



Um algoritmo de Monte Carlo Quântico no modelo de Bose-Hubbard

Karine Piacentini Coelho da Costa

Curso de Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada

Universidade de São Paulo - USP

Junho - 2013



Objetivos

- ▶ Apresentar o modelo de Bose-Hubbard
- ▶ Apresentar um algoritmo de Monte Carlo Quântico: Worm.



Objetivos

Modelo de Bose-Hubbard

- Considerações gerais

- A hamiltoniana de Bose-Hubbard

A transição de Mott

- A fase superfluida e a isolante de Mott

Monte Carlo Quântico

- Aplicação ao modelo de Bose-Hubbard

- O algoritmo Worm

- Mecanismos de atualização

Diagrama de fases - Worm

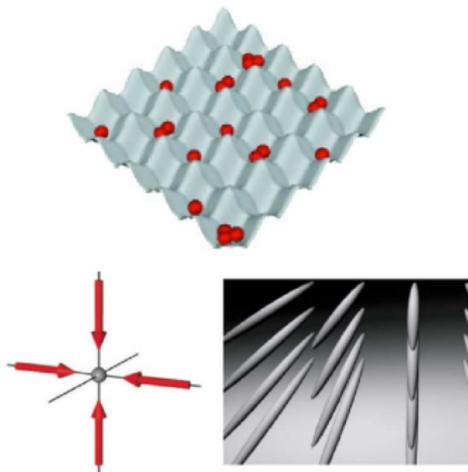


Considerações gerais

Gás de N bósons ultrafrio confinados em uma rede ótica 2D

$$T \sim 10^{-7} - 10^{-5} K$$

$$\sim 10^{15} \text{ átomos}/\text{cm}^{-3}$$



- ▶ Tunelamento entre sítios
- ▶ Interação:

$$V_{int}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta^3(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$
- ▶ A profundidade do poço depende da intensidade do laser



Modelo de Bose-Hubbard

- ▶ Aproximação de *tight-binding*
- ▶ Aproximação de 1ª banda
- ▶ Hamiltoniana de Bose-Hubbard:

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

sendo, \hat{n}_i o op. número, μ o potencial químico e $\langle i,j \rangle$ indica primeiros vizinhos

$$J = - \int d^3 r w^*(\mathbf{r} - \mathbf{d}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] w(\mathbf{r} - \mathbf{d}_j)$$

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \int d^3 r w^*(\mathbf{r} - \mathbf{d}_i) w^*(\mathbf{r} - \mathbf{d}_i) w(\mathbf{r} - \mathbf{d}_i) w(\mathbf{r} - \mathbf{d}_i)$$



A fase superfluida e a isolante de Mott

1. Fase isolante de Mott ($J=0$)

- Regime localizado
- *Gap* de energia
- Incompressível: $\partial n_i / \partial \mu = 0$
- ρ inteiro

$$|\Psi_{MI}\rangle^{J=0} \propto \prod_{i=1}^N (b_i^\dagger)^n |0\rangle$$

2. Fase superfluida ($U=0$)

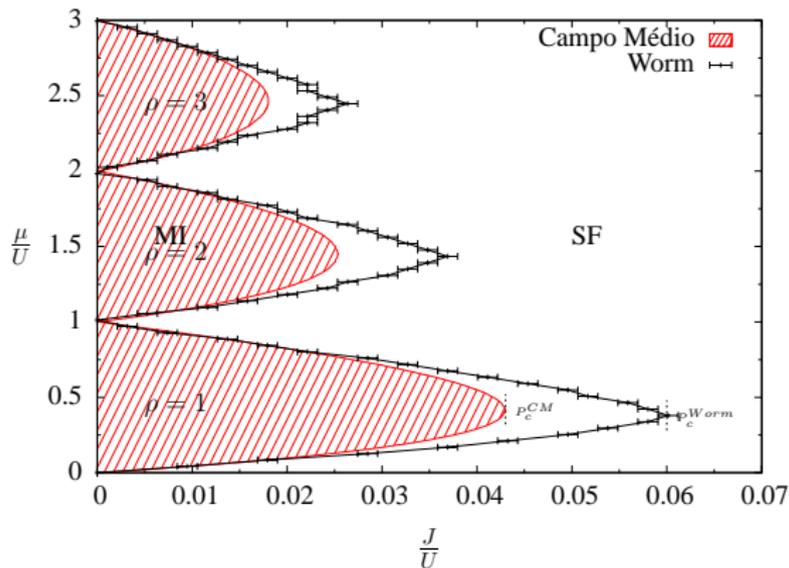
- Regime deslocalizado
- Não apresenta *gap* de energia
- Compressível
- ρ não-inteiro

$$|\Psi_{SF}\rangle^{U=0} \propto \left(\sum_{i=1}^N b_i^\dagger \right)^M |0\rangle$$



