec{r}, t) \hat{a}(\vec{r}, t) - \mu \hat{a}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Zamijenimo li operator  $\hat{a}(\vec{r}, t)$  s njegovom očekivanom vrijednosti  $\phi = \langle \hat{a}(\vec{r}, t) \rangle$  dobivamo jednadžbu [7]:

$$i \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \nabla^2 \phi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) + U \phi^\dagger(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) - \mu \phi(\vec{r}, t)$$

Gornja jednadžba se naziva Gross-Pitaevskii jednadžba. U slučaju da je  $V(\vec{r}, t) = 0$  jednadžba ima rješenje  $\phi = \sqrt{n_0} e^{i\theta}$  s time da faza  $\theta$  može biti proizvoljna. Promotrimo li rješenje jednadžbe  $\phi_0 = \sqrt{n_0}$  i male fluktuacije oko toga stanja  $\phi = \phi_0 + \delta\phi$  dobivamo jednadžbe gibanja:

$$\begin{aligned} i\delta\dot{\phi} &= -\frac{1}{2m} \nabla^2 \delta\phi + Un_0 (\delta\phi + \delta\phi^*) \\ -i\delta\dot{\phi}^* &= -\frac{1}{2m} \nabla^2 \delta\phi^* + Un_0 (\delta\phi + \delta\phi^*) \end{aligned} \tag{3.28}$$

gdje su zadržani samo članovi linearni u fluktuaciji. Uvedemo li zamjene [7]:

$$\begin{aligned}\delta n &= \sqrt{n_0} (\delta\phi + \delta\phi^*) \\ \delta\theta &= \frac{1}{2i\sqrt{n_0}} (\delta\phi - \delta\phi^*)\end{aligned}$$

i uvrstimo ih u jednadžbu (3.28) dobivamo:

$$\begin{aligned}\delta\dot{n} &= -\frac{n_0}{m} \nabla^2 \delta\theta \\ \delta\dot{\theta} &= \frac{1}{4mn_0} \nabla^2 \delta n - U \delta n\end{aligned}$$

Kombiniranjem zadnje dvije jednadžbe dobiva se:

$$\delta\ddot{\theta} = \left( Un_0 - \frac{\nabla^2}{4m} \right) \frac{\nabla^2}{m} \delta\theta$$

Pretpostavi li se rješenje oblika  $\delta\theta \sim e^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$  dobiva se ista disperzijska relacija kao i u Bogoljubovljevoj aproksimaciji:

$$E = \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left( \frac{p^2}{2m} + 2Un_0 \right)}$$

Gross-Pitaevskii jednadžba vrijedi u uvjetima kada je parametar uređenja različit od nule, odnosno izvan faze Mottovog izolatora i može opisivati sustave u prisutnosti i bez vanjskog potencijala.

### 3.8 Hardcore bozoni

Kada interakcija između bozona u rešetci postane jako velika,  $U \rightarrow \infty$ , oni se počinju ponašati kao neprobijne čestice koje se nazivaju hardcore bozoni (HCB). Režim HCB se također naziva i režimom Tonks-Girardeauovog (TG) plina i takav sustav posjeduje mnoge sličnosti sa sustavom neinteragirajućih fermiona spina  $S = 0$  na koji se onda može i mapirati. Veličine kao što su energija i raspodjela gustoće su iste za oba sustava dok su primjerice jednočestične korelacije i funkcija raspodjele količine gibanja različite [18, 19, 12, 5].

Hamiltonijan u HCB režimu se može zapisati kao:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + V_0 \sum_i x_i^2 n_i$$

gdje suma u prvom članu kao i prije uključuje prve susjede, a drugi član predstavlja harmoničku klopku s položajima čvorova  $x_i = ia$ . Interakcijski član je izostavljen te se zbog beskonačnog međudjelovanja između čestica formulira kao uvjet da na svakom čvoru možemo imati najviše jednu česticu. Ovo nazivamo fermionizacija sustava bozona koja relacije za operatore stvaranja i poništenja bozona mijenja, ali ne postaju sasvim identične onima za fermione već poprimaju sljedeći oblik:

$$a_i^{\dagger 2} = a_i^2 = 0, \quad \{a_i, a_i^\dagger\} = 1, \quad [a_i, a_j^\dagger] = 0 \quad (3.29)$$

gdje zadnja relacija u (3.29) vrijedi samo za  $i \neq j$  dok je za  $i = j$  zadana značajkom da se na jednom čvoru može nalaziti najviše jedna čestica. Mapiranje HCB Hamiltonijana na onaj neinteragirajućih fermiona spina 0 se izvodi pomoću Jordan-Wignerove transformacije [18, 12]:

$$a_i^\dagger = f_i^\dagger \prod_{\beta=1}^{i-1} e^{-i\pi f_\beta^\dagger f_\beta}, \quad a_i = \prod_{\beta=1}^{i-1} e^{i\pi f_\beta^\dagger f_\beta} f_i$$

čime Hamiltonijan postaje:

$$H_F = -J \sum_{\langle i,j \rangle} f_i^\dagger f_j + V_0 \sum_i x_i^2 n_i^f \quad (3.30)$$

gdje su  $f_i^\dagger$  ( $f_i$ ) operatori stvaranja (poništenja) fermiona spina 0, a  $n_i^f$  je operator broja fermiona na čvoru  $i$ . Greenova funkcija za HCB je dana izrazom:

$$G_{ij}(t) = \langle \psi_B(t) | a_i a_j^\dagger | \psi_B(t) \rangle = \langle \psi_F(t) | \prod_{\beta=1}^{i-1} e^{i\pi f_\beta^\dagger f_\beta} f_i f_j^\dagger \prod_{\gamma=1}^{j-1} e^{-i\pi f_\gamma^\dagger f_\gamma} | \psi_F(t) \rangle \quad (3.31)$$

gdje je  $|\psi_B(t)\rangle$  HCB valna funkcija koja ovisi o vremenu  $t$ , a  $|\psi_F(t)\rangle$  je valna funkcija neinteragirajućih fermiona. Evolucija valne funkcije u vremenu je dana izrazom:

$$|\psi_F(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_F t} |\psi_F(0)\rangle = \prod_{\delta=1}^{N_f} \sum_{\sigma=1}^N P_{\sigma\delta}(t) f_\sigma^\dagger |0\rangle$$

gdje je  $N_f$  broj fermiona, odnosno bozona  $N_b$  u HCB režimu,  $N$  broj čvorova u rešetci, a  $P(t)$  matrica koja opisuje razvoj valne funkcije u vremenu. Djelovanje operatora  $a_j^\dagger = f_j^\dagger \prod_{\beta=1}^{j-1} e^{-i\pi f_\beta^\dagger f_\beta}$  na valnu funkciju  $|\psi_F(t)\rangle$  u izrazu (3.31) rezultira promjenom predznaka elemenata matrice  $P_{\sigma\delta}(t)$  za  $\sigma \leq j-1$  i stvaranjem dodatne čestice na čvoru  $j$  što odgovara dodavanju još jednog stupca u matricu  $P(t)$  s elementom  $P_{jN_{f+1}}(t) = 1$  i ostalim elementima u stupcu jednakim nuli. Analogno se dobije za djelovanje operatora  $a_i = \prod_{\beta=1}^{i-1} e^{i\pi f_\beta^\dagger f_\beta} f_i$  na lijevo pa za Greenovu funkciju u HCB režimu slijedi [18, 19, 12]:

$$\begin{aligned} G_{ij}(t) &= \langle 0 | \prod_{\delta=1}^{N_f+1} \sum_{\beta=1}^N P'_{\beta\delta}(t) f_\beta \prod_{\sigma=1}^{N_f+1} \sum_{\gamma=1}^N P'_{\gamma\sigma}(t) f_\gamma^\dagger | 0 \rangle \\ &= \det \left[ (P'^A(t))^\dagger P'^B(t) \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

gdje su  $P'^A(t)$  i  $P'^B(t)$  nove izmijenjene matrice dobivene djelovanjem operatora  $a_i$  i  $a_j^\dagger$  na valne funkcije. Posljednja jednakost u izrazu (3.32) slijedi zato jer se u Greenovoj funkciji pojavljuju članovi tipa:

$$\langle 0 | f_{\beta_1} \cdots f_{\beta_{N_{f+1}}} f_{\gamma_{N_{f+1}}}^\dagger \cdots f_{\gamma_1}^\dagger | 0 \rangle = \epsilon^{\lambda_1 \cdots \lambda_{N_{f+1}}} \delta_{\beta_1 \gamma_{\lambda_1}} \cdots \delta_{\beta_{N_{f+1}} \gamma_{N_{f+1}}}$$

gdje je  $\epsilon^{\lambda_1 \cdots \lambda_{N_{f+1}}}$  Levi-Civita simbol u  $N_{f+1}$  dimenziji, a indeksi  $\lambda_i$  imaju vrijednosti od 1 do  $N_{f+1}$ . Gornja jednakost slijedi zato jer se zamjenom dva fermiona mijenja predznak valne funkcije. Iz Greenove funkcije  $G_{ij}(t)$  moguće je dobiti jednočestičnu matricu gustoće  $\rho_{ij}(t)$  koja je definirana kao:

$$\rho_{ij}(t) = \langle \psi_B(t) | a_i^\dagger a_j | \psi_B(t) \rangle = G_{ji}(t) + \delta_{ij} [1 - 2G_{ii}(t)] \quad (3.33)$$

Pomoću matrice gustoće moguće je dalje izračunati dvije veličine koje su značajne u eksperimentima, funkciju raspodjele količine gibanja  $n_k$  i prirodne orbitale  $\phi^\eta$ . Raspodjela količine gibanja je dana s [18, 14]:

$$n_k(t) = \frac{a}{\zeta} \sum_{jl} e^{-ik(j-l)} \rho_{jl}(t), \quad \zeta = \sqrt{\frac{J}{V_0}}$$

Prirodne orbitale predstavljaju efektivna jednočestična stanja i definirane su kao vlas-

tite funkcije od  $\rho_{ij}$  [18, 12]:

$$\sum_{j=1}^M \rho_{ij}(t) \phi_j^\eta(t) = \lambda_\eta(t) \phi_i^\eta(t)$$

gdje je  $\lambda_\eta$  zauzeće prirodne orbitale  $\phi^\eta$ .

Elementi matrice gustoće  $\rho_{ij}(t)$  predstavljaju korelacije između čvorova  $i$  i  $j$  u rešetci. Općenito je jednočestična korelacijska funkcija definirana na način:

$$\rho(x, y) = \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \psi^*(x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x) \psi(x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, y)$$

U slučaju fermiona moguće je eksplicitno izračunati korelacijsku funkciju iskoristi li se raspis valne funkcije (3.5):

$$\begin{aligned} \rho(x, y) &= \frac{1}{N!} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \sum_p (-1)^p \psi_{p1}^*(x_1) \dots \psi_{pN}^*(x) \sum_q (-1)^q \psi_{q1}(x_1) \dots \psi_{qN}(y) \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \psi_i^*(x) \psi_i(y) \end{aligned}$$

gdje je iskorištena činjenica da su jednočestične valne funkcije ortonormirane pa preživljavaju samo članovi s istim permutacijama iz obe sume. U konačnom izrazu suma ide po svim jednočestičnim kvantnim stanjima. Identičan izraz se dobije i u impulsnoj reprezentaciji:

$$\rho(k_x, k_y) = \frac{1}{N} \sum_i \psi_i^*(k_x) \psi_i(k_y)$$

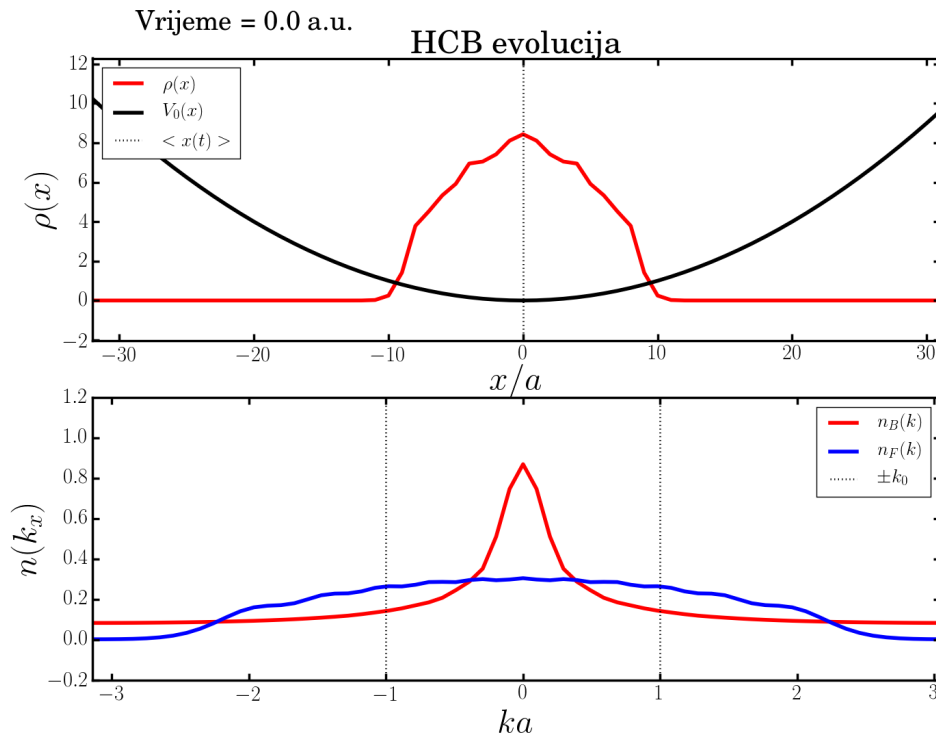
U slučaju HCB bozona nije moguće dobiti eksplicitan oblik za korelacijsku funkciju na isti način kao i za fermione zato jer su fermionska i HCB valna funkcija povezane izrazom  $\psi_B(x_1, x_2, \dots, x_N) = |\psi_F(x_1, x_2, \dots, x_N)|$ . U slučaju HCB bozona za korelacijsku funkciju se dobiva:

$$\rho(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i^*(x) \psi_i(y)$$

gdje su  $\psi_i$  prirodne orbitale, a  $\lambda_i$  njihovo zauzeće. Iako je gustoća čestica za fermione i HCB bozone ista, nedijagonalni elementi matrice  $\rho_{ij}(t)$  se razlikuju za ta dva slučaja. Za fermione vlastita stanja Hamiltonijana i matrice  $\rho_{ij}(t)$  su ista te su to efektivne jednočestične funkcije (prirodne orbitale) koje se mogu eksperimentalno

uočiti. Kod HCB bozona Hamiltonijan koji se koristi za opis i evoluciju sistema je isti kao i fermionski (izraz (3.30)), ali njegova vlastita stanja ne predstavljaju stvarna mjerljiva stanja bozona već se ona dobivaju dijagonalizacijom matrice gustoće  $\rho_{ij}(t)$ .

U eksperimentu se čestice obično prvo zarobe s harmoničkom klopkom te se potom na sustav nametne potencijal optičke rešetke [18]. Na slici 3.5 su prikazane raspodjele<sup>3</sup> gustoće čestica i količine gibanja za sustav koji je prvotno zarobljen har-



Slika 3.5: Gornji dio slike prikazuje harmonički potencijal  $V(x) = V_0 x^2$  s  $V_0 = 0.01$ , raspodjelu gustoće čestica i očekivani položaj čestica  $\langle x(t) \rangle$  za broj čvorova  $M = 64$  i broj čestica  $N = 11$  u početnom trenutku  $\tau = t \cdot E_R/\hbar = 0$ . Na donjoj slici su prikazane raspodjele količine gibanja za neinteragirajuće fermione  $n_F$  i HCB bozone  $n_k$ . Parametar preskakanja između čvorova je  $J = 0.252$ .

moničkom klopkom te su čestice stavljene u najniža energijska stanja Hamiltonijana. Gustoća čestica u prostoru je očekivano simetrična i najveća je oko minimuma potencijala. Raspodjele količine gibanja za fermione i bozone se, kao što je i najavljeno, razlikuju. Čestice nemaju početnu količinu gibanja, odnosno, preferirani smjer kretanja te je raspodjela centrirana oko  $k = 0$  gdje poprima i najveću vrijednost. Pusti li se sistem da evoluiru u vremenu (slika 3.6) čestice ravnomjerno putuju u oba smjera optičke rešetke što je vidljivo u razmazanosti raspodjele gustoće čestica te u raspodjeli količine gibanja gdje se formiraju dva simetrična vrha. S daljnjim protokom

<sup>3</sup>Odabere li se da se parametri Hamiltonijana  $U$  i  $J$ , a time i energija  $E$  mjere u jedinicama  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$ , tada se vrijeme može mjeriti u bezdimenzionalnim jedinicama  $\tau = t \cdot E_R/\hbar$ . U slučaju atoma <sup>87</sup>Rb i valne duljine lasera  $\lambda = 1064nm$  vrijedi  $\tau \approx 12741 \cdot t$ .



