



Universiteit
Antwerpen

De dynamica van het Bose-Hubbard model in een fermionische omgeving

Hélène Fermon

Faculteit Wetenschappen, Universiteit Antwerpen

Promotor: Prof. Dr. Michiel Wouters

Student: Hélène Fermon, s0204237

Masterthesis ter verkrijging van de graad van Master in de Fysica

Universiteit Antwerpen, 6 juli 2025

Masterthesis

Ingediend voor het behalen van de graad van Master in de Fysica

Universiteit Antwerpen

Faculteit Wetenschappen

6 juli 2025

Dankwoord

Het schrijven van deze masterthesis was niet alleen een academische uitdaging, maar ook een bijzonder verrijkend en motiverend traject.

In het bijzonder wil ik mijn promotor, Prof. Dr. Michiel Wouters, oprechte bedanken voor zijn inspirerende begeleiding, scherpe inzichten en onmisbare ondersteuning gedurende het hele proces. Zijn enthousiasme voor het vakgebied werkte aanstekelijk en gaf mij telkens opnieuw de motivatie en het vertrouwen om met nieuwsgierigheid en diepgang aan de thesis te werken. Dankzij zijn expertise, geduld en betrokkenheid groeide dit onderzoek uit tot een project waar ik met veel plezier aan heb gewerkt, en dat ik als één van de meest waardevolle leerervaringen van mijn opleiding beschouw.

Daarnaast wil ik ook mijn familie bedanken voor hun steun en aanmoediging. Hun vertrouwen in mij en hun oprechte interesse maakte het voor mij bijzonder uitdagend om het onderwerp voortdurend te begrijpen en zo hen steeds op de hoogte te houden. Dit bracht me in moeilijke tijden soms tot nieuwe inzichten. Zonder hun steun en luisterbereidheid zou dit traject lang niet hetzelfde zijn geweest.

Inhoudsopgave

1	Inleiding	7
2	Open kwantum systemen	9
2.1	Fysische motivatie	9
2.2	Dynamica via de optische master vergelijking	10
2.2.1	Born benadering	11
2.3	Toepassing: Bose-Hubbard model in fermionisch bad	15
2.3.1	Expansie van $u_i^{+,-}$ -termen	18
2.4	Tijdsevolutie van operatoren	21
3	Benaderde analytische oplossing	22
3.1	Dynamica van 1 site-systeem	22
3.1.1	Tijdsevolutie van $\langle a \rangle$	22
3.1.2	Tijdsevolutie van $\langle n \rangle$	24
3.2	Dynamica van niet interagerend systeem	28
3.2.1	Tijdsevolutie van $\langle a_i \rangle$	28
3.2.2	Tijdsevolutie van $\langle n_i \rangle$	30
4	Numerieke simulatie in Gutzwiller-benadering	31
4.1	Stationaire oplossing en de rol van dissipatie	31
4.2	Numerieke bepaling van de dichtheidsmatrix	32
4.3	Introduceren symmetriebreking	34
4.4	Controle numerieke code	35
4.4.1	Limietgeval: $J \rightarrow 0$	35
4.4.2	Limietgeval: $U \rightarrow 0$	36
5	Fenomenologie doorheen faseovergangen	38
5.1	Dynamica van de amplitude $ a(t) $ t.b.v. faseovergang	38
5.2	Dynamica van de numberfluctuations t.b.v. faseovergang	40
5.3	Temperatuurgedreven overgangen	44
6	Resultaten faseovergang	46
7	Kwantisatie van deeltjesaantal	49
7.1	Constructie bewegingsvergelijking ρ_n	49
7.1.1	Stationaire toestand en detailed balance	50
7.1.2	Resultaten en bespreking	52
7.2	Combinatie van lokaal exacte dynamica en tunneling	54
7.2.1	Expansie in de niet-lokale termen van de systeem Hamiltoniaan	54
7.2.2	Preliminare resultaten	55
8	Besluit	58

Abstract

In deze masterthesis onderzoeken we de dynamica van het Bose-Hubbard model wanneer dit gekoppeld wordt aan een fermionisch bad, gemodelleerd als een verzameling twee-niveausystemen. Waar gangbare benaderingen het bad meestal voorstellen als een wit, geheugenloos reservoir, maken wij gebruik van een gekleurd bad.

De centrale doelstelling van deze studie is te begrijpen hoe zulke omgevingen de dynamica van bosonische roosters beïnvloeden, met bijzondere aandacht voor de vraag of het systeem tijdens zijn evolutie naar een stationaire toestand coherentie behoudt dan wel verliest.

Om dit te analyseren maken we gebruik van een relatief recente benadering gebaseerd op de Redfield-mastervergelijking. Deze methode laat toe om gekleurde, niet-Markoviaanse omgevingen te beschrijven en vormt een krachtig alternatief voor de klassieke behandeling. Markoviaanse modellen negeren frequentieafhankelijke badcorrelaties, waardoor belangrijke fenomenen zoals coherentiebehoud of kwantisatie niet correct voorspeld worden. Binnen ons kader worden de dissipatieve termen geëxpandeerd in energie, wat toelaat om subtiële dissipatieve invloeden gecontroleerd te analyseren. Deze techniek is pas de laatste jaren in de literatuur ontwikkeld. In wat volgt gebruiken we deze methode als uitgangspunt voor zowel de analytische als numerieke studie van de systeemdynamica.