A fase superfluida e a isolante de Mott

Diagrama de fases 2D



$$P_c^{CM} = (0.0430, 0.4135) \quad (T = 0)$$

$$P_c^{Worm} = (0.06098, 0.37) \quad (T \neq 0)$$



Monte Carlo Quântico

- ▶ **MC clássico:** utiliza métodos estocásticos para resolver sistemas

- ▶ **MC de integral de caminho:** mapeia um sistema quântico d -dimensional em um sistema clássico $(d+1)$ -dimensional



Monte Carlo de Integral de Caminho

Formalismo de tempo imaginário: $t = -i\tau$

Descrição da interação: $H = H_0 + H_1$

$$H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$$

(diagonal)

$$H_1|\alpha\rangle = \sum_\gamma H_1^{\gamma\alpha}|\gamma\rangle$$

(não-diagonal)

$$H_1^{\gamma\alpha} \equiv \langle\gamma|H_1|\alpha\rangle \quad H_1^{\alpha\alpha} = 0$$

Podemos escrever o operador de densidade $\hat{\rho} = e^{-\beta H}/Z$ no formalismo do tempo imaginário naturalmente como um operador de evolução temporal

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau' H_1(\tau')}$$

sendo, $H_1(\tau) = e^{\tau H_0} H_1 e^{-\tau H_0}$



Portanto, neste formalismo podemos escrevermos a função de partição como:

$$\begin{aligned}
 Z &= \text{Tr} e^{-\beta(H_0+H_1)} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_{\tau} e^{-\int_0^{\beta} d\tau H_1(\tau)} | \alpha \rangle \\
 &= \sum_{\alpha} \left\langle \alpha \left| \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} \int_0^{\tau_n} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 d\tau_2 \dots d\tau_n \times \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \times e^{-\beta H_0} H_1(\tau_n) \dots H_1(\tau_2) H_1(\tau_1) \right| \alpha \right\rangle
 \end{aligned}$$

$|\alpha\rangle = |\{n_i\}\rangle \equiv |\{n_1, n_2, \dots\}\rangle$ são as possíveis configurações do sistema



$$Z_{BH} = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\beta} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \dots d\tau_n \sum_{\alpha_0 \alpha_1 \dots \alpha_{n-1}} (-1)^n H_1^{\alpha_n \alpha_{n-1}} \dots H_1^{\alpha_1 \alpha_0} \times$$

$$\times \exp \left\{ -\beta E_{\alpha_0} - \sum_{m=0}^{n-1} E_{\alpha_m} (\tau_{m+1} - \tau_m) \right\}.$$

com os elementos de matriz sendo

$$H_1^{\alpha' \alpha}(\tau) = e^{\tau E_{\alpha'}} H_1^{\alpha' \alpha} e^{-\tau E_{\alpha}} = \langle \alpha' | H_1 | \alpha \rangle e^{-\tau(E_{\alpha} - E_{\alpha'})}.$$

A partir daqui podemos implementar técnicas de MC usuais.



Lembrando que:

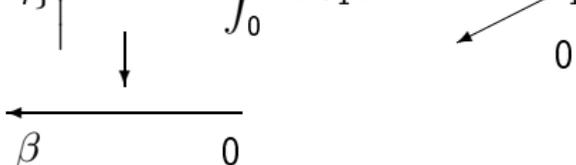
$$H_1(\tau) = e^{\tau H_0} H_1 e^{-\tau H_0}$$