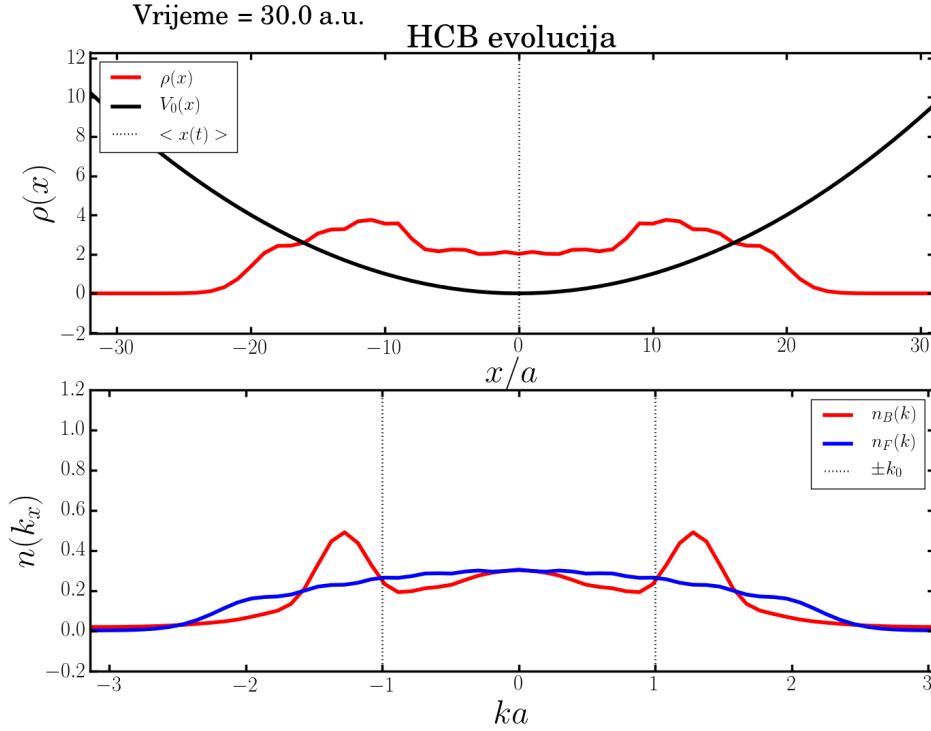
vremena prostorna raspodjela čestica i raspodjela količine gibanja HCB bozona se dodatno razmazuju zbog širenja čestica preko cijele rešetke i ne zauzimaju nikakav trajan i specifičan oblik. Zanimljivo je za primijetiti da se fermionska raspodjela količine gibanja ne mijenja u vremenu što je posljedica toga da je fermionski sustav neinteragirajući što utječe na to da se raspodjela ne mijenja.

Želi li se u početnom trenutku postići usmjereno gibanje čestica potrebno je valne funkcije modificirati na način:

$$|\psi_i\rangle = \sum_{j=1}^M |\psi_i^j\rangle \quad \rightarrow \quad |\psi_i\rangle = \sum_{j=1}^M e^{ikx_j} |\psi_i^j\rangle$$

gdje je  $|\psi_i\rangle$  jednočestična valna funkcija,  $M$  broj čvorova,  $|\psi_i^j\rangle$  komponente valne funkcije,  $k$  početna količina gibanja koja se zada česticama, a  $x_j$  koordinate čvorova. Slika 3.7 prikazuje čestice koje su prvotno uhvaćene u harmoničku klopku te im je dana količina gibanja  $k = \frac{\pi}{2}$  što rezultira pomicanjem početnog vrha u raspodjeli na tu vrijednost količine gibanja. Za razliku od slučaja kada čestice nisu imale zadanu početnu količinu gibanja, očekivana vrijednost položaja čestica  $\langle x(t) \rangle$  se sada mijenja s vremenom i u početku se pomiče u smjeru zadane količine gibanja. Kada dođu do ruba sustava čestice se reflektiraju nazad i s njima očekivana vrijednost  $\langle x(t) \rangle$  jer sustav u ovom slučaju nije zatvoren u prsten, odnosno ne postoji mogućnost tuneliranja između prvog i posljednjeg čvora. Tada i vrh u raspodjeli HCB bozona nestaje i raspodjela se kao i prije razmaže. Raspodjela količine gibanja fermiona u slučaju zadane početne količine gibanja čestica zadržava isti oblik samo je vrh raspodjele pomaknut na vrijednost zadane količine gibanja te se kao i prije raspodjela količine gibanja ne mijenja u vremenu.

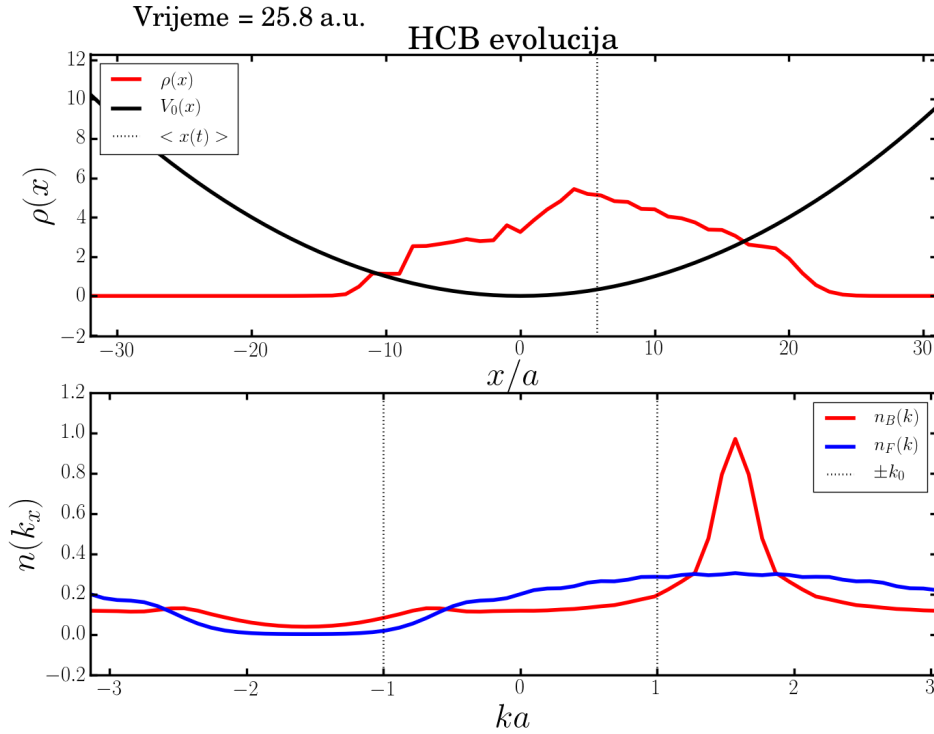
Također se može promotriti situacija u kojoj su čestice prvotno stavljene u Fockova stanja na rub rešetke te su puštene da nalijeću na potencijalnu barijeru oko sredine rešetke. Raspodjela gustoće čestica tada zorno prikazuje proces refleksije i tuneliranja čestica kroz barijeru; za visoke barijere sve čestice se reflektiraju i vraćaju u smjeru iz kojeg su došle, a za niske barijere gotovo sve čestice uspijevaju tunelirati dok su za srednje visoke barijere prisutna oba procesa. Neovisno o matematički zadanom početnom impulsu čestica raspodjela količine gibanja i fermiona i HCB bozona je u trenutku  $t = 0$  potpuno razmazana i za fermione ostaje takva za svaki  $t$ . Razlog tome je potpuna određenost položaja čestica u početnom trenutku jer su



Slika 3.6: Gornji dio slike prikazuje harmonički potencijal  $V(x) = V_0 x^2$  s  $V_0 = 0.01$ , raspodjelu gustoće čestica i očekivani položaj čestica  $\langle x(t) \rangle$  za broj čvorova  $M = 64$  i broj čestica  $N = 11$  u trenutku  $\tau = 30.0$ . Na donjoj slici su prikazane raspodjele količine gibanja za neinteragirajuće fermione  $n_F$  i HCB bozone  $n_k$ . Parametar preskakanja između čvorova je  $J = 0.252$ .

stavljene u Fockova stanja, što rezultira potpunom neodređenošću količine gibanja čestica. U raspodjeli količine gibanja HCB bozona se potom pojavljuje vrh na vrijednosti količine gibanja  $k = \frac{\pi}{2}$  koji je prisutan sve dok čestice ne stignu do barijere nakon čega se raspodjela razmaže. Osim visine barijere za tuneliranje je bitna i širina barijere, gdje je vjerojatnost tuneliranja veća za užu barijere. Na slikama 3.9, 3.10 i 3.11 je prikazana vremenska evolucija sustava  $M = 64$  čvora i  $N = 11$  čestica koje se prvotno nalaze u Fockovim stanjima na lijevom kraju rešetke. Središnja barijera je dana izrazom  $V(x) = V_0$  za  $-4 \leq x \leq 4$  gdje je  $V_0 = 0.3$  i omogućene su i refleksija i transmisija čestica.

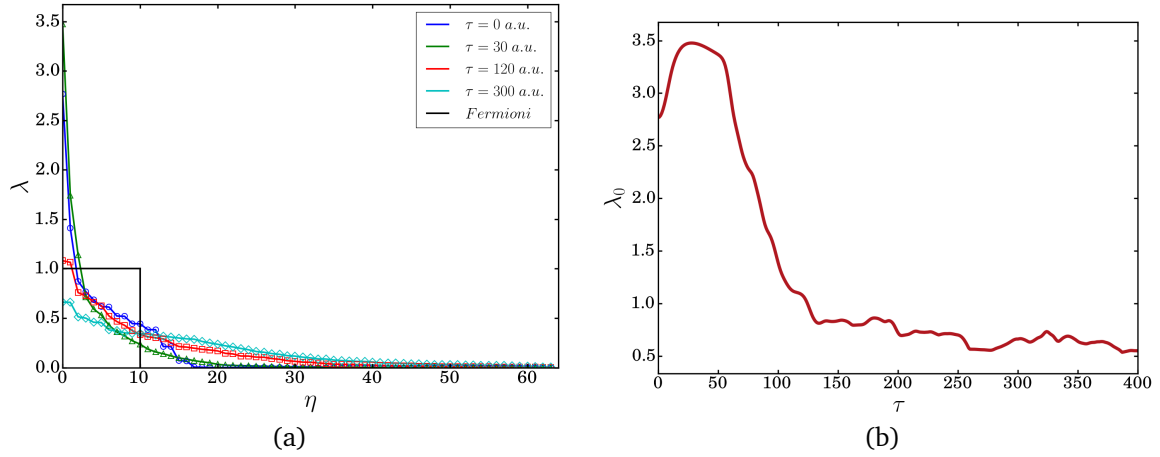
Na slikama 3.8 i 3.12 su prikazane popunjenosti prirodnih orbitala za različite vremenske trenutke i evolucija popunjenosti najniže prirodne orbitale u vremenu. Slika 3.8 prikazuje evoluciju popunjenosti za sustav bozona koji su prvotno stavljeni u harmoničku klopku u najniža energijska stanja bez početnog impulsa (slike 3.5 i 3.6). Može se vidjeti da HCB bozoni najviše zauzimaju najniža stanja i da zauzeće  $\lambda$  pada prema nuli za viša stanja. U slučaju fermiona zauzete su samo najniže prirodne orbitale u broju jednakom broju čestica  $N_f$  i njihova popunjenost se ne mijenja u



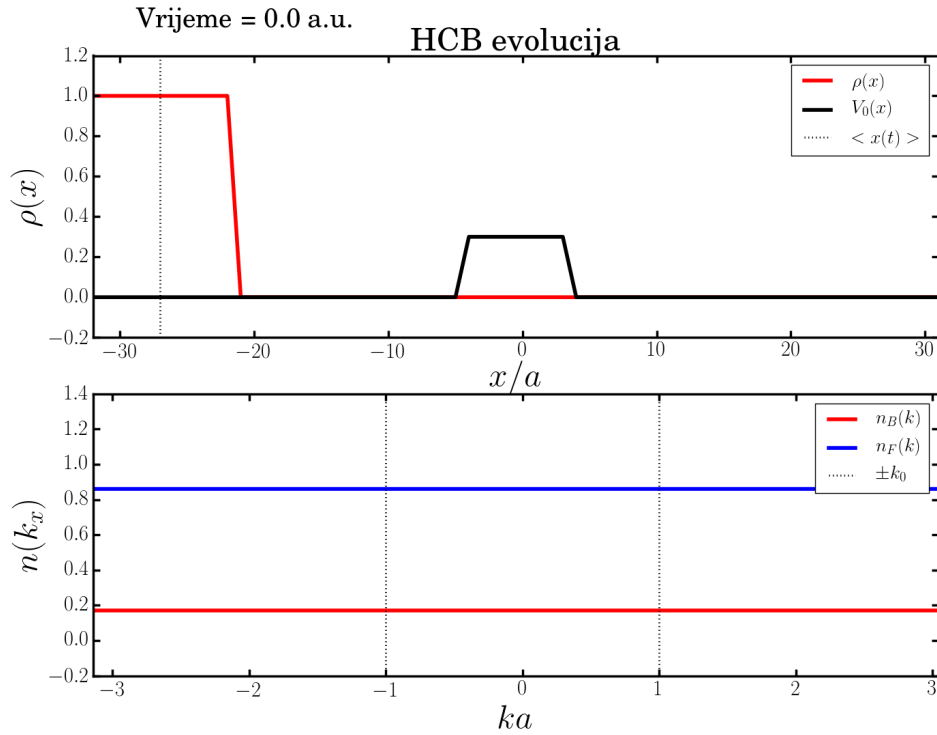
Slika 3.7: Gornji dio slike prikazuje harmonički potencijal  $V(x) = V_0 x^2$  s  $V_0 = 0.01$ , raspodjelu gustoće čestica i očekivani položaj čestica  $\langle x(t) \rangle$  za broj čvorova  $M = 64$  i broj čestica  $N = 11$  u trenutku  $\tau = 25.8$ . Na donjoj slici su prikazane raspodjele količine gibanja za neinteragirajuće fermione  $n_F$  i HCB bozone  $n_k$  za slučaj kada im je dan početni impuls  $k = \frac{\pi}{2}$ . Parametar preskakanja između čvorova je  $J = 0.252$ .

vremenu.

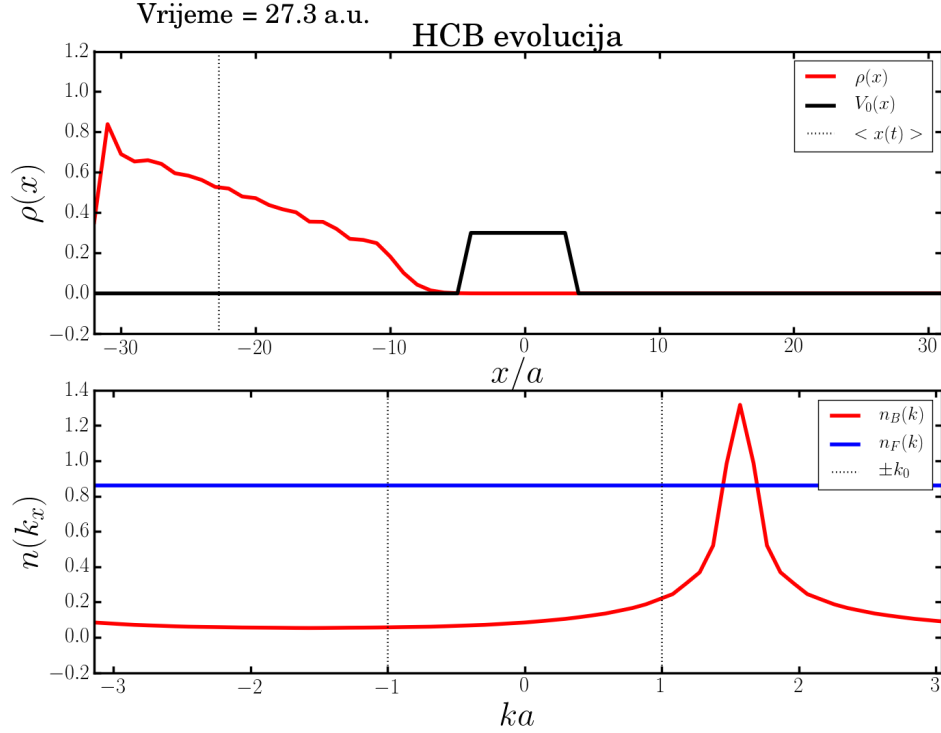
Slika 3.12 prikazuje evoluciju popunjenosti prirodnih orbitala za sustav HCB bozona koji su u početnom trenutku stavljeni u Fockova stanja na rubu rešetke te su pušteni propagirati se niz rešetku sa potencijalnom barijerom na sredini (slike 3.9, 3.10, 3.11). U ovom slučaju bozoni u početnom trenutku zauzimaju samo najniže prirodne orbitale (njih  $N_b$ ) što je ponašanje tipično za Mottov izolator [18]. Poslije se raspodjela mijenja i poprima sličan oblik kao i u prošlom primjeru.



Slika 3.8: Na slici (a) su s  $\eta$  označene prirodne orbitale, a s  $\lambda$  njihova popunjenost te je ona prikazana za nekoliko vremenskih trenutaka  $\tau = t \cdot E_R/\hbar$  za sistem sa slika 3.5 i 3.6. Na slici (b) je prikazana ovisnost popunjenosti najniže prirodne orbitale  $\lambda_0$  o vremenu  $\tau$  za isti sistem.



Slika 3.9: Gornji dio slike prikazuje potencijalnu barijeru, raspodjelu gustoće čestica i očekivani položaj čestica  $\langle x(t) \rangle$  za broj čvorova  $M = 64$  i broj čestica  $N = 11$  u trenutku  $\tau = 0$  gdje su čestice početno stavljene u Fockova stanja. Na donjoj slici su prikazane raspodjele količine gibanja za neinteragirajuće fermione  $n_F$  i HCB bozone  $n_k$  gdje se vidi potpuna neodređenost raspodjela. Parametar preskakanja između čvorova je  $J = 0.252$ .



Slika 3.10: Gornji dio slike prikazuje potencijalnu barijeru, raspodjelu gustoće čestica i očekivani položaj čestica  $\langle x(t) \rangle$  za broj čvorova  $M = 64$  i broj čestica  $N = 11$  u trenutku  $\tau = 27.3$  gdje su čestice početno stavljene u Fockova stanja. Na donjoj slici su prikazane raspodjele količine gibanja za neinteragirajuće fermione  $n_F$  i HCB bozone  $n_k$ . Parametar preskakanja između čvorova je  $J = 0.252$ .