Eerst wordt een analytisch kader opgebouwd dat limietgevallen, zoals het enkel-sitesysteem zonder tunneling of het niet-interagerende systeem, benaderd oplost. Vervolgens vullen numerieke simulaties in de Gutzwiller-gemiddeld-veld-benadering deze resultaten aan, waardoor ook regimes met tunneling en interacties benaderd worden. Hiermee bestuderen we ruimtelijke structuur, symmetriebreking en het gedrag van observabelen, en onderzoeken we fase-overgangen, zoals van coherente naar incoherente dynamica, zowel temperatuur- als interactiegedreven.

Tot slot wordt expliciet nagegaan in hoeverre kwantisatie van het deeltjesaantal optreedt in stationaire toestanden, en of er fenomenologisch een duidelijke scheiding gemaakt kan worden tussen regimes met scherpe bezettingsgetallen en regimes met uitgesproken fluctuaties van het deeltjesaantal.

De resultaten tonen dat het systeem, afhankelijk van temperatuur en de verhouding J/U tussen tunneling en interactie, kan overgaan van een coherente naar een incoherente toestand. Bij lage temperatuur en sterke interactie treedt kwantisatie van het deeltjesaantal op, wat wijst op Mott-isolator-achtige plateaus. Numerieke simulaties bevestigen deze overgangen en tonen het belang van symmetriebreking voor coherente oplossingen in het gemiddeld-veld kader.

De combinatie van analytische en numerieke technieken blijkt krachtig om de dynamica van open bosonische systemen in kaart te brengen. Tegelijk biedt deze studie inzicht in hoe niet-Markoviaanse baden de coherentie, stationariteit en het fasegedrag van bosonische roosters beïnvloeden, wat relevant is voor fundamenteel onderzoek en de ontwikkeling van dissipatief gecontroleerde kwantumsimulaties en fotonische condensaten.

Abstract (English)

In this master's thesis, we investigate the dynamics of the Bose-Hubbard model when it is coupled to a fermionic bath, modeled as a collection of two-level systems. Whereas standard approaches typically represent the bath as a white, memoryless reservoir, we consider a colored environment.

The central objective of this study is to understand how such environments influence the dynamics of bosonic lattices, with particular focus on whether coherence is preserved or lost as the system evolves toward a stationary state.

To analyze this, we employ a relatively recent approach based on the Redfield master equation. This method allows us to describe colored, non-Markovian environments and offers a powerful alternative to traditional treatments. Markovian models neglect frequency-dependent bath correlations, which can result in a failure to capture essential phenomena such as coherence preservation or particle number quantization. In our framework, the dissipative terms are expanded in energy, enabling a controlled analysis of subtle dissipative effects. This technique has only emerged in the literature in recent years. We use this method as the basis for both the analytical and numerical study of the system's dynamics.

We begin by constructing an analytical framework that allows for approximate solutions in limiting cases, such as the single-site system without tunneling or the non-interacting system. These results are then complemented by numerical simulations using the Gutzwiller mean-field approach, which provides access to regimes involving both tunneling and interactions. The numerical analysis enables detailed investigation of spatial structure, symmetry breaking, and the behavior of observables, allowing us to explore phase transitions, including the transition from coherent to incoherent dynamics. Both temperature-driven and interaction-driven transitions are analyzed.

Finally, we explicitly examine the extent to which particle number quantization occurs in stationary states, and whether a phenomenological distinction can be made between regimes with sharply defined occupation numbers and those with significant number fluctuations.

The results show that the system can undergo a transition from a coherent to an incoherent state, depending on the temperature and the ratio of tunneling to interaction strength J/U . In regimes of low temperature and strong interaction, particle number quantization emerges, indicating the formation of Mott-insulator-like plateaus. The numerical simulations confirm these transitions and highlight the importance of symmetry breaking in obtaining coherent solutions within the mean-field framework.

The combination of analytical and numerical techniques proves particularly powerful in mapping out the complex dynamics of open bosonic systems. At the same time, this study provides deep insight into how non-Markovian baths affect the coherence, stationarity, and phase behavior of bosonic lattices insights relevant to both fundamental research and the development of dissipatively controlled quantum simulations and photonic condensates.

1 Inleiding

In de hedendaagse kwantumfysica neemt het onderzoek naar open kwantumsystemen een centrale plaats in, mede door hun belang in toepassingen zoals kwantuminformatie en kwantum simulaties. Terwijl klassieke kwantummechanica zich richt op geïsoleerde systemen, tonen realistische scenario's aan dat elk systeem onvermijdelijk in wisselwerking staat met zijn omgeving. Deze omgeving, vaak gemodelleerd als een thermisch bad, introduceert dissipatie en decoherentie, cruciale processen die niet alleen de dynamica beïnvloeden maar ook de stationaire toestand van kwantumsystemen bepalen.