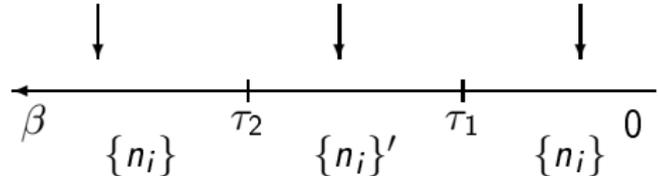
Escrevemos:

$$Z = \sum_{\{n_i\}} \left\langle \{n_i\} \left| e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\tau_1 e^{-(\beta-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \right. \right. \\ \left. \left. + \int_0^\beta \int_0^{\tau_2} d\tau_1 d\tau_2 e^{-(\beta-\tau_2)H_0} H_1 e^{-(\tau_2-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \dots \right| \{n_i\} \right\rangle$$

$Z =$ soma de todas as trajetórias CF possíveis!



$$Z = \sum_{\{n_i\}} \left\langle \{n_i\} \left| e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\tau_1 e^{-(\beta-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \right. \right.$$


$$+ \int_0^\beta \int_0^{\tau_2} d\tau_1 d\tau_2 e^{-(\beta-\tau_2)H_0} H_1 e^{-(\tau_2-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \dots \left| \{n_i\} \right\rangle$$


A partir daí é só utilizar mecanismos de MC usuais e estimar observáveis usando Z



Aplicação: Integral de caminho no modelo de Bose-Hubbard

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

O que nos leva a identificar:

$$H_0 = \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i$$

$$H_1 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j$$



Observável

$$Z_{BH} = \sum_{\nu} W_{\nu}$$

Em que W_{ν} é o peso estatístico de cada configuração ν

O valor médio de partículas no sistema é:

$$\langle N \rangle = T \frac{d \ln Z_{BH}}{d\mu}$$



Espaço de configurações ampliado: $Z + G$

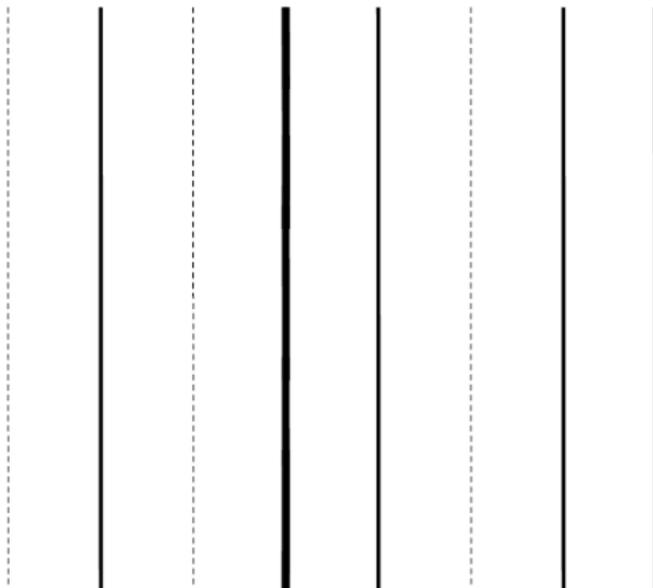
Função de Green

$$G(j, \tau) = \left\langle \mathcal{I}_\tau b_{i+j}(\tau_0 + \tau) b_i^\dagger(\tau_0) \right\rangle$$

- ▶ fração de superfluido
- ▶ gap da fase Mott



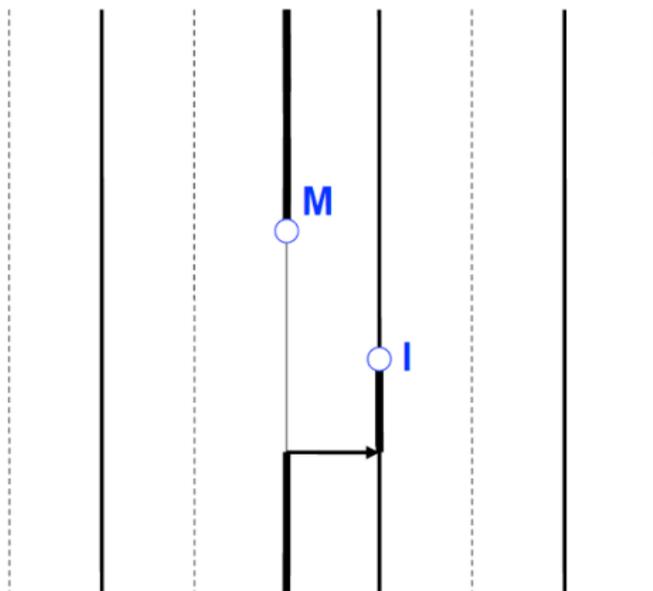
Movimento do Worm



Notas de aula de N. Prokof'ev (idem)