## 4 Numeričko rješavanje Bose-Hubbardovog modela

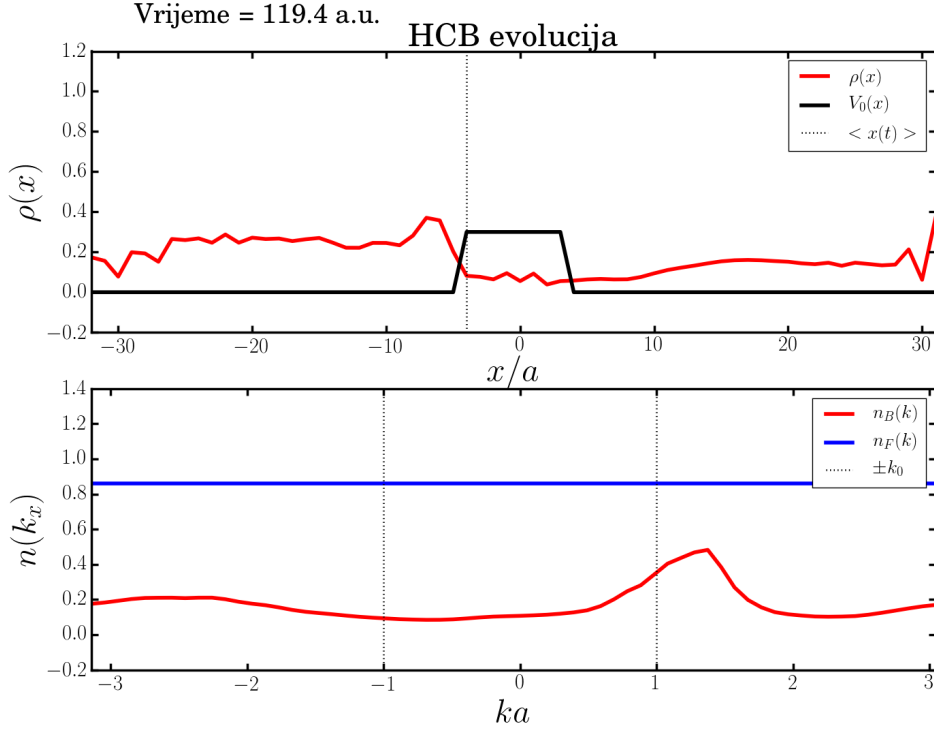
### 4.1 Egzaktna dijagonalizacija modela

U Bose-Hubbardovom modelu Hamiltonijan s fiksnim brojem čestica (za razliku od (3.12)) je dan s izrazom (isto kao i (2.1) uz ograničenje tuneliranja samo na prve susjede):

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.1)$$

gdje su  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) operatori stvaranja (poništenja) čestica na lokaciji  $i$ , a  $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$  operator broja koji daje broj čestica na lokaciji  $i$ . Prvi član u Hamiltonijanu je kinetički dio ( $\hat{H}_{kin}$ ) i opisuje preskakanje čestica između susjednih čvorova (suma ide samo po prvim susjedima). Drugi član je interakcijski dio ( $\hat{H}_{int}$ ) i u njemu je uzeto u obzir međudjelovanje svih parova čestica na svakom čvoru. Za vrijednosti parametra  $U > 0$  međudjelovanje je odbojno, dok je za  $U < 0$  privlačno [23].

Hamiltonijan  $\hat{H}$  posjeduje  $U(1)$  simetriju koja je povezana s očuvanjem ukup-



Slika 3.11: Gornji dio slike prikazuje potencijalnu barijeru, raspodjelu gustoće čestica i očekivani položaj čestica  $\langle x(t) \rangle$  za broj čvorova  $M = 64$  i broj čestica  $N = 11$  u trenutku  $\tau = 119.4$  gdje su čestice početno stavljene u Fockova stanja. Na donjoj slici su prikazane raspodjele količine gibanja za neinteragirajuće fermione  $n_F$  i HCB bozone  $n_k$ . Parametar preskakanja između čvorova je  $J = 0.252$ .

nog broja čestica u sistemu,  $\hat{N} = \sum_{i=1}^M \hat{n}_i$ . Osim toga, Hamiltonijan je invarijantan na transformacije  $(a_i^\dagger, a_i) \rightarrow (a_i^\dagger e^{i\theta}, a_i e^{-i\theta}) = e^{i\hat{N}\theta} (a_i^\dagger, a_i) e^{-i\hat{N}\theta}$ . Ako vrijede periodični rubni uvjeti, tada je Hamiltonijan invarijantan i na transformaciju  $(a_i^\dagger, a_i) \rightarrow (a_{i+1}^\dagger, a_{i+1})$  koju generira operator ukupne kvazi količine gibanja sistema:

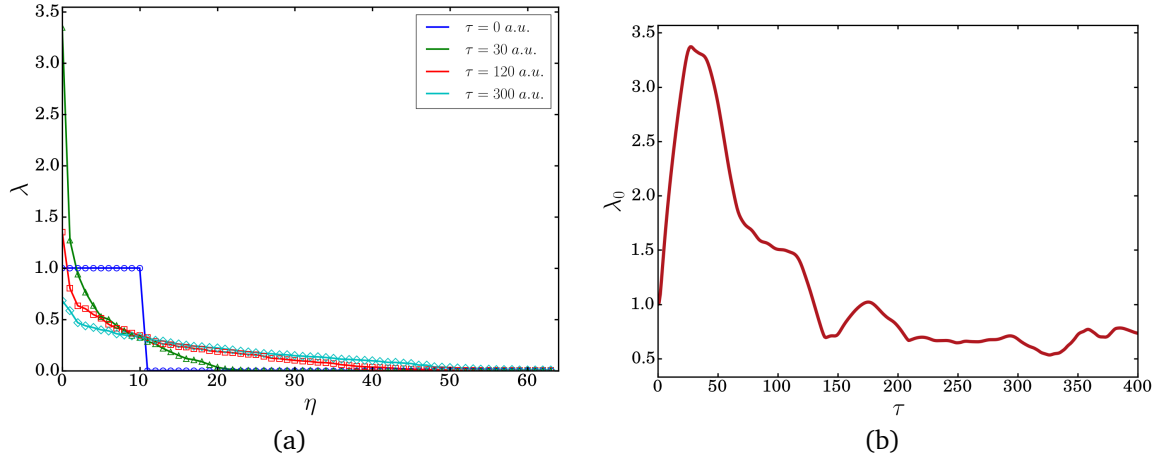
$$\hat{K} = \sum_{q=0}^{M-1} \left( \frac{2\pi q}{M} \right) b_q^\dagger b_q$$

te vrijedi  $e^{-i\hat{K}} (a_i^\dagger, a_i) e^{i\hat{K}} = (a_{i+1}^\dagger, a_{i+1})$ . Operator  $b_q^\dagger$  stvara česticu kvazi količine gibanja  $(2\pi q/M)$  i dan je s izrazom:

$$b_q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{j=1}^M e^{i(j2\pi q/M)} a_j^\dagger$$

Hamiltonijan zapisan preko  $(b_q^\dagger, b_q)$  glasi [23, 7]:

$$\hat{H} = -2J \sum_{q=0}^{M-1} \cos \left( \frac{2\pi q}{M} \right) b_q^\dagger b_q + \frac{U}{2M} \sum_{q_1, q_2=0}^{M-1} \sum_{q_3, q_4=0}^{M-1} b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} \delta_{q_1+q_2, q_3+q_4} \quad (4.2)$$



Slika 3.12: Na Slici (a) su s  $\eta$  označene prirodne orbitale, a s  $\lambda$  njihova popunjenost te je ona prikazana za nekoliko vremenskih trenutaka  $\tau = t \cdot E_R/\hbar$  za sistem sa slika 3.9, 3.10 i 3.11. Na Slici (b) je prikazana ovisnost popunjenosti najniže prirodne orbitale  $\lambda_0$  o vremenu  $\tau$  za isti sistem.

Može se pokazati da je Hamiltonijan dan izrazom (4.2) ekvivalentan onom iz izraza (4.1). Prvi član u izrazu (4.2) se može zapisati kao:

$$-2J \sum_{q=0}^{M-1} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{i(2\pi qj/M)} a_j^\dagger \sum_{l=1}^M e^{-i(2\pi ql/M)} a_l$$

Raspiše li se  $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$ , u gornjem izrazu se pojavljuje suma:

$$\sum_{q=0}^{M-1} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \left[ \cos\left(\frac{2\pi q}{M}(j-l)\right) + i \sin\left(\frac{2\pi q}{M}(l-j)\right) \right]$$

Iskoriste li se izrazi za sume ( $i, j \in Z$ ):

$$\sum_{n=0}^{M-1} \sin\left(\frac{2\pi n}{M}i\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{M}j\right) = \frac{M}{2}\delta_{i,j} - \frac{M}{2}\delta_{i,-j}$$

$$\sum_{n=0}^{M-1} \cos\left(\frac{2\pi n}{M}i\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{M}j\right) = \frac{M}{2}\delta_{i,j} + \frac{M}{2}\delta_{i,-j}$$

$$\sum_{n=0}^{M-1} \sin\left(\frac{2\pi n}{M}i\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{M}j\right) = 0$$

ukupno za prvi član slijedi:

$$-J \sum_{j=1}^M a_j^\dagger \sum_{l=1}^M a_l (\delta_{1,j-l} + \delta_{1,l-j}) = -J \sum_{j=1}^M (a_j^\dagger a_{j-1} + a_j^\dagger a_{j+1})$$

što je ekvivalentno prvom članu u izrazu (4.1). Za drugi član nakon raspisa slijedi:

$$\frac{U}{2M^3} \sum_{q_1, q_2} \sum_{q_3, q_4} \sum_{j_1, j_2} \sum_{j_3, j_4} e^{i(2\pi q_1 j_1/M)} a_{j_1}^\dagger e^{i(2\pi q_2 j_2/M)} a_{j_2}^\dagger e^{i(-2\pi q_3 j_3/M)} a_{j_3} e^{i(-2\pi q_4 j_4/M)} a_{j_4} \delta_{q_1+q_2, q_3+q_4}$$

Zbog Kroneckerove funkcije može se izraziti jedan od gornjih indeksa preko ostalih, npr.  $q_4 = q_1 + q_2 - q_3$ . Tada se pojavljuju sume koje je moguće riješiti pomoću izraza:

$$\sum_{q=0}^{M-1} e^{i(2\pi q j/M)} e^{-i(2\pi q l/M)} = M \delta_{j,l}$$

Za drugi član u Hamiltonijanu slijedi:

$$\frac{U}{2M^3} \sum_{j_1, j_2} \sum_{j_3, j_4} M^3 a_{j_1}^\dagger a_{j_2}^\dagger a_{j_3} a_{j_4} \delta_{j_1, j_4} \delta_{j_2, j_4} \delta_{j_3, j_4} = \frac{U}{2} \sum_{j=1}^M a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_j$$

Za operatore dizanja i spuštanja vrijedi komutacijska relacija  $[a_j, a_j^\dagger] = 1$  pa se dobiva:

$$\frac{U}{2} \sum_{j=1}^M a_j^\dagger (a_j a_j^\dagger - 1) a_j = \frac{U}{2} \sum_{j=1}^M \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1)$$

što je jednako interakcijskom članu u jednadžbi (4.1). Hamiltonijan također posjeduje refleksijsku simetriju, odnosno invarijantnost na transformaciju  $(a_i^\dagger, a_i) \rightarrow (a_{M-i}^\dagger, a_{M-i})$ . Refleksijska i translacijska simetrija zajedno čine  $D_M$  simetriju, odnosno sustav se ponaša kao da su čvorovi ekvidistantno poredani po kružnici. Sve skupa Bose-Hubbardov model posjeduje  $U(1) \otimes D_M$  simetriju [23].

Ako sustav sadrži  $M$  lokacija i  $N$  bozona tada je ukupni broj konfiguracija sustava jednak:

$$D = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!}$$

što odgovara i dimenziji prostora stanja sustava. Za bazu sustava se mogu uzeti



vektori  $\{|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle\}$ , gdje  $n_i$  odgovara broju bozona na lokaciji  $i$  te vrijedi:

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \quad (4.3)$$

U ovoj bazi interakcijski član  $\hat{H}_{int}$  je dijagonalan, dok kinetički član  $\hat{H}_{kin}$  predstavlja nedijagonalne elemente. Elementi Hamiltonijana se računaju iz izraza:

$$H_{uv} = \langle u | \hat{H} | v \rangle \quad (4.4)$$

Za dobivanje energija i svojstvenih vektora Hamiltonijan  $\hat{H}$  je potrebno dijagonalizirati, što se u ovom slučaju radi numerički u programskom jeziku Python. Glavni problem kod računanja Hamiltonijana je potrebna računalna memorija koja, u slučaju računanja svih elemenata Hamiltonijana, raste s  $D^2$ . S obzirom da je u jednom stupcu najviše  $2M + 1$  elemenata Hamiltonijana različito od nule, pogodno bi bilo pronaći način kako računati samo te elemente, a ostale automatski staviti da su nula. Interakcijski član odmah daje iznose svojih elemenata jer djelovanjem  $\hat{H}_{int}$  na vektor  $|v\rangle$  on se ne mijenja već biva samo pomnožen s nekim skalarom ovisno o zaposjednućima čvorova. Tada se može jednostavno napraviti skalarni umnožak između vektora  $|v\rangle$  i  $\langle u|$  koji daje 1 ako su vektori isti i 0 ako nisu. Djelovanjem  $\hat{H}_{kin}$  na  $|v\rangle$  dobiva se kombinacija nekih drugih vektora pomnoženih s odgovarajućim skalarima koji ponovo ovise o zaposjednućima čvorova. Potrebno je znati koji su to vektori kako bi se mogao napraviti skalarni umnožak s vektorom  $\langle u|$ . Vektori baze se nakon generiranja spremaju u matricu  $A$  dimenzija  $D \times M$ , gdje svaki redak predstavlja vektor baze definiran jednadžbom (4.3). Za razlikovanje vektora baze, umjesto uspoređivanja pojedinih elemenata vektora, definira se tagging funkcija koja je jedinstvena za svaki vektor [23]:

$$T(v) \equiv T(A_{v1}, A_{v2}, \dots, A_{vM})$$

Na taj način moguće je računati skalarne umnoške između vektora baze uspoređivanjem vrijednosti tagging funkcije za različite vektore. Za funkciju  $T(v)$  je bitno da je jedinstvena za svaki vektor i da po mogućnosti ima što jednostavniji oblik. Jedan mogući izbor tagging funkcije je:

$$T(v) = \sum_{i=1}^M \sqrt{p_i} A_{vi} \quad (4.5)$$

gdje je  $p_i$   $i$ -ti prosti broj. Druge mogućnosti tagging funkcija su primjerice  $T(v) = \sum_{i=1}^M (\ln p_i) A_{vi}$  ili funkcija identičnog oblika kao ona u jednadžbi (4.5) samo uz  $p_i = 100 * i + 3$  [23].

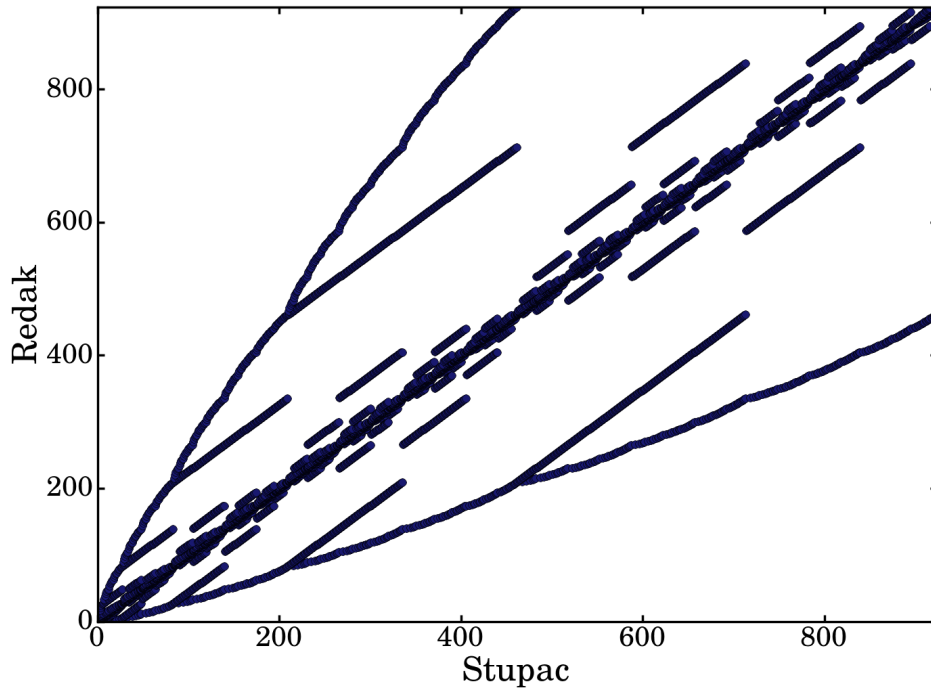
S obzirom na veliki broj nul elemenata u Hamiltonijanu, potrebno je odrediti koji se točno vektori dobiju djelovanjem  $\hat{H}_{kin}$  na  $|v\rangle$ . Tada se ti vektori, odnosno njihove pozicije među ostalim vektorima stanja pronadū te se tako zna koji su elementi Hamiltonijana različiti od 0. Vektori stanja se traže tako da se u jednu listu sprema tagovi svih vektora poredani po veličini. U Pythonu se lista može sortirati npr. naredbom:

$$\text{Tsort} = \text{sorted}(\text{Tsort})$$

gdje je sada lista Tsort sortirana od najmanje do najveće vrijednosti. U drugu listu ind se sprema pozicije vektora u cjelokupnoj bazi stanja te se ona sortira preko Tsort tako da pozicija vektora s tagom Tsort[ $i$ ] odgovara ind[ $i$ ]. Tako se poznavanjem taga, odnosno njegove pozicije u Tsort može odrediti pozicija njemu pripadajućeg vektora među vektorima stanja. Umjesto provjeravanja iznosa svakog elementa u Tsort kod računanja Hamiltonijana, za što je u prosjeku potrebno  $D/2$  pokušaja da bi se pronašao odgovarajući element, u sortiranom polju se može iskoristiti Newtonova binarna metoda kod koje je potrebno maksimalno  $\log_2 D$  pokušaja za pronalaženje traženog elementa, gdje je  $D$  dimenzija sistema i veličina liste Tsort [23]. Na slici 4.1 je prikazana popunjenost matrice Hamiltonijana za sustav  $M = 7$ ,  $N = 6$ ,  $D = 924$ , gdje su tamnoplavim točkama označeni elementi Hamiltonijana različiti od nule. Kao što je vidljivo, Hamiltonijan je rijetko popunjen i većina elemenata je jednaka nuli.

