

Investigation of the Bose-Hubbard model using dynamical mean-field theory

Jaromir Panas

Abstract

Understanding the effects of strong-correlations in many-body systems is one of the major goals of the modern condensed matter physics. To achieve this goal physicists develop simplified models that capture the essence of strong-correlations. An example is the Bose-Hubbard model. While it does capture strong-interaction effects and has a simple form, it is still difficult to solve. This model also describes the experiments with cold atoms in optical lattices. Parallely more accurate approximation schemes are searched for. A very successful one is the dynamical mean-field theory (DMFT) and its bosonic counterpart, the bosonic dynamical mean-field theory (B-DMFT). Owing to its unusual expansion scheme in renormalized perturbation theory it provides better and more accurate results, in particular, where other methods are no longer reliable.

In this Thesis we present our investigation of the Bose-Hubbard model within the B-DMFT. Firstly we focus on both the derivation of the model and the method to solve it. We provide the basic theories standing behind each. We also present technical details of the continuous-time quantum Monte Carlo algorithm - a very successful method for solving the impurity problem associated with the B-DMFT. The self-written and tested Fortran 90/95 program based on that algorithm has been used to obtain the physical results in this Thesis. Next we focus on results obtained within the B-DMFT for the Bose-Hubbard model on a cubic lattice. We present results for both the static properties and the spectral functions. These are obtained for all ranges of interaction strength, from weak through intermediate to strong regimes. We compare the performance of the B-DMFT with other methods, mainly the static mean-field theory. While in the limiting cases the agreement is good, as expected, for intermediate interaction strength the B-DMFT provides some quantitative and qualitative corrections. We also study the Bose-Hubbard model on a square lattice with an additional infinite-range interaction. We present results for the static properties of the model. We compare the performance of the B-DMFT method with that of the static mean-field theory. Both similarities and differences are found and discussed. We also provide a first thorough study of the spectral functions of the model.

Badanie modelu Bosego-Hubbarda metodą dynamicznego pola średniego

Jaromir Panas

Streszczenie

Jednym z głównych celów współczesnej fizyki materii skondensowanej jest zrozumienie efektów silnych korelacji w układach wielu cząstek. Fizycy starają się opracować uproszczone modele, które uchwyciłyby istotę silnego oddziaływania międzycząsteczkowego. Dobrym przykładem jest model Bosego-Hubbarda. Opisuje on dobrze silnie skorelowane układy, np. takie, które obserwuje się w eksperymentach z atomami na sieci optycznej. Jednak mimo swojej stosunkowo nieskomplikowanej formy nie jest on prosty do rozwiązania. Jednocześnie wiele wysiłku poświęca się na rozwijanie przybliżonych metod rozwiązywania równań opisujących modele wielocząstkowe. Dobrym przykładem jest teoria dynamicznego pola średniego (*dynamical mean-field theory* DMFT) oraz jej bozonowy odpowiednik B-DMFT (*bosonic dynamical mean-field theory*). Dzięki wykorzystaniu nietypowego rozwinięcia w szereg w zrenormalizowanym rachunku zaburzeń pozwala ona na otrzymanie dokładniejszych wyników, w szczególności tam, gdzie inne metody zawodzą.

W tej rozprawie prezentujemy wyniki naszych badań dotyczących modelu Bosego-Hubbarda, w których korzystamy z metody B-DMFT. Rozprawę zaczynamy od szczegółowego wyprowadzenia modelu i teorii równań B-DMFT. Prezentujemy także techniczne szczegóły metody Monte Carlo w ciągłym czasie (*continuous-time quantum Monte Carlo*), którą wykorzystujemy do rozwiązania równań B-DMFT. W ramach tej pracy został napisany i przetestowany kod programu w języku Fortran 90/95 implementujący tę metodę. W dalszej części rozprawy przechodzimy do prezentacji wyników obliczeń numerycznych przeprowadzonych dla modelu Bosego-Hubbarda na trójwymiarowej sieci kubicznej. Omawiamy zarówno wyniki właściwości statycznych jak i funkcji spektralnych. Badamy zachowanie układu dla różnych wartości siły oddziaływania między atomami. Porównujemy nasze wyniki z otrzymanymi w przybliżeniu średniego pola. Zgodnie z oczekiwaniami, w granicznych przypadkach zgodność jest zadowalająca. W przypadku pośrednich wartości siły oddziaływania obserwujemy zarówno ilościowe jak i jakościowe różnice. Dodatkowo prezentujemy rezultaty badań naszą metodą modelu Bosego-Hubbarda na sieci kwadratowej z dodatkowym oddziaływaniem nieskończeniezasięgowym. W przypadku właściwości statycznych porównujemy i dyskutujemy wyniki otrzymane metodą B-DMFT z tymi, które otrzymano w ramach statycznego pola średniego. Prezentujemy również pierwszą dogłębną analizę funkcji spektralnych dla tego problemu.