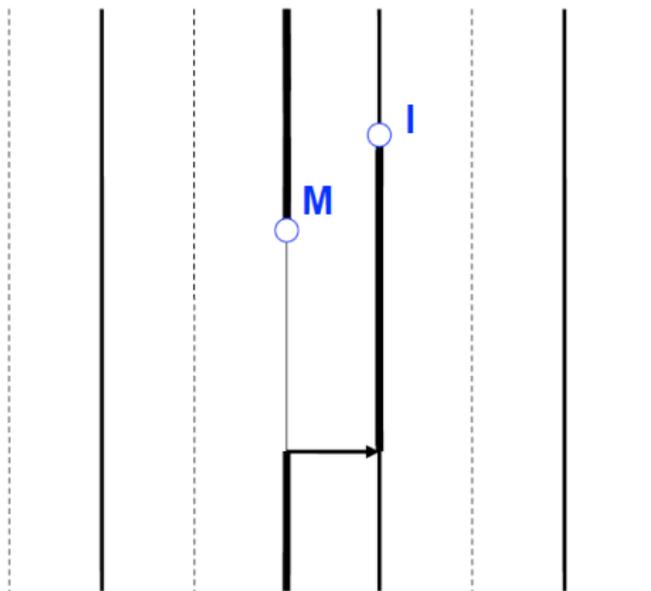
Movimento do Worm



Notas de aula de N. Prokof'ev (idem)

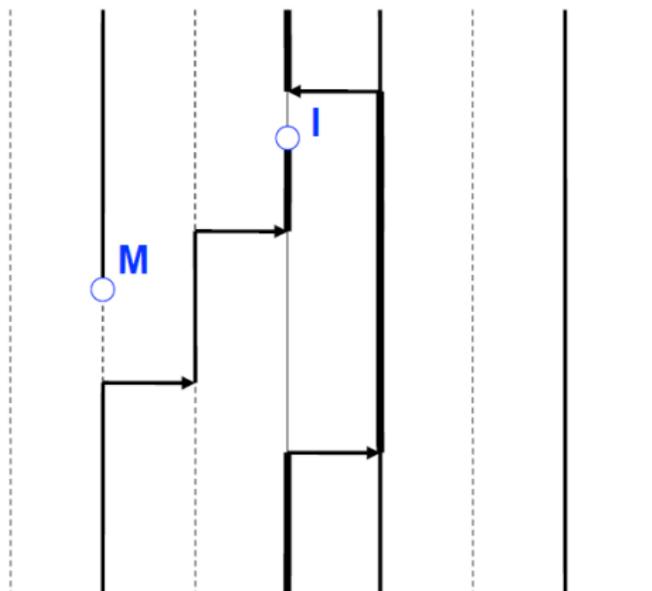


Movimento do Worm



Notas de aula de N. Prokof'ev (idem)

Movimento do Worm



Notas de aula de N. Prokof'ev (idem)



Vantagens e desvantagens do Worm

- ▶ Trabalha no *ensemble* grande canônico
- ▶ Atualizações locais (mas não sofre de *critical slowing down*)
- ▶ Acumula facilmente estatísticas para a função de Green
- ▶ Eficiente em criar configurações topologicamente diferentes
- ▶ Não simula a evolução temporal do sistema



Conclusões e Perspectivas

- ▶ Apresentamos o modelo de BH e caracterizamos a transição de SF-MI;
- ▶ Apresentamos um algoritmo de PIMC, o algoritmo Worm;
- ▶ Comparamos o diagrama de fases da transição com um campo médio;



Referências

- ▶ Bloch, “Quantum gases in optical lattices”, *Physics World* **17**, 25 (2004)
- ▶ Jaksch et al., “Cold bosonic atoms in optical lattices”, *PRL* **81**, 3108 (1998).
- ▶ Notas de aula de N. Prokof’ev, “Simulations of quantum many body systems”(2010):
https://wiki.phys.ethz.ch/quantumsimulations/_media/lecture_101021.pdf
- ▶ Prokof’ev et al., “Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the Statistics of discrete quantum systems”, *JETP* **87**, 310 (1998).
- ▶ Greiner et al., “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature* **415**, 39 (2002)
- ▶ Freericks et al., “Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model”, *PRB* **53**, 2691 (1996)