## 4.2 Primjer za nekoliko vrijednosti $M$ i $N$

U slučaju dvije čestice i tri čvora dimenzija prostora stanja je  $D = 6$ . Vektori koji opisuju zauzeće pojedinih stanja su dani u tablici 4.1. Vektori baze se općenito konstruiraju tako da se prvim vektorom proglašuje vektor gdje su sve čestice na prvoj lokaciji. Potom se jedna čestica makne s prve lokacije te se promatraju sve kombinacije počevši od položaja te čestice na drugom čvoru pa sve do  $M$ -tog čvora. Zatim se s prvog čvora makne još jedna čestica te se ponovno promatraju sve kombinacije. Kada se s prvog čvora maknu sve čestice postupak se ponavlja za drugi čvor i tako do kraja,



Slika 4.1: Popunjenost Hamiltonijana za  $M = 7$ ,  $N = 6$ ,  $D = 924$ . Tamnoplavim točkama na odgovarajućim koordinatama u matrici su označeni elementi različiti od nule. Broj elemenata različitih od nule je  $nz = 7392$  i prosječan broj elemenata različitih od nule po stupcu je 8.

$v$	$n_1$	$n_2$	$n_3$
1	2	0	0
2	1	1	0
3	1	0	1
4	0	2	0
5	0	1	1
6	0	0	2

Tablica 4.1: Vektori baze za  $M = 3$  i  $N = 2$

odnosno  $D$ -tog vektora u bazi gdje su sve čestice na  $M$ -tom čvoru <sup>4</sup>.

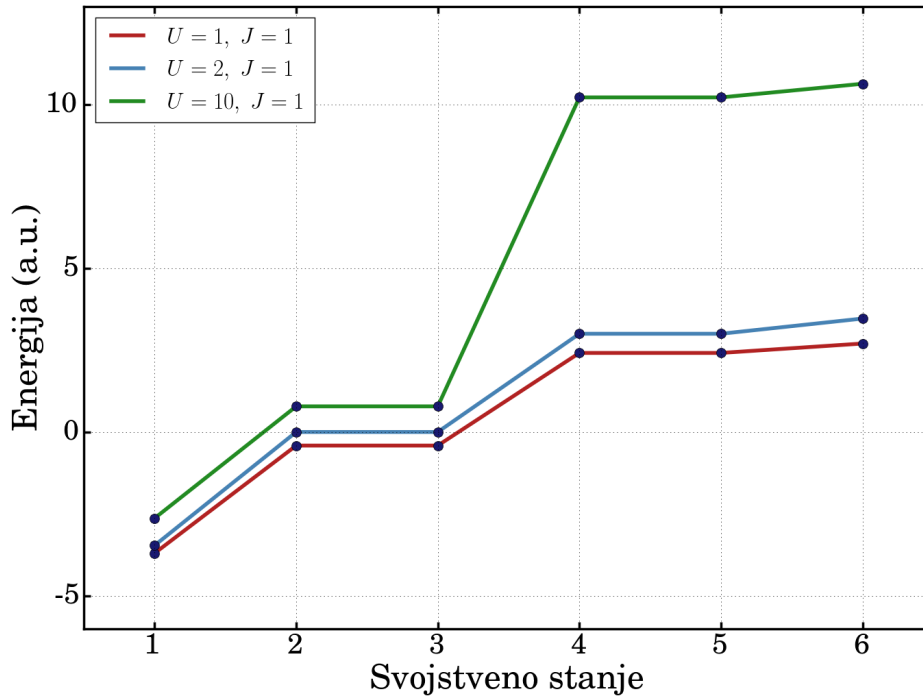
Pošto je djelovanje Hamiltonijana na vektore baze iz tablice 4.1 poznato moguće je konstruirati matricu Hamiltonijana gdje su elementi matrice dani izrazom (4.4). Matrica se u Pythonu dijagonalizira naredbom:

$$w, v = \text{eig}(H)$$

gdje su u listu  $w$  dimenzije  $1 \times D$  spremljene svojstvene energije sustava, a u stupce matrice  $v$  dimenzije  $D \times D$  svojstveni vektori. Svojstvene energije i vektori ovise o

<sup>4</sup>Za generiranje vektora baze u Pythonu korišten je kod profesora Pedersena s MIT-a, <https://github.com/georglind/bosehubbard>

parametrima  $U$  i  $J$  u Hamiltonijanu. Na slici 4.2 dane su energije za sustav s  $M = 3$  i  $N = 2$  za tri različite vrijednosti parametra  $U$  uz  $J = 1$ . Sa slike 4.2 se može primijetiti degeneracija pojedinih svojstvenih energija koja je posljedica simetrije sustava<sup>5</sup>.



Slika 4.2: Svojstvene energije sustava za  $J = 1$  i  $U = 1, 2, 10$ . Broj čvorova i čestica je  $M = 3$ ,  $N = 2$ .

Degeneracija se može ukloniti umetanjem potencijalne klopke u sustav koja je i prisutna u realnim fizikalnim situacijama. Klopka može primjerice biti harmonička:

$$\hat{V} = V_0 \sum_{k=1}^M k^2 \hat{n}_k \quad (4.6)$$

U eksperimentu klopka služi za početno zarobljavanje čestica nakon čega se na sustav nametne periodični potencijal optičke rešetke. Na slici 4.3 su prikazane svojstvene energije za isti sustav ( $J = 1$ ;  $U = 1, 2, 10$ ) uz dodanu klopku s parametrom  $V_0 = 1$ , gdje se vidi da je degeneracija u ovom slučaju uklonjena. Nametanjem klopki drugačijih oblika moguće je da se degeneracija ne ukloni.

Na slici 4.4 prikazane su svojstvene energije za slučaj  $N = 1$  čestice na  $M = 50$  čvorova što odgovara Blochovom problemu razmatranom u potpoglavlju 2.2. Svojstvene energije pokazuju slično ponašanje kao u najnižoj vrpici na slici 2.4 što je i očekivano. Degeneracija koja se pojavljuje u energijama je ekvivalentna onoj na

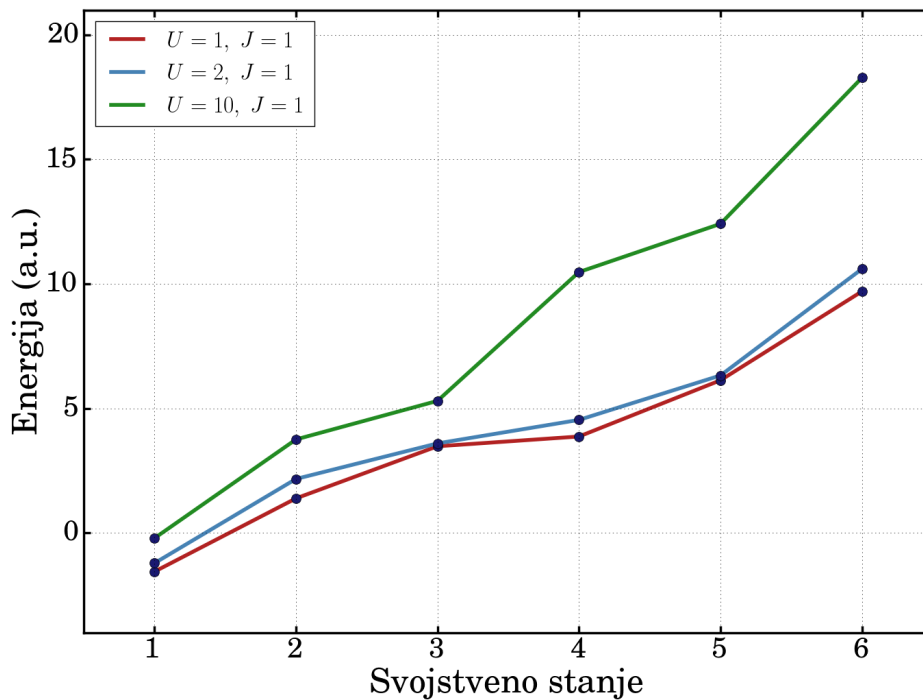
<sup>5</sup>Parametri Hamiltonijana se ponovno mogu izraziti u jedinicama  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$  čime energija postaje bezdimenzionalna.

slici 2.4 i odgovara dvama zrcalnim iznosima količine gibanja. Može se napraviti usporedba rezultata dobivenih ovim dvama metodama povežu li se parametar preskakanja  $J$  i dubina potencijalne rešetke  $V_0$  nekom od aproksimativnih metoda iz potpoglavlja 3.4 i 3.5. Energije dobivene u ova dva slučaja nisu identične, ali se razlikuju za neku konstantnu vrijednost, dok su širine energijskih vrpce približno jednake za svaku kombinaciju parametara  $J$  i  $V_0$ .

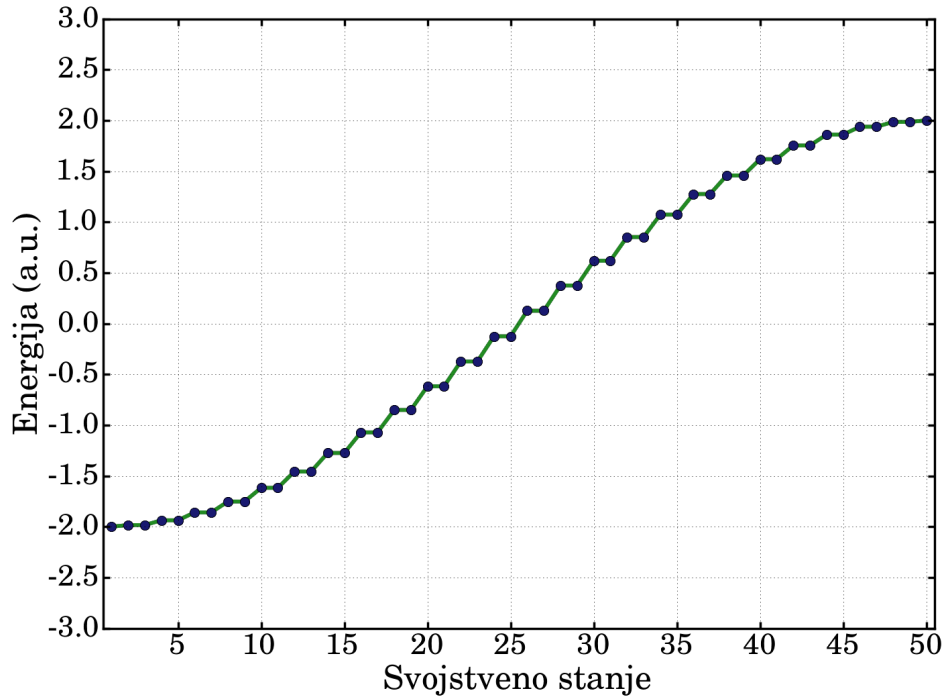
U Fockovoj bazi za svako stanje broj čestica na čvorovima je definiran, međutim, za svojstvena stanja postoje samo očekivane vrijednosti broja čestica po čvoru. Očekivana vrijednost broja čestica za  $i$ -ti čvor u  $k$ -tom svojstvenom stanju  $|\psi_k\rangle$  je:

$$\langle \psi_k | \hat{n}_i | \psi_k \rangle = \sum_{l=1}^D \sum_{j=1}^D a_{lk}^* a_{jk} \langle n_1, \dots, n_M | \hat{n}_i | n_1, \dots, n_M \rangle_j = \sum_{j=1}^D |a_{jk}|^2 n_i^{(j)} \quad (4.7)$$

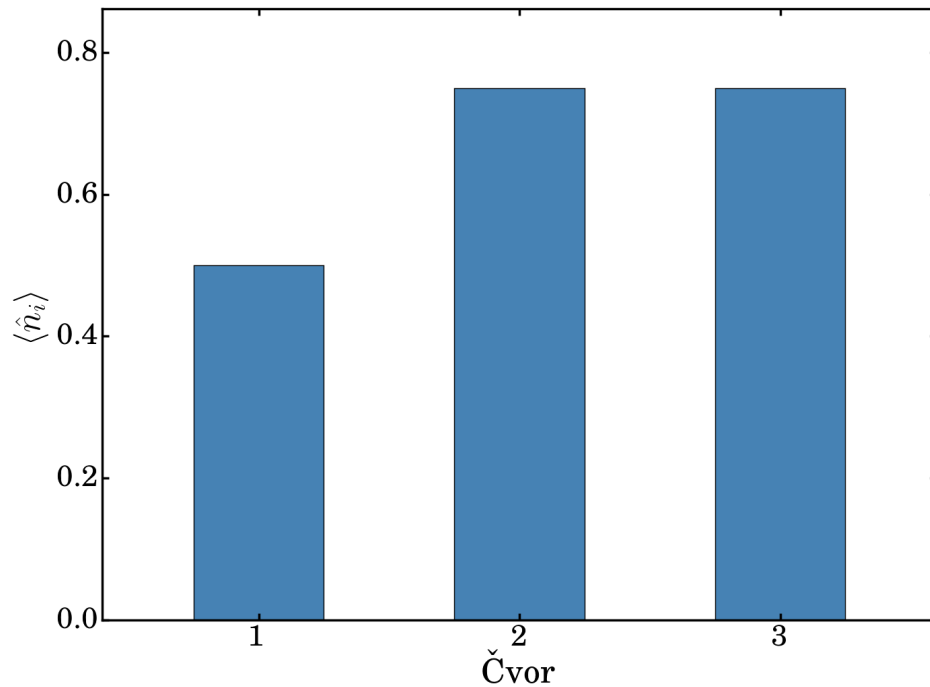
gdje je  $n_i^{(j)}$  broj čestica na  $i$ -tom čvoru u  $j$ -tom stanju  $n$ -baze, a  $a_{jk} = \langle n_1, \dots, n_M | \psi_k \rangle_j$  su koeficijenti razvoja svojstvenih stanja u Fockovoj bazi te ujedno i elementi matrice koja dijagonalizira Hamiltonijan ( $k$ -ti stupac) iz Fockove baze. Kao i svojstvene energije, očekivana vrijednost broja čestica po čvorovima je bez klopke degenerirana, dok se dodavanjem klopke degeneracija miče (slika 4.6).



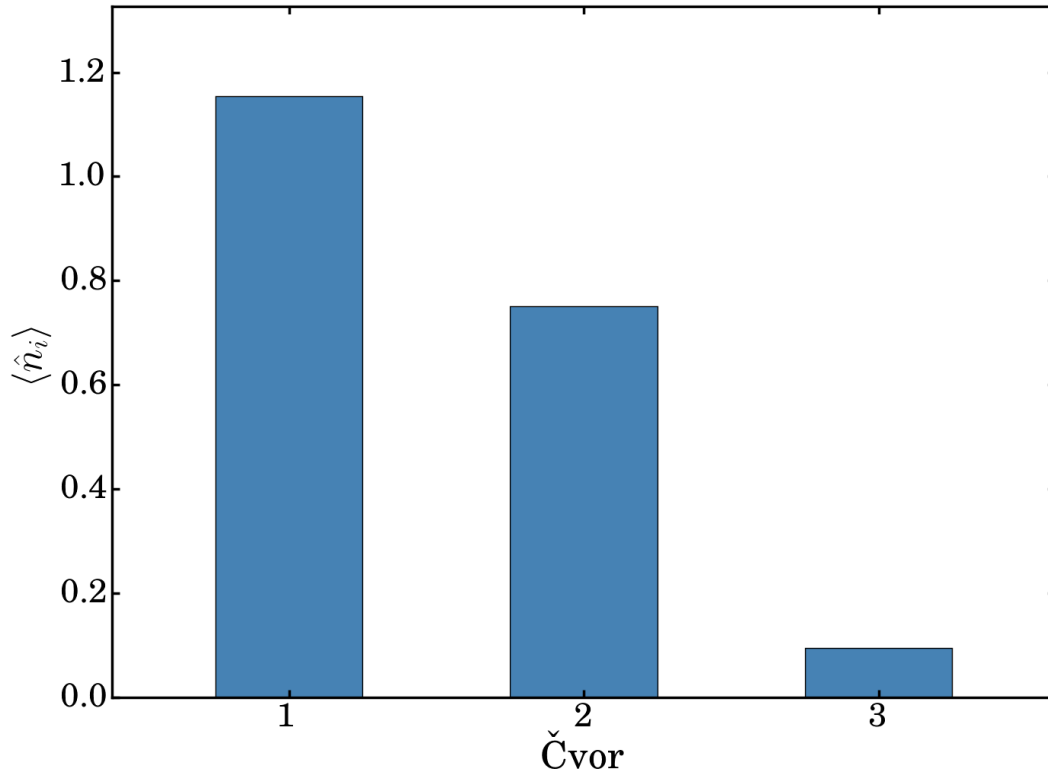
Slika 4.3: Svojstvene energije sustava za  $J = 1$  i  $U = 1, 2, 10$ . U sustav je dodana klopka iz jednadžbe s vrijednosti parametra  $V_0 = 1$  čime je uklonjena degeneracija svojstvenih energija. Klopke mogu imati različite oblike i ne uklanjaju sve nužno degeneraciju.



Slika 4.4: Svojtvene energije sustava  $M = 50$ ,  $N = 1$  za  $J = 1$  i  $U = 1$ . Energije pokazuju slično ponašanje najnižoj vrpci sa slike 2.4 i posjeduju dvostruku degeneraciju. Energija ne ovisi o parametru  $U$  jer ne postoji interakcija s drugim česticama, dok ovisi proporcionalno o parametru  $J$ .



Slika 4.5: Očekivana vrijednost broja čestica po čvorovima  $\langle \hat{n}_i \rangle$  za sustav  $M = 3$ ,  $N = 2$  za svojstveno stanje  $|\psi_2\rangle$ . Bez klopke u sustavu postoji degeneracija očekivanih vrijednosti.



Slika 4.6: Očekivana vrijednost broja čestica po čvorovima  $\langle \hat{n}_i \rangle$  za sustav  $M = 3$ ,  $N = 2$  za svojstveno stanje  $|\psi_2\rangle$ . U sustav je dodana klopka prema jednadžbi (4.6) s vrijednosti parametra  $V_0 = 1$  čime je uklonjena degeneracija očekivanih vrijednosti.

Za očekivane vrijednosti broja čestica po čvoru mora vrijediti:

$$\sum_{i=1}^M \langle \hat{n}_i \rangle = \sum_{i=1}^M \langle \psi_k | \hat{n}_i | \psi_k \rangle = N$$

gdje je  $N$  ukupan broj čestica u sustavu. Treba reći da klopka mora biti asimetrična kako bi se uklonila degeneracija, u slučaju da nije moguće je da neke svojstvene energije budu degenerirane.

Ono što se isto tako može promatrati je situacija u kojoj je sustav pripremljen u nekom stanju Fockove baze, gdje nas zanima vjerojatnost nalaženja sustava u nekom njegovom svojstvenom stanju u vremenu  $t$ . Općenito stanje  $|\phi\rangle$  se preko svojstvenih stanja  $|\psi_k\rangle$  izražava na način [2]:

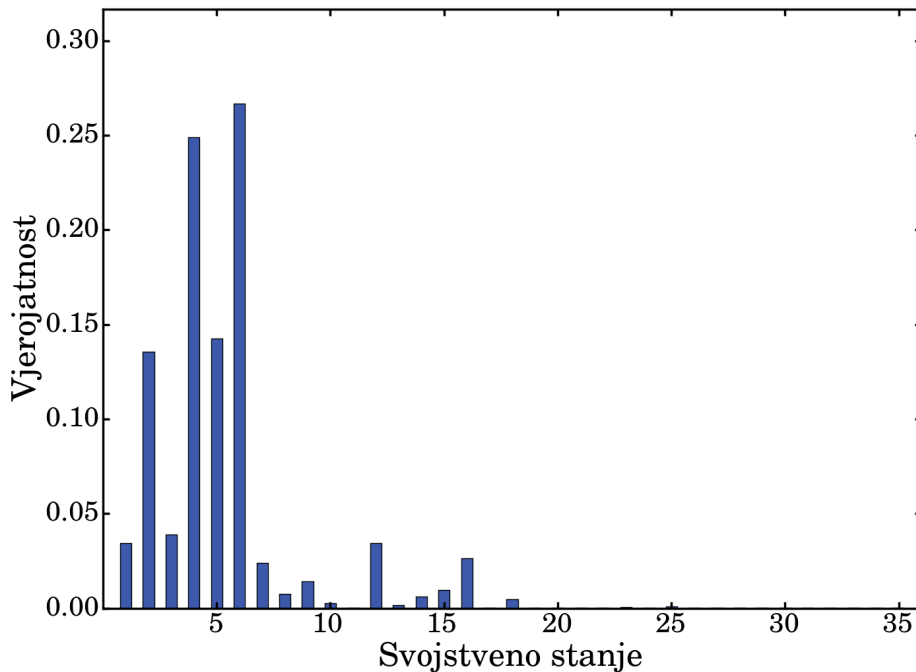
$$|\phi\rangle = \sum_k c_k(t) |\psi_k\rangle = \sum_k c_k(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} |\psi_k\rangle$$

gdje su  $E_k$  svojstvene energije sustava. Ako se sustav početno nalazi u stanju Fockove

baze  $|n_1, \dots, n_M\rangle_j$  vjerojatnost nalaženja sustava u stanju  $|\psi_k\rangle$  je:

$$\left| \langle \psi_k | n_1, \dots, n_M \rangle_j \right|^2 = |c_k(0)|^2 = |a_{jk}|^2$$

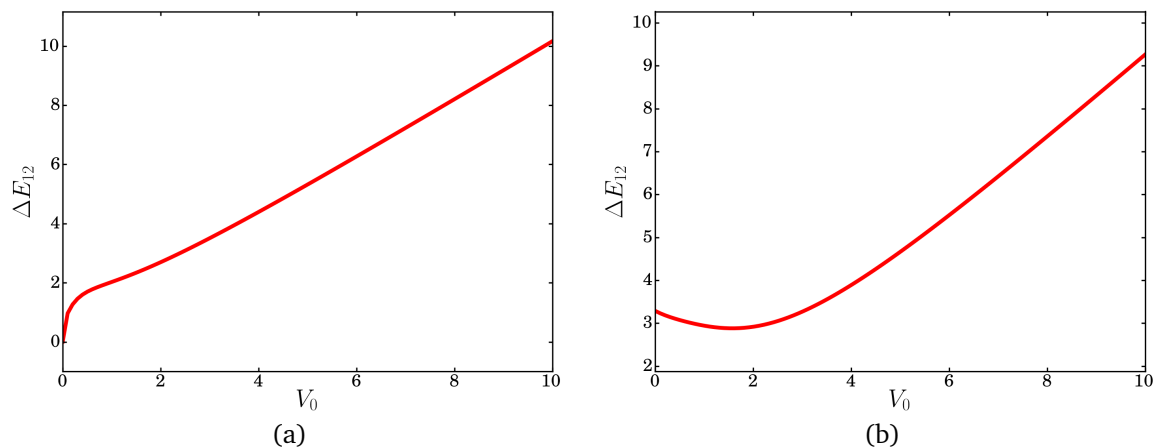
gdje su koeficijenti  $a_{jk}$  isti kao u jednadžbi (4.7). Vjerojatnost nalaženja sustava u nekom svojstvenom stanju  $|\psi_k\rangle$  se ne mijenja u vremenu, odnosno ako sustav početno nije sadržavao primjesu stanja  $|\psi_k\rangle$  neće se niti s vremenskom evolucijom moći naći u tom stanju. Na slici 4.7 su prikazane vjerojatnosti zauzimanja svojstvenih stanja za sustav  $M = 4, N = 4$  koji se na početku nalazio u stanju  $|4, 0, 0, 0\rangle$ . Vjerojatnost je



Slika 4.7: Vjerojatnost zauzeća pojedinih svojstvenih stanja za sustav  $M = 4, N = 4$  koji se početno nalazio u stanju Fockove baze  $|4, 0, 0, 0\rangle$ . Vrijednosti parametara sustava su  $U = 1, J = 1, V_0 = 1$ . Vjerojatnosti su najveće za ona stanja koja imaju raspodjelu  $\langle \hat{n}_i \rangle$  sličnu raspodjeli početnog stanja.

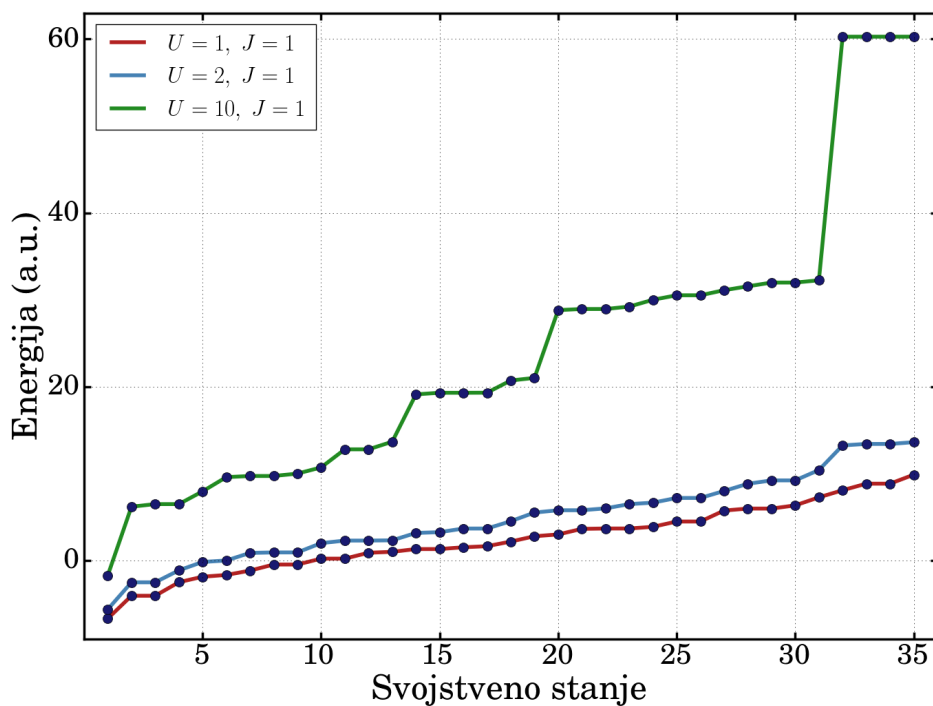
najveća za ona svojstvena stanja koja imaju najbližnju raspodjelu  $\langle \hat{n}_i \rangle$  početnom stanju  $|4, 0, 0, 0\rangle$ . Na slici 4.9 su prikazane svojstvene energije za sustav  $M = 4, N = 4$  s klopkom gdje se vidi slično ponašanje svojstvenih energija kao i za prije razmatrani sustav s  $M = 3, N = 2$ . Raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle$  za svojstveno stanje s najvećom vjerojatnosti zauzeća (šesti stupac na slici 4.7) za sustav koji se početno nalazio u stanju  $|4, 0, 0, 0\rangle$  je prikazana na slici 4.11, te se vidi "sličnost" raspodjele s početnim stanjem. Pusti li se parametar klopke da divergira  $V_0 \rightarrow \pm\infty$ , dijagonalni elementi u Hamiltonijanu



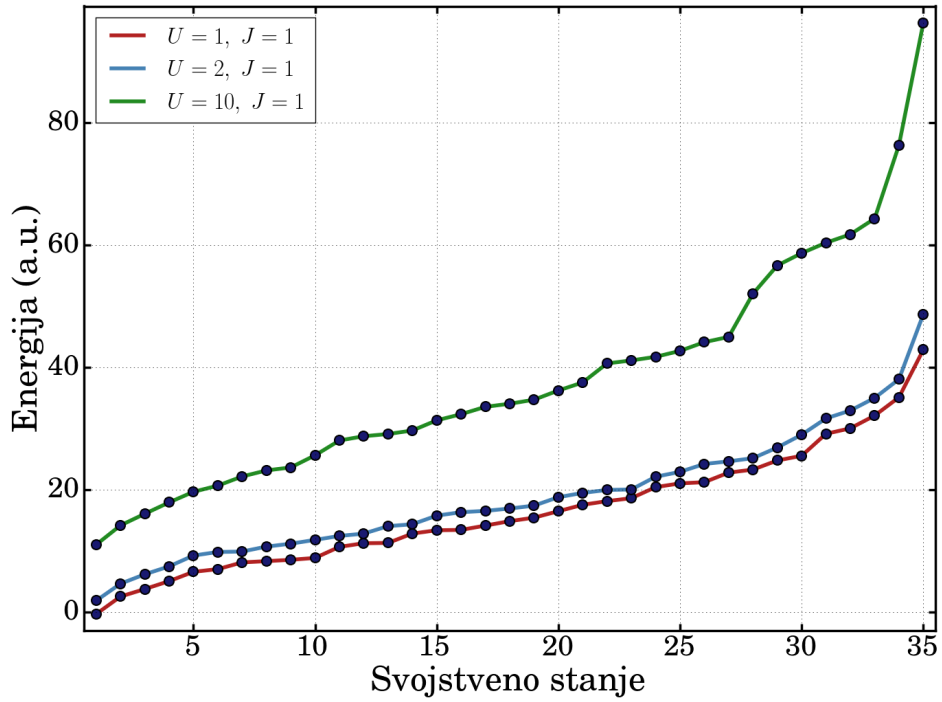


Slika 4.8: (a) Razmak između najnižeg i prvog pobuđenog stanja u ovisnosti o parametru  $V_0$  iz jednadžbe (4.6) za sustav  $M = 50$ ,  $N = 1$ . (b) Isto za sustav  $M = 3$ ,  $N = 2$ .

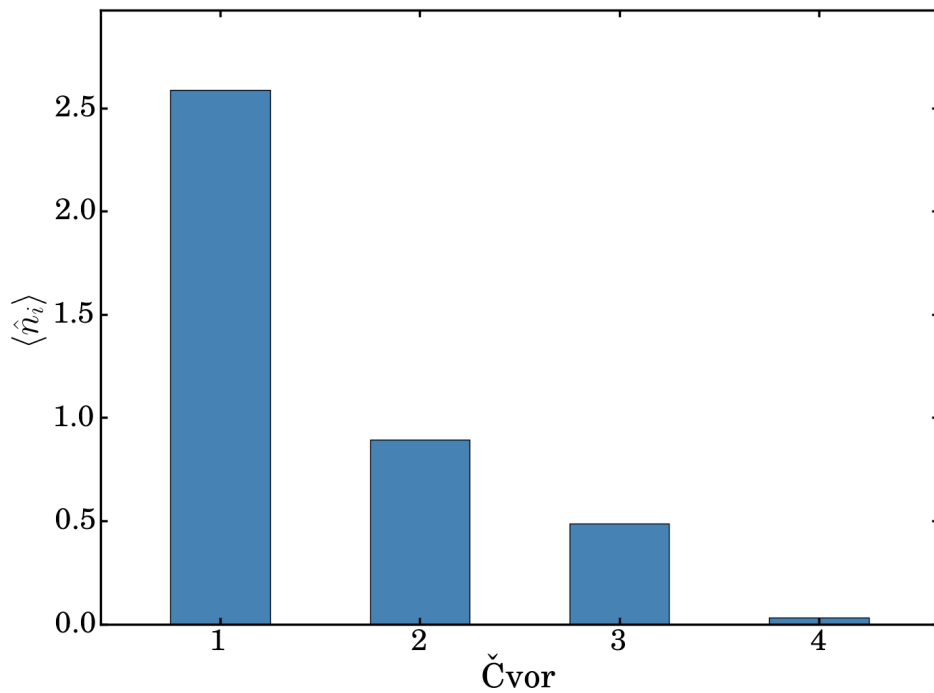
prevladaju i Fockova stanja praktički postaju svojstvenim stanjima Hamiltonijana. Na slici 4.12 su za  $M = 4$ ,  $N = 4$  prikazane vjerojatnosti nalaženja sustava u svojstvenim stanjima za početno stanje  $|4, 0, 0, 0\rangle$  te raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle$  za iznos parametra klopke  $V_0 = 100$ . Sustav ima gotovo stopostotnu vjerojatnost nalaženja u prvom svojstvenom stanju, koje ima gotovo identičnu raspodjelu  $\langle \hat{n}_i \rangle$  kao i početno Fockovo stanje. Ostala svojstvena stanja također po raspodjelama  $\langle \hat{n}_i \rangle$  približno odgovaraju Fockovim stanjima.



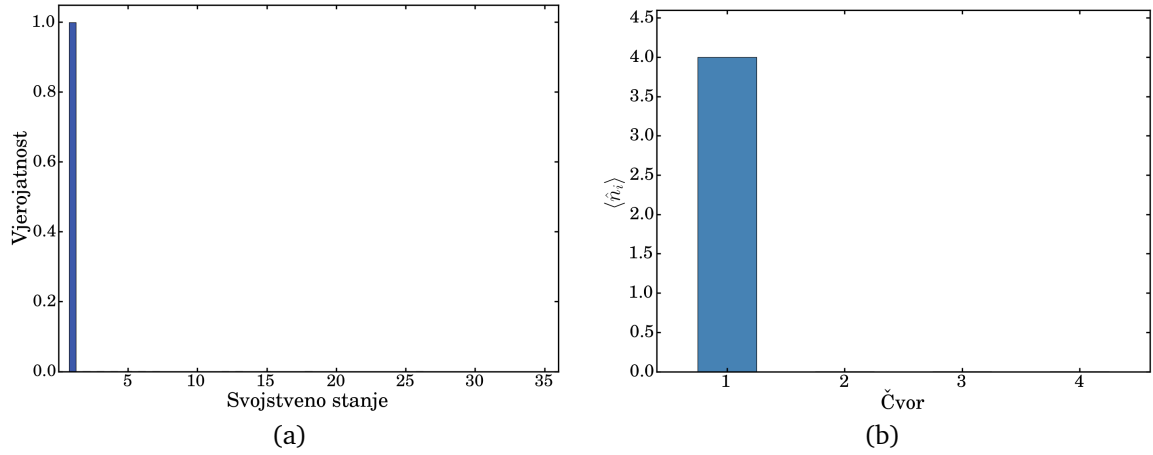
Slika 4.9: Svojstvene energije za sustav  $M = 4$ ,  $N = 4$ . Vrijednosti parametara su  $J = 1$ ,  $V_0 = 0$ ,  $U = 1, 2, 10$ .



Slika 4.10: Svojstvene energije za sustav  $M = 4$ ,  $N = 4$ . Vrijednosti parametara su  $J = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $U = 1, 2, 10$ . Vanjski potencijal ponovno uklanja degeneraciju.



Slika 4.11: Očekivana vrijednost  $\langle \hat{n}_i \rangle$  za sustav  $M = 4$ ,  $N = 4$  za svojstveno stanje  $|\psi_6\rangle$ . Parametri sustava su  $J = 1$ ,  $U = 1$ ,  $V_0 = 1$ .



Slika 4.12: Pod (a) je prikazana vjerojatnost nalaženja sustava u svojstvenim stanjima za  $M = 4$ ,  $N = 4$  i početno stanje  $|4, 0, 0, 0\rangle$ . Pod (b) je raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle$  za prvo i najvjerojatnije zaposjednuto svojstveno stanje gdje se vidi da je raspodjela gotovo ista kao ona za početno Fockovo stanje. Parametri sustava su  $U = 1$ ,  $J = 1$ ,  $V_0 = 100$ .

### 4.3 Potencijal s dvostrukom jamom

Na bozone u optičkoj rešetci mogu se nametnuti razni vanjski potencijali koji utječu na ponašanje sustava. Možemo promotriti evoluciju u vremenu sustava koji se u početku nalazio u nekom od Fockovih stanja i pratiti kako se mijenja očekivana vrijednost broja čestica po čvorovima. Hamiltonijan sustava se konstruira na isti način kao u odjeljku 4.1 kao i vektori baze. Ako se sustav u početku nalazio u stanju  $|n_i(0)\rangle$  njegova evolucija u vremenu je dana s :

$$|n_i(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |n_i(0)\rangle = \sum_j a_j(t) |n_j(0)\rangle \quad (4.8)$$

gdje koeficijenti  $a_j(t)$  opisuju evoluciju početnog stanja, a  $|n_j(0)\rangle$  su Fockova stanja. Očekivani broj čestica na nekom čvoru je dan sa:

$$\langle n_i(t) | \hat{n}_k | n_i(t) \rangle = \sum_j \sum_l a_j^*(t) a_l(t) \langle n_j(0) | \hat{n}_k | n_l(0) \rangle = \sum_j |a_j(t)|^2 n_k(j)$$

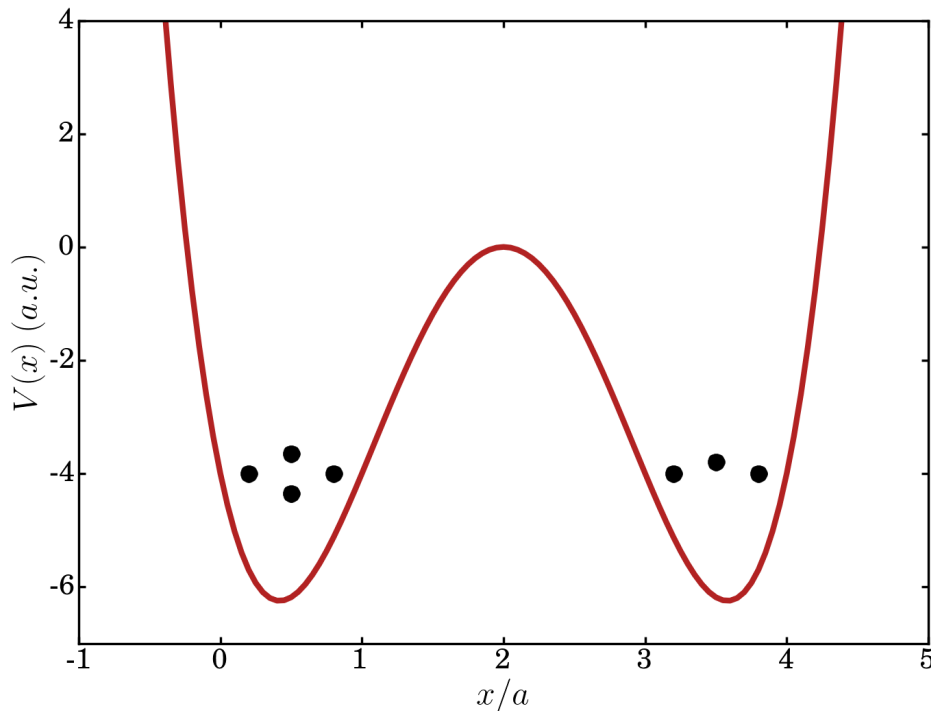
gdje je  $n_k(j)$  broj čestica na k-tom čvoru u j-tom Fockovom stanju. Jedan mogući oblik potencijala s dvostrukom jamom je (slika 4.13):

$$V(x) = A_0 (A_1 x^4 - x^2) = a_0 x^4 - a_1 x^2 \quad (4.9)$$

što u drugoj kvantizaciji daje operator potencijalne energije:

$$\hat{V} = \sum_k A_0 (A_1 x_k^4 - x_k^2) \hat{n}_k \quad (4.10)$$

Bose-Hubbardov Hamiltonijan definiran jednađbom (4.1) je translacijski invarijantan, odnosno ne mijenja se na zamjenu  $(a_i, a_i^\dagger) \rightarrow (a_{i+1}, a_{i+1}^\dagger)$  ako vrijede periodični rubni uvjeti. Nametanjem vanjskog potencijala tipa (4.10) gubi se translacijska invarijantnost jer čvorovi u sustavu više nisu ekvivalentni. Pod periodične rubne uvjete se podrazumijeva i mogućnost preskakanja čestica između prvog i M-tog čvora, no, postavite li se velike potencijalne barijere na rubove sustava čestice u sustavu se neće više ponašati kao da su postavljene u "prsten" već kao da su postavljene duž linije i neće moći preskakati između prvog i zadnjeg čvora. U Hamiltonijanu to odgovara postavljanju parametra preskakanja  $J$  između tih čvorova na nulu. Možemo promotriti



Slika 4.13: Na slici je ilustrativno prikazan vanjski potencijal dan s jednađbom (4.9) zajedno s česticama smještenim u potencijalnim jamama. Položaji čvorova su izraženi u jedinicama konstante rešetke  $a$ . Povećanjem središnje barijere znatno se smanjuje vjerojatnost nalaženja čestica na tom području te tuneliranja iz jedne jame u drugu.

vremensku evoluciju sistema za tri različita režima; mala barijera, srednja barijera i vrlo velika barijera, za nekoliko vremenskih trenutaka. Na slici 4.14 je prikazana raspodjela očekivanog broja čestica po čvorovima  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  za četiri različita vremenska trenutka za parametre potencijala  $A_0 = 0.5$  i  $A_1 = 0.2$ . Broj čvorova u sustavu je

$M = 5$ , a čestica  $N = 4$  i sustav je pripremljen tako da su u početnom trenutku sve čestice bile na prvom čvoru, odnosno sustav je bio u Fockovom stanju  $|4, 0, 0, 0, 0\rangle$ . S obzirom da je barijera u ovom slučaju niska čestice mogu lako tunelirati iz jedne jame u drugu, a postoji i velika vjerojatnost da se čestice nađu na čvoru gdje je potencijalna barijera najveća. Povećanjem barijere, odnosno udubljenjem jama tuneliranje se smanjuje i čestice imaju veću vjerojatnost zauzimanja čvorova jame iz koje su krenuli. Na slici 4.15 je prikazana raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle (t)$  za iste vremenske trenutke i početne uvjete kao i na Slici 4.14 te se vidi smanjeno tuneliranje i zauzeće čvorova druge jame nego za nisku barijeru. Parametri potencijala su  $A_0 = 4$  i  $A_1 = 0.2$  u ovom slučaju. Za jako visoke barijere ( $A_0 = 30$  i  $A_1 = 0.2$ , slika 4.16) čestice koje su u početnom trenutku bile zarobljene u nekoj potencijalnoj jami ne mogu tunelirati iz nje i raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle (t)$  oscilira između čvorova te jame. Rezultati ova tri režima su uspoređeni za jednake ostale parametre sustava ( $U$  i  $J$ ). Povećanjem parametra preskakanja  $J$  primjerice, raste i vjerojatnost tuneliranja čestica i prijelaz između jama može postati moguć i za velike potencijalne barijere.

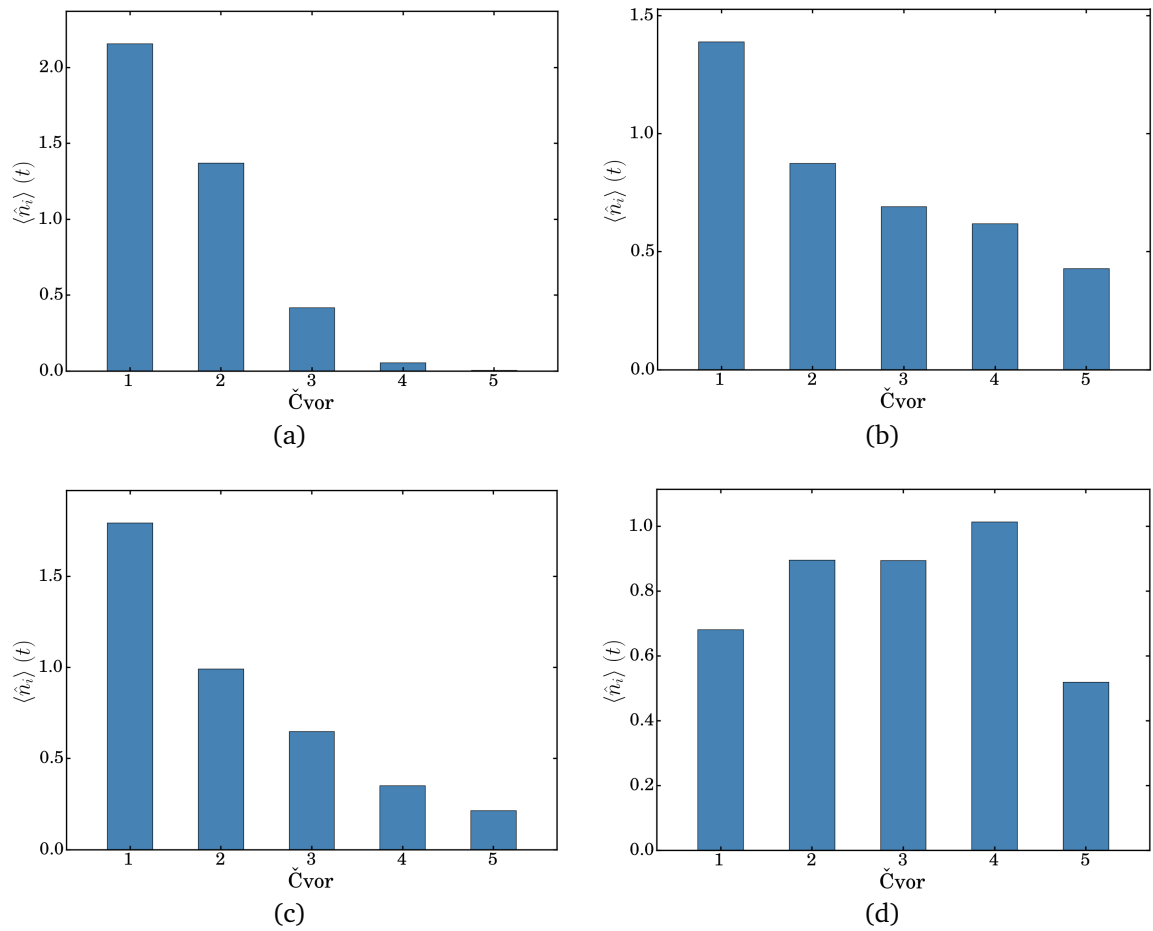
#### 4.4 Vremenski promjenjivi potencijal

U slučaju da je potencijal u kojem se nalaze čestice vremenski promjenjiv sustav nije moguće vremenski evoluirati na način dan s jednažbom (4.8). Promotrimo li Schrödingerovu jednažbu za BH model s vremenski ovisnim potencijalom:

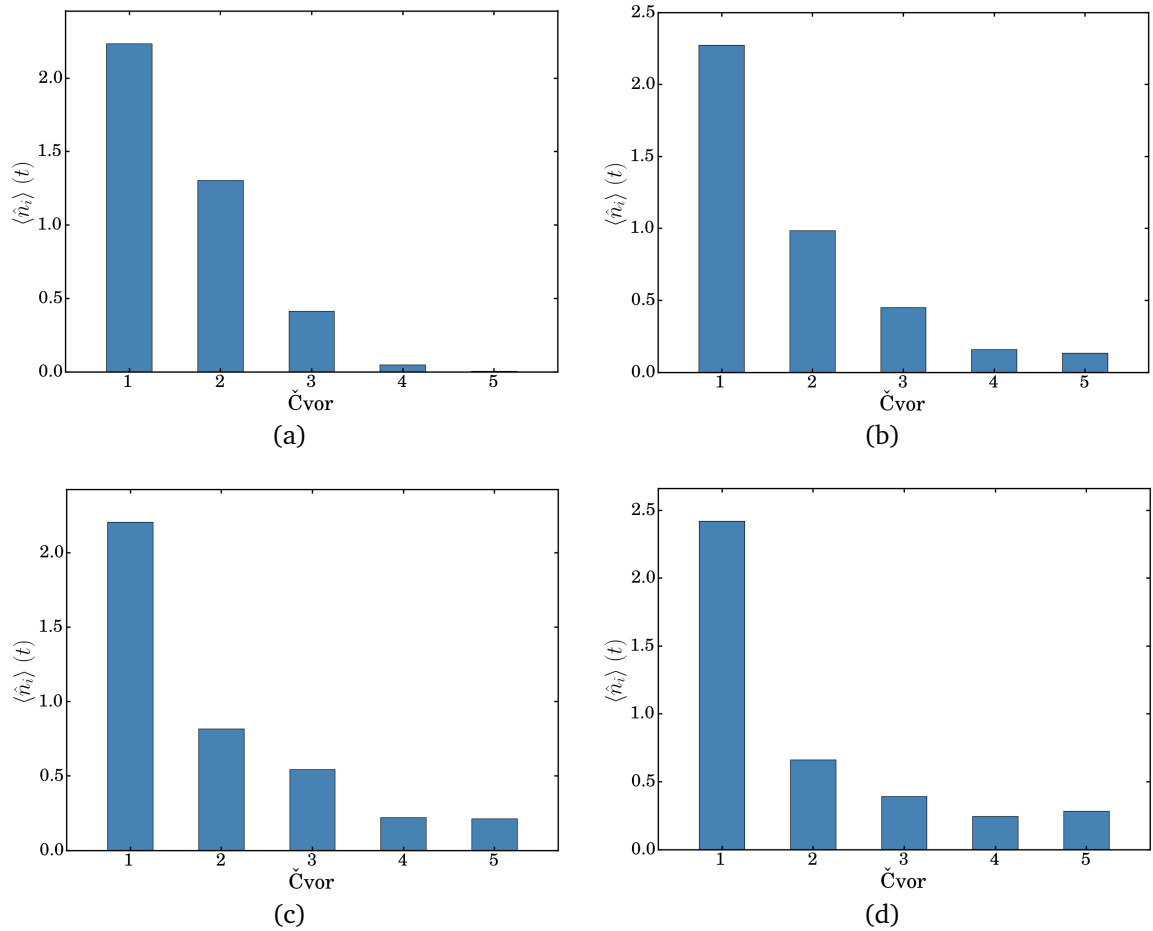
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}_{BH}(t) |\psi(t)\rangle$$

možemo napraviti podjelu vremenskog intervala na kojem želimo evoluirati valnu funkciju  $\Delta t = (t - t_0)/n$ , gdje je  $t_0$  početni, a  $t$  konačni vremenski trenutak, dok je  $n$  broj vremenskih trenutaka u intervalu. Vremenska evolucija između dva vremenska trenutka  $t_2 - t_1 = \Delta t$  za dovoljno mali  $\Delta t$  je tada dana sa [8]:

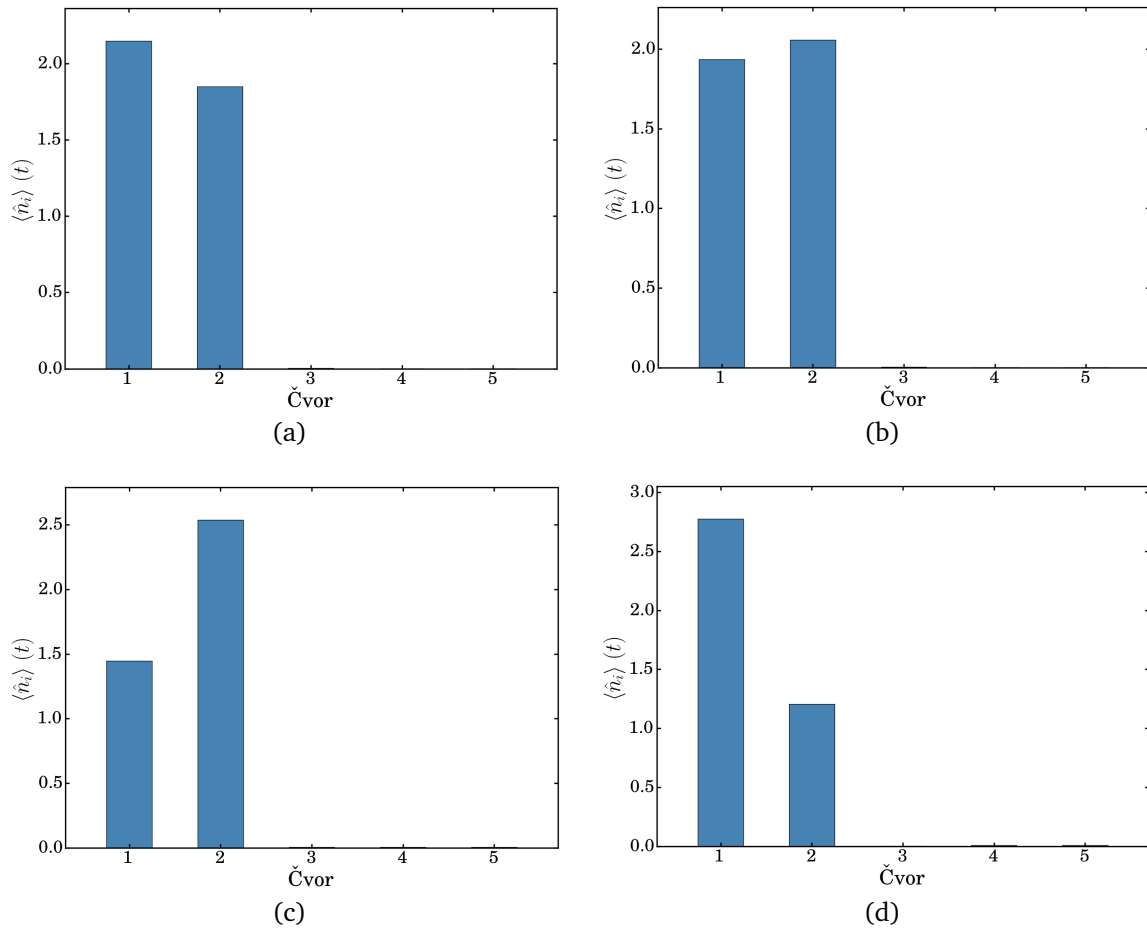
$$|\psi(t_2)\rangle = e^{-iH\Delta t} |\psi(t_1)\rangle = U(t + \Delta t, t) |\psi(t_1)\rangle \quad (4.11)$$



Slika 4.14: Raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  za sustav  $M = 5$ ,  $N = 4$  koji se početno nalazio u Fockovom stanju  $|4, 0, 0, 0, 0\rangle$ . Parametri vanjskog potencijala su  $A_0 = 0.5$  i  $A_1 = 0.2$ . Vremenski trenuci na slikama su (a)  $\tau = 1$ , (b)  $\tau = 3$ , (c)  $\tau = 5$ , (d)  $\tau = 8$ .



Slika 4.15: Raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  za sustav  $M = 5$ ,  $N = 4$  koji se početno nalazio u Fockovom stanju  $|4, 0, 0, 0, 0\rangle$ . Parametri vanjskog potencijala su  $A_0 = 4$  i  $A_1 = 0.2$ . Vremenski trenuci na slikama su (a)  $\tau = 1$ , (b)  $\tau = 3$ , (c)  $\tau = 5$ , (d)  $\tau = 8$ .



Slika 4.16: Raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  za sustav  $M = 5$ ,  $N = 4$  koji se početno nalazio u Fockovom stanju  $|4, 0, 0, 0, 0\rangle$ . Parametri vanjskog potencijala su  $A_0 = 30$  i  $A_1 = 0.2$ . Vremenski trenuci na slikama su (a)  $\tau = 1$ , (b)  $\tau = 3$ , (c)  $\tau = 5$ , (d)  $\tau = 8$ . Za jako visoke barijere tuneliranje između jama je gotovo zanemarivo



gdje je Hamiltonijan potrebno izvrijedniti u trenutku  $t + \Delta t/2$ . Operator vremenske evolucije  $U(t + \Delta t, t)$  se za dovoljno mali  $\Delta t$  može zapisati u Cayleyevoj formi:

$$U(t + \Delta t, t) = \frac{\exp\left(-iH\frac{\Delta t}{2}\right)}{\exp\left(iH\frac{\Delta t}{2}\right)} \approx \frac{1 - \frac{i\Delta t}{2}H(t + \Delta t/2)}{1 + \frac{i\Delta t}{2}H(t + \Delta t/2)}$$

gdje su zadržana prva dva člana u razvoju eksponencijalnih funkcija. Za vremensku evoluciju valne funkcije tada slijedi [8]:

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{2}H(t + \Delta t/2)\right) |\psi(t + \Delta t)\rangle = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2}H(t + \Delta t/2)\right) |\psi(t)\rangle \quad (4.12)$$

Označimo li s  $\vec{\psi}^n$  valnu funkciju u vremenskom trenutku  $t_n = t_0 + n\Delta t$ , tada je valna funkcija u trenutku  $t_{n+1}$  dana s:

$$\vec{\psi}^{n+1} = D_2^{-1}D_1\vec{\psi}^n \quad (4.13)$$

gdje su uvedene matrice:

$$D_1 = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2}H\right) = (1 - S), \quad D_2 = \left(1 + \frac{i\Delta t}{2}H\right) = (1 + S)$$

i zamjena  $S = \frac{i\Delta t}{2}H$ . Produkt matrica iz jednadžbe (4.13) se tada može zapisati na način:

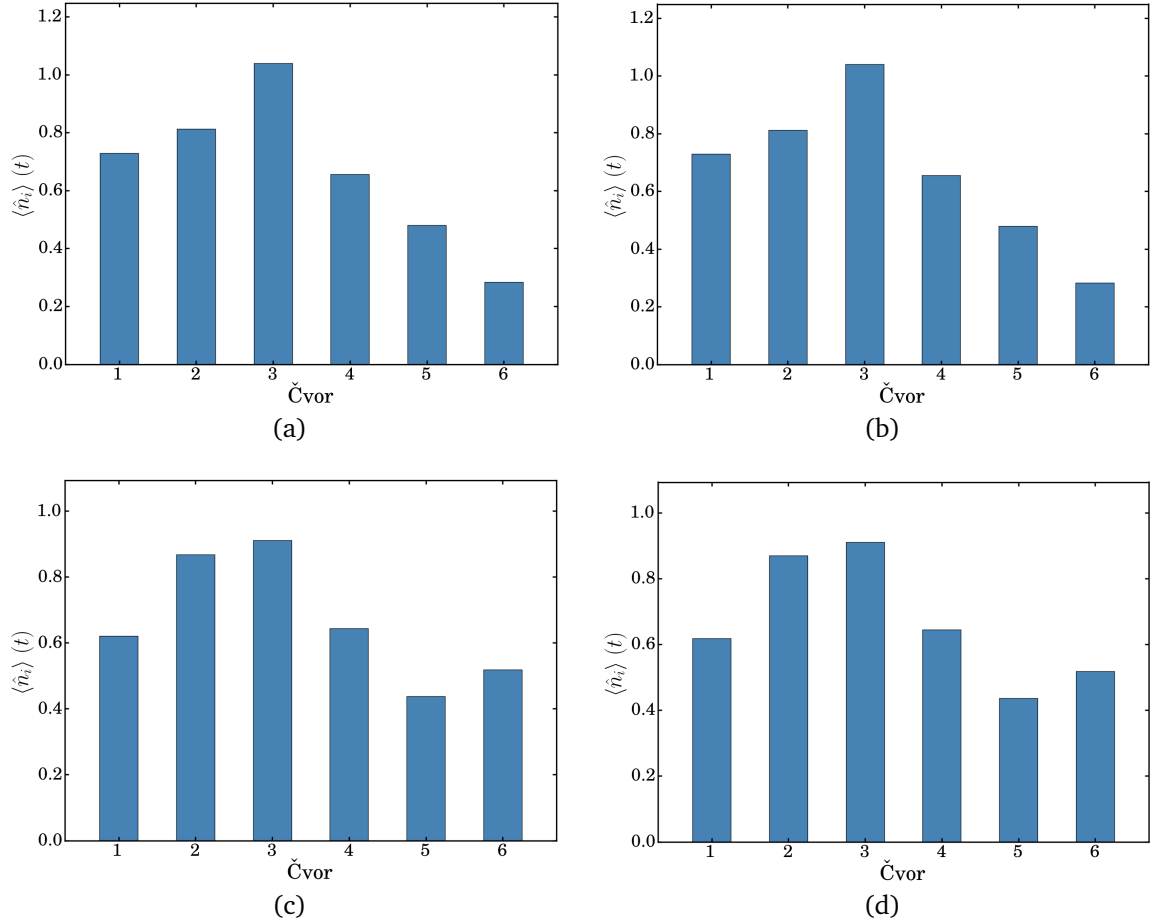
$$D_2^{-1}D_1 = (1 + S)^{-1}(1 - S) = 2D_2^{-1} - 1$$

pa je za evoluciju valne funkcije dovoljno izračunati inverz matrice  $D_2$ .

Gore diskutirani postupak se u slučaju bozona u optičkoj rešetki može primijeniti za razne vremenski ovisne potencijale. Možemo ponovno kao primjer promotriti potencijal s dvostrukom jamom i radi jednostavnosti uzeti da ima oblik pravokutne barijere čija se visina mijenja u vremenu:

$$V(x, t) = \begin{cases} A(t), & -x_m \leq x \leq x_m \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

gdje je  $A(t)$  visina barijere, a  $x_m$  označava granice intervala na kojem se nalazi barijera. Hamiltonijan se konstruira na identičan način kao ranije samo se u svakom vremenskom koraku mijenja vanjski potencijal što odgovara samo promjeni dijagonalnih

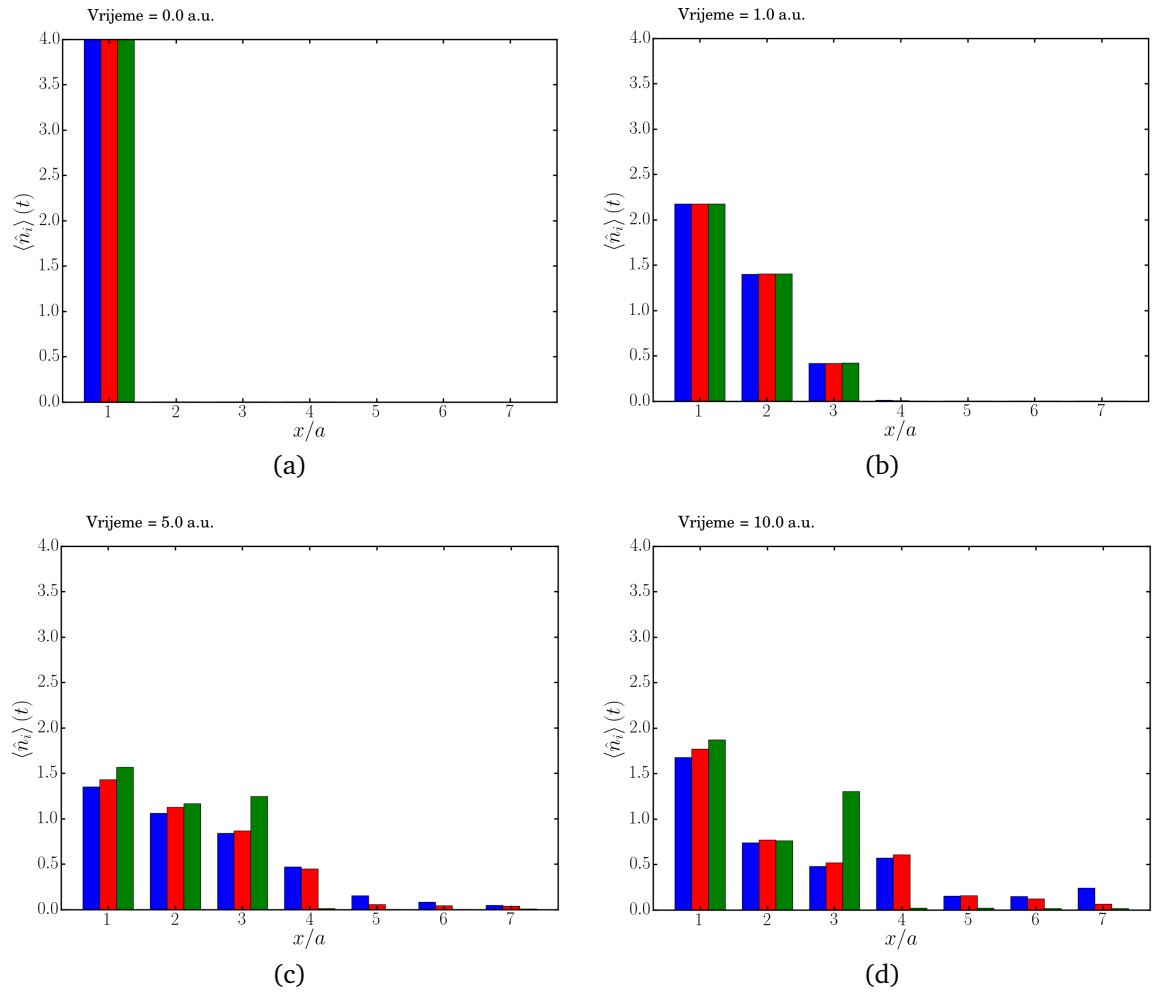


Slika 4.17: Raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  za sustav  $M = 6$ ,  $N = 4$  koji se početno nalazio u Fockovom stanju  $|4, 0, 0, 0, 0, 0\rangle$ . Sustav se nalazi u vanjskom potencijalu pravokutne barijere koja se nalazi na dva središnja čvora i ima oblik  $A(t) = 5 * \cos^2(\omega t)$ . Slike (a) i (b) prikazuju raspodjelu za trenutak  $\tau = 5$  za redom vremensku evoluciju dobivenu jednađbama (4.11) i (4.13), dok je na slikama (c) i (d)  $\tau = 10$ .

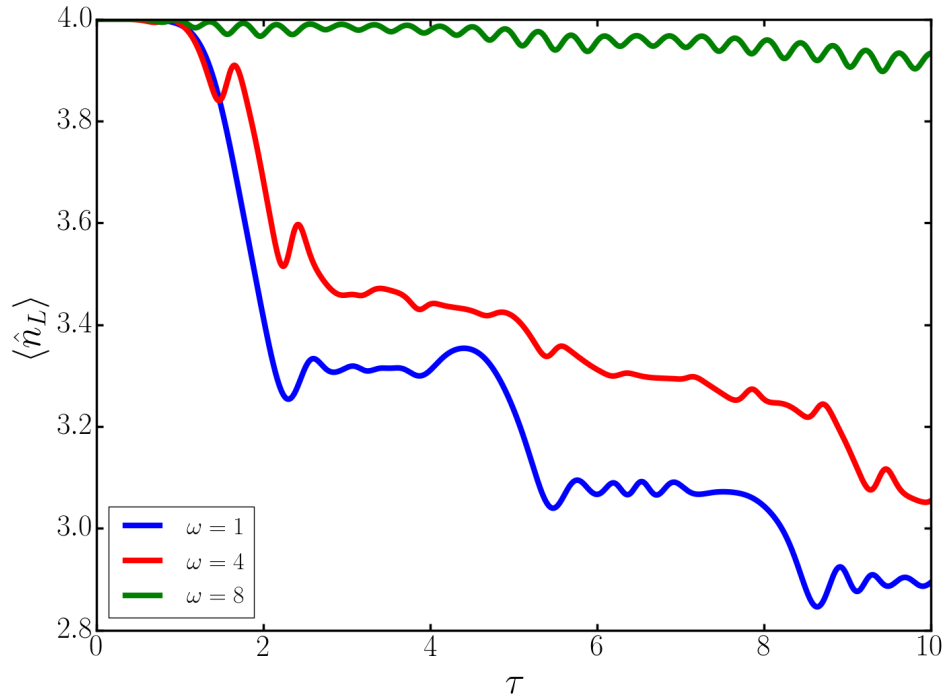
elemenata Hamiltonijana. Na slici 4.17 je prikazana raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  dobivena evoluiranjem valne funkcije preko jednađbi (4.11) i (4.13) za dva različita konačna trenutka. Mijenjanjem visine barijere u vremenu sustav prolazi kroz periode većeg i manjeg transfera čestica između jama gdje je transfer veći kada je barijera manja. Na slici 4.17 je vidljivo da su raspodjele dobivene na dva načina gotovo identične (korišteno je  $\Delta t = 0.005$ , razlika se javlja na trećoj značajnoj znamenici), što je i očekivano dok god je  $\Delta t$  dovoljno mali. Za sve dalje konačne vremenske trenutke  $t$  preciznost ove metode se smanjuje pa je potrebno koristiti manji  $\Delta t$  kako bi se dobili dobri rezultati. Vremenska ovisnost visine barijere korištena u ovom slučaju je  $A(t) = V_0 \cos^2(\omega t)$ , uz  $\omega = 1$ , a barijera se nalazi na dva središnja čvora rešetke<sup>6</sup>.

<sup>6</sup>Kao i prije vrijeme se može mjeriti u jedinicama  $\tau = t \cdot E_R / \hbar$ , dok se frekvencija mjeri u jedinicama  $\omega \rightarrow \frac{\hbar}{E_R} \omega$ .

Možemo promotriti i očekivanu raspodjelu čestica u sustavu za različite frekvencije osciliranja potencijalne barijere. Na slici 4.18 je prikazan sustav bozona sa  $M = 7$  i  $N = 4$  sa oscilirajućom barijerom na središnjem čvoru za četiri različita vremenska trenutka i tri različite frekvencije ( $\omega = 1, 4, 8$ ). Sustav je početno stavljen u Fockovo stanje  $|4, 0, 0, 0, 0, 0, 0\rangle$ . S promjenom frekvencije barijere u sustavu se može primijetiti razlika u transferu čestica kroz barijeru na drugu stranu sustava. Za najnižu frekvenciju  $\omega = 1$  čestice najlakše prolaze kroz barijeru, dok za najvišu u ovom slučaju  $\omega = 8$  prolazak je jako malen. Najviša frekvencija u ovom slučaju je odabrana kao približno granična frekvencija na kojoj transfer čestica iščezava, na sve višim frekvencijama transfera praktički nema. Ovaj princip kontroliranja transfera čestica se može koristiti kao filter čestica u nekoj praktičnoj situaciji, gdje se mijenjanjem frekvencije barijere potiče ili suzbija transfer čestica. Na slici 4.19 je prikazana vremenska ovisnost ukupnog očekivanog broja čestica na čvorovima lijevo od barijere gdje se isto tako može pratiti transfer čestica. Na slici se može ponovno uočiti povećan transfer čestica za niže frekvencije i vrlo mali transfer čestica za najvišu frekvenciju. Treba još reći da su pri ovim frekvencijama barijere u promatranom vremensko intervalu više puta prolazile kroz razdoblja svoga minimuma što je česticama dalo dovoljno mogućnosti za transfer.



Slika 4.18: Raspodjela  $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$  za sustav  $M = 7$ ,  $N = 4$  koji se početno nalazio u Fockovom stanju  $|4, 0, 0, 0, 0, 0, 0\rangle$  i za BH parametre  $U = 1$ ,  $J = 1$ . Sustav se nalazi u vanjskom potencijalu pravokutne barijere koja se nalazi na središnjem čvoru i ima oblik  $A(t) = 20 * \cos^2(\omega t)$  te su prikazane raspodjele za tri različite frekvencije  $\omega = 1, 4, 8$  redom plavom, crvenom i zelenom bojom. Vremenski trenuci su (a)  $\tau = 0.0$ , (b)  $\tau = 1.0$ , (c)  $\tau = 5.0$ , (d)  $\tau = 10.0$ .



Slika 4.19: Na slici je prikazana vremenska ovisnost očekivanog ukupnog broja čestica lijevo od barijere  $\langle \hat{n}_L \rangle$  za sustav sa slike 4.18.

## 5 Zaključak

U ovom radu razmatrana je kvantna mehanika višečestičnih sistema na primjeru Bose-Hubbardovog modela. Proučavane su metode konstruiranja baze višečestičnog sistema te računanja Hamiltonijana sustava u odgovarajućoj bazi. Provedena je dijagonalizacija Hamiltonijana te je promatran energijski spektar, vjerojatnosti zapošjednuća stanja, energijski procjepi i očekivana raspodjela čestica u sistemu u ovisnosti o parametrima Hamiltonijana u ili bez prisutnosti vanjskog potencijala. Promatrana je i dinamika sustava u prisustvu vanjskih potencijala koji su predstavljali barijere u određenom dijelu sustava za stalne i vremenski promjenjive barijere. U tekstu je dan i osnovni opis optičkih rešetki te fizike čestica zarobljenih u optičke rešetke. Isto tako, napravljen je i pregled formalizma druge kvantizacije koji predstavlja efektan opis višečestičnih sistema te je izveden Bose-Hubbardov model u tom formalizmu. Za parametre BH modela se zadržalo na pretpostavci kratkodosežnih interakcija što je uzelo u obzir samo interakcije između čestica na istom čvoru te na pretpostavci da je tuneliranje čestica moguće samo između čvorova koji su prvi susjedi. Razmatrana je i granica beskonačno jakih odbojnih interakcija između bozona kada se na jednom čvoru rešetke može nalaziti najviše jedna čestica. Takav sustav pokazuje mnoge sličnosti sa sustavom neinteragirajućih fermiona te je prove-

den postupak mapiranja jednog sustava na drugi. Promatrana je dinamika sustava za nekoliko različitih načina njegove pripreme te su diskutirane veličine od interesa kao što su raspodjela čestica, raspodjela količine gibanja i prirodne orbitale te je napravljena usporedba između bozonskog i fermionskog slučaja. Zaključno, dinamika kvantnih višečestičnih sistema za sustave manje dimenzije prostora stanja se pokazuje dostupnom za računanje i na računalima manje snage te je zbog toga moguće steći uvid u ponašanje kvantnih sistema bez upotrebe jakih računala.

# Dodaci

## Dodatak A Očuvanje kvazi količine gibanja u Bose-Hubbardovom modelu

U kvantnoj mehanici operatori očuvanih veličina komutiraju s Hamiltonijanom  $\hat{H}$  pa je u slučaju kvazi količine gibanja potrebno pokazati:

$$[\hat{H}, \hat{K}] = 0$$

Kvazi količina gibanja je dana izrazom:

$$\hat{K} = \sum_{q=0}^{M-1} \left( \frac{2\pi q}{M} \right) b_q^\dagger b_q$$

Hamiltonijan se također promatra u reprezentaciji kvazi količine gibanja:

$$\hat{H} = -2J \sum_{q=0}^{M-1} \cos \left( \frac{2\pi q}{M} \right) b_q^\dagger b_q + \frac{U}{2M} \sum_{q_1, q_2=0}^{M-1} \sum_{q_3, q_4=0}^{M-1} b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} \delta_{q_1+q_2, q_3+q_4}$$

Nazovimo prvi član Hamiltonijana  $\hat{H}_1$ , a drugi član  $\hat{H}_2$ . Za  $\hat{H}_1$  vrijedi:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_1, \hat{K}] &= -2J \sum_{q_1=0}^{M-1} \cos \left( \frac{2\pi q_1}{M} \right) b_{q_1}^\dagger b_{q_1} \sum_{q_2=0}^{M-1} \left( \frac{2\pi q_2}{M} \right) b_{q_2}^\dagger b_{q_2} \\ &\quad + 2J \sum_{q_2=0}^{M-1} \left( \frac{2\pi q_2}{M} \right) b_{q_2}^\dagger b_{q_2} \sum_{q_1=0}^{M-1} \cos \left( \frac{2\pi q_1}{M} \right) b_{q_1}^\dagger b_{q_1} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Gornji izraz iščezava zbog komutacijskih relacija  $[b_{q_1}, b_{q_2}^\dagger] = \delta_{q_1 q_2}$ ,  $[b_{q_1}, b_{q_2}] = [b_{q_1}^\dagger, b_{q_2}^\dagger] = 0$ . Za drugi član Hamiltonijana slijedi:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_2, \hat{K}] &= \frac{U}{2M} \sum_{q_1, q_2=0}^{M-1} \sum_{q_3, q_4=0}^{M-1} b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} \delta_{q_1+q_2, q_3+q_4} \sum_{q=0}^{M-1} \left( \frac{2\pi q}{M} \right) b_q^\dagger b_q \\ &\quad - \frac{U}{2M} \sum_{q=0}^{M-1} \left( \frac{2\pi q}{M} \right) b_q^\dagger b_q \frac{U}{2M} \sum_{q_1, q_2=0}^{M-1} \sum_{q_3, q_4=0}^{M-1} b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} \delta_{q_1+q_2, q_3+q_4} \end{aligned} \tag{A.1}$$

S obzirom na  $\delta_{q_1+q_2, q_3+q_4}$  funkciju koja se pojavljuje u sumi postoje tri mogućnosti; indeksi  $\{q_1, q_2, q_3, q_4\}$  su svi jednaki, dva indeksa su jednaka, a dva različita i svi indeksi su različiti. Kada su svi indeksi  $\{q_1, q_2, q_3, q_4\}$  jednaki u prvoj sumi se javlja operator  $b_q^\dagger b_q^\dagger b_q b_q b_q^\dagger b_q^\dagger$ . Za  $q \neq q'$  operatori komutiraju pa se za iste kombinacije  $q$  i  $q'$  članovi iz prve i druge sume krata. Za  $q = q'$  se dobiva:

$$\begin{aligned} b_q^\dagger b_q^\dagger b_q b_q b_q^\dagger b_q^\dagger &= b_q^\dagger n_q b_q n_q = (n_q b_q^\dagger - b_q^\dagger) b_q n_q = n_q b_q^\dagger (n_q b_q + b_q) - b_q^\dagger b_q n_q = \\ &= n_q b_q^\dagger n_q b_q + n_q n_q - n_q n_q = n_q b_q^\dagger n_q b_q \end{aligned}$$

I u ovom slučaju se članovi iz prve i druge sume krata. Kada su svi indeksi  $\{q_1, q_2, q_3, q_4\}$  različiti u prvoj sumi ukupni operator je oblika  $b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger$ . Za  $\{q_1, q_2, q_3, q_4 \neq q\}$  operatori komutiraju pa se članovi iz prve i druge sume krata. Kada je jedan indeks jednak, npr.  $q_4 = q$  dobiva se:

$$b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_q n_q = n_q b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_q + b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_q \quad (\text{A.2})$$

Prvi član u jednadžbi (A.2) se krati s odgovarajućim članom iz druge sume u jednadžbi (A.1). Za drugi član iz (A.2) potrebno je pogledati situaciju:

$$b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} n_q = n_q b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} - b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q_3} b_{q_4} \quad (\text{A.3})$$

Prvi član iz (A.3) se krati s odgovarajućim članom iz druge sume u (A.1), dok se drugi član krati s drugim članom u (A.2) za odgovarajuću kombinaciju indeksa. Zadnja mogućnost je da su dva indeksa iz  $\{q_1, q_2, q_3, q_4\}$  jednaka, na primjer:

$$b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_q n_q = 2b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_q + n_q b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_q \quad (\text{A.4})$$

Za drugi član se odmah vidi da će se pokratiti. Za prvi član je potrebno promotriti:

$$\begin{aligned} b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q'} b_{q'} n_q &= n_q b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q'} b_{q'} - b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_{q'} b_{q'} \\ b_{q_1}^\dagger b_q^\dagger b_{q'} b_{q'} n_q &= n_q b_{q_1}^\dagger b_q^\dagger b_{q'} b_{q'} - b_{q_1}^\dagger b_q^\dagger b_{q'} b_{q'} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Dva druga člana iz (A.5) će pokratiti prvi član iz (A.4), dok će prvi članovi odmah biti pokraćeni s odgovarajućim članovima iz druge sume u (A.1). Analogno bi se napravilo i za kombinaciju indeksa  $b_q^\dagger b_q^\dagger b_{q_3} b_{q_4} n_q$ . Može se još promotriti operator oblika



$b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_{q_4} n_q$ . Analogno bi bilo da su jednaki indeksi na primjerice drugom i četvrtom mjestu pa ne treba posebno razmatrati tu kombinaciju. Vrijedi:

$$\begin{aligned} b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_{q_4} n_q &= b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger (b_q + n_q b_q) b_{q_4} = b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_{q_4} + (n_q b_q^\dagger - b_q^\dagger) b_{q_2}^\dagger b_q b_{q_4} \\ &= n_q b_q^\dagger b_{q_2}^\dagger b_q b_{q_4} \end{aligned}$$

Dobiveni član u gornjoj jednadžbi se sigurno krati čime su sve kombinacije indeksa potrošene te je pokazano da vrijedi  $[\hat{H}, \hat{K}] = 0$ , odnosno kvazi količina gibanja je očuvana veličina.

## Dodatak B Schrödingerova jednadžba s vremenski ovisnim potencijalom

Ovdje je prezentirana metoda rješavanja vremenski ovisne Schrödingerove jednadžbe prema [8], slično kao u potpoglavlju 4.4, ali za slučaj čestice ili valnog paketa u 1D. Promotrimo li Schrödingerovu jednadžbu s vremenski ovisnim potencijalom:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(x, t) \psi(x, t), \quad H(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

možemo napraviti podjelu vremenskog intervala na kojem želimo evoluirati valnu funkciju  $\Delta t = (t - t_0)/n$ , gdje je  $t_0$  početni, a  $t$  konačni vremenski trenutak, dok je  $n$  broj vremenskih trenutaka u intervalu. Vremenska evolucija između dva vremenska trenutka  $t_2 - t_1 = \Delta t$  za dovoljno mali  $\Delta t$  je tada dana sa [8]:

$$\psi(x, t_2) = e^{-iH\Delta t} \psi(x, t_1) = U(t + \Delta t, t) \psi(x, t_1) \quad (\text{B.1})$$

gdje je Hamiltonijan potrebno izvrijedniti u trenutku  $t + \Delta t/2$ . Operator vremenske evolucije  $U(t + \Delta t, t)$  se za dovoljno mali  $\Delta t$  može zapisati u Cayleyevoj formi:

$$U(t + \Delta t, t) = \frac{\exp\left(-iH\frac{\Delta t}{2}\right)}{\exp\left(iH\frac{\Delta t}{2}\right)} \approx \frac{1 - \frac{i\Delta t}{2}H(x, t + \Delta t/2)}{1 + \frac{i\Delta t}{2}H(x, t + \Delta t/2)}$$

gdje su zadržana prva dva člana u razvoju eksponencijalnih funkcija. Za vremensku evoluciju valne funkcije tada slijedi [8]:

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{2}H(x, t + \Delta t/2)\right) \psi(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2}H(x, t + \Delta t/2)\right) \psi(x, t) \quad (\text{B.2})$$

Prostorni interval na kojem se nalazi valna funkcija se isto tako podijeli na  $N$  diskretnih točaka s razmacima  $\Delta x = (x_{max} - x_{min})/N$ , gdje su  $x_{max}$  i  $x_{min}$  granice intervala, pa se valna funkcija može zapisati kao:

$$\psi(x, t_n) = \sum_{j=1}^N \psi_j^n \chi_j$$

gdje je  $\psi_j^n = \psi(x_j, t_n)$  vrijednost valne funkcije na poziciji  $x_j$  u trenutku  $t_n = t_0 + n\Delta t$ , a  $\chi_j$  je baza na rešetci i vrijedi:

$$\chi_j = \begin{cases} 1, & x_j - \frac{1}{2}\Delta x \leq x \leq x_j + \frac{1}{2}\Delta x \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

Valna funkcija se za male razmake na rešetci  $\Delta x$  može razviti u red [16]:

$$\begin{aligned} \psi(x + \Delta x) &= \psi(x) + \frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + \dots \\ \psi(x - \Delta x) &= \psi(x) - \frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Oduzimanjem dviju jednakosti iz izraza (B.3) dobiva se:

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} = \frac{\psi(x + \Delta x) - \psi(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$

dok se zbrajanjem dobiva;

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = \frac{\psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) - 2\psi(x)}{(\Delta x)^2}$$

Za djelovanje operatora iz jednadžbe (B.2) stoga slijedi:

$$\left(1 \pm \frac{i\Delta t}{2}H(x, t + \Delta t/2)\right) \psi(x_j, t_n) \simeq \psi_j^n \pm \frac{i\hbar^2\Delta t}{2m} \left(-\frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{2(\Delta x)^2} + V_j^n \psi_j^n\right)$$



## Bibliography

- [1] Milton Abramowitz i Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs and Mathematical Tables*. National Bureau of Standards, 1972 (cit. na str. 37).
- [2] G. Auletta, M. Fortunato i G. Parisi. *Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2009 (cit. na str. 32, 36, 63).
- [3] Ivo Batistić. *Predavanja iz Fizike cvrstog stanja*. URL: [http://grdelin.phy.hr/~ivo/Nastava/Fizika\\_Cvrstog\\_Stanja/index.php](http://grdelin.phy.hr/~ivo/Nastava/Fizika_Cvrstog_Stanja/index.php) (cit. na str. 10, 11).
- [4] I. Bloch, J. Dalibard i W. Zwerger. „Many-Body Physics with Ultracold Gases”. *Reviews of Modern Physics* (2008). DOI: 10.1103/RevModPhys.80.885. URL: <https://arxiv.org/abs/0704.3011> (cit. na str. 10, 35, 39).
- [5] Immanuel Bloch. „Ultracold quantum gases in optical lattices”. *Nature Physics* (2005). DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys138>. URL: <https://www.nature.com/articles/nphys138> (cit. na str. 1–9, 44).
- [6] Kedar Damle. *Ideas and methods in condensed matter theory*. 2013. URL: <http://nptel.ac.in/courses/115101009/> (cit. na str. 15).
- [7] Eugene Demler. *Lecture notes for Strongly correlated systems in atomic and condensed matter physics*. 2010. URL: <http://cmt.harvard.edu/demler/TEACHING/Physics284/physics284.html> (cit. na str. 3, 5, 28–30, 33, 35, 39, 41, 43, 44, 54).
- [8] F.L. Dubeibe. „Solving the Time-Dependent Schrodinger equation with Absorbing Boundary Conditions and Source Terms in Mathematica 6.0”. *International Journal of Modern Physics C* (2010). DOI: 10.1142/S0129183110015919. URL: <https://arxiv.org/abs/1005.0044v3> (cit. na str. 69, 73, 81–83).
- [9] Alexander L. Fetter i John Dirk Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill Book Company, 1971 (cit. na str. 1, 3, 15, 39, 41–43).
- [10] D. Jaksch i P. Zoller. *The Cold Atom Hubbard Toolbox*. 2004. URL: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0410614> (cit. na str. 2).
- [11] Robert Johansson. *Numerical Python: A Practical Techniques Approach for Industry*. Apress, 2015 (cit. na str. 31).

- [12] M.S. Kai He. „Exact Studies of Equilibrium and Nonequilibrium Properties of Correlated Bosons in One-Dimensional Lattices”. Disertacija. Georgetown University, 2013. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.843.568&rep=rep1&type=pdf> (cit. na str. 2, 8, 44–47).
- [13] Colin Kennedy. *Critical Phenomena of the Bose-Hubbard Model in Ultracold Atoms*. MIT. 2012. URL: <http://web.mit.edu/8.334/www/grades/projects/projects12/ColinKennedy.pdf> (cit. na str. 2, 25–29, 31).
- [14] Malcolm P. Kennett. „Out-of-Equilibrium Dynamics of the Bose-Hubbard Model”. *ISRN Condensed Matter Physics* (2013). URL: <https://www.hindawi.com/journals/isrn/2013/393616/> (cit. na str. 2, 7–10, 29–33, 35, 37, 41, 46).
- [15] N. Marzari i dr. *Maximally Localized Wannier Functions: Theory and Applications*. 2012. URL: <https://arxiv.org/pdf/1112.5411.pdf> (cit. na str. 13).
- [16] Tamara Nikšić. *Seminar iz kvantne fizike, Zimski semestar*. 2015 (cit. na str. 10, 36, 82).
- [17] B. Paredes i dr. „Tonks-Girardeau Gas of Ultracold Atoms in an Optical Lattice”. *Nature* (2004). DOI: 10.1038/nature02530. URL: [https://people.smp.uq.edu.au/MatthewDavis/download/nature429\\_227\\_2004.pdf](https://people.smp.uq.edu.au/MatthewDavis/download/nature429_227_2004.pdf) (cit. na str. 8).
- [18] Marcos Rigol i Alejandro Muramatsu. „Free Expansion of Impenetrable Bosons on One-Dimensional Optical Lattices”. *Modern Physics Letters B* (2005). DOI: 10.1142/S0217984905008876. URL: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0507351> (cit. na str. 3, 8, 10, 44–48, 51).
- [19] Marcos Rigol i Alejandro Muramatsu. *Ground-State Properties of Hard-Core Bosons Confined on One-Dimensional Optical Lattices*. 2005. URL: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0409132> (cit. na str. 8, 44, 46).
- [20] Andreas Wagner. „Spinor condensates in optical superlattices”. Disertacija. 2012. DOI: 10.5451/unibas-006055926. URL: <https://edoc.unibas.ch/23871/> (cit. na str. 7, 10, 11, 27–32, 43).
- [21] R. Walters i dr. *Wannier states for optical lattices v1.01: Basic user documentation*. 2014 (cit. na str. 13).

- [22] Richard Walters. „Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Spin Systems”. Disertacija. Keble College, Oxford, 2012 (cit. na str. 2, 6, 26, 31, 32, 43).
- [23] J M Zhang i R X Dong. „Exact diagonalization: the Bose-Hubbard model as an example”. *European Journal of Physics* 31.3 (2010), str. 591. DOI: 10.1088/0143-0807/31/3/016. URL: <http://stacks.iop.org/0143-0807/31/i=3/a=016> (cit. na str. 1, 7, 53, 54, 56–58).