Het groeiende belang van dissipatieve systemen manifesteert zich ook in experimentele opstellingen, zoals fotoncondensaten in microcaviteiten [1], waar lichtdeeltjes via interacties met een omgeving van kleurstofmoleculen een coherente toestand kunnen vormen. Zulke systemen illustreren hoe omgevingsinvloeden mechanismen kunnen genereren voor het stabiliseren van kwantumcoherentie. Deze inzichten zijn niet enkel fundamenteel, maar dragen ook bij aan de ontwikkeling van nieuwe kwantumtechnologieën, zoals dissipatief gestuurde kwantumsimulaties [2].

Een belangrijk model binnen de kwantumfysica is het Bose-Hubbard model, dat gebruikt wordt om de collectieve dynamica van bosonische deeltjes op een rooster te beschrijven. Wanneer dit model gekoppeld wordt aan een omgeving, bijvoorbeeld een bad van twee-niveausystemen (TLS), ontstaan er nieuwe vragen rond het evenwichtsgedrag en mogelijke faseovergangen. De traditionele benadering modelleert het bad als een lineair, geheugenloos systeem (Markoviaans). In reëlere fysische scenario's volstaat dit echter niet meer. Recent onderzoek wijst op het belang van niet-lineaire reservoirs die kunnen terugkoppelen naar het systeem, en het belang van het werken met gekleurde reservoirs [3] [4].

Hoewel er studies zijn over dissipatieve dynamica en faseovergangen in open systemen, blijft de specifieke invloed van een niet-lineair TLS-reservoir op stationaire toestanden onderbelicht. In het bijzonder is het nog onduidelijk onder welke omstandigheden het systeem een transitie maakt van een coherente naar een incoherente toestand, en welke rol dissipatie hierin speelt. Bovendien wordt vaak gefocust op sterk vereenvoudigde limieten, waardoor de bredere dynamiek onverkend blijft.

Deze thesis heeft als doel de dynamica te bestuderen van een Bose-Hubbard systeem dat dissipatief gekoppeld is aan een fermionisch bad, gemodelleerd door een verzameling twee-niveausystemen. In tegenstelling tot conventionele modellen waar een wit reservoir aan de basis ligt, gebruiken we in dit werk een gekleurd reservoir. We onderzoeken onder welke omstandigheden het systeem zich ontwikkelt naar stationaire toestanden, en of daarbij faseovergangen optreden, bijvoorbeeld van een superfluïde naar een Mott-isolatorfase of van coherente naar incoherente dynamica.

De interactie tussen systeem en reservoir wordt geformuleerd via een Hamiltoniaan met Pauli-operatoren, waarna de dynamica wordt bestudeerd met behulp van de Born benadering. Eerst wordt een analytisch model opgesteld, waarna de resultaten getoetst worden aan numerieke simulaties binnen de Gutzwiller-mean-field benadering. Deze tweevoudige aanpak laat toe om zowel limietgevallen als intermediaire regimes te analyseren. De centrale vraag die we daarbij willen beantwoorden is of, en zo ja, hoe, het systeem zijn coherentie behoudt onder de gezamenlijke invloed van dissipatie en interacties.

Deze thesis is als volgt opgebouwd: hoofdstuk 2 biedt het theoretische kader voor open kwantumsystemen en het te gebruiken model. In hoofdstuk 3 formuleren we een analytische benadering van de dynamica van dit model. Hoofdstuk 4 bevat de numerieke simulaties. Hoofdstuk 5 en 6 bespreken de resultaten in het licht van het fysisch kader, met bijzondere aandacht voor mogelijke faseovergangen. In hoofdstuk 7 volgt een bespreking over het al dan niet optreden van kwantisatie van het deeltjesaantal in dit model, een belangrijk aspect in de studie van perfecte Mott-isolatoren, waarna hoofdstuk 8 het besluit vormt.

2 Open kwantum systemen

In realistische kwantumsystemen is isolatie eerder uitzondering dan regel. Systemen staan doorgaans in wisselwerking met hun omgeving, wat leidt tot fenomenen zoals dissipatie en decoherentie. Deze invloeden veranderen niet alleen de dynamica, maar bepalen ook de uiteindelijke stationaire toestanden van het systeem. Om deze realistische situaties correct te modelleren, volstaat het niet om met gesloten systemen te werken: men moet open kwantumsystemen beschouwen, waarin het systeem voortdurend in contact staat met een extern reservoir of ‘bad’. Zoals beschreven in [6], gebruiken traditionele modellen vaak een geheugenloos, bosonisch reservoir, maar in veel experimentele opstellingen zijn deze aannames niet langer geldig.

2.1 Fysische motivatie

In 2010 realiseerden Klaers et al. een optisch systeem waarin fotoncondensatie werd waargenomen: een toestand waarin een macroscopisch aantal fotonen zich ophoudt in de grondtoestand van een effectieve tweedimensionale harmonische potentiaal. In deze opstelling wordt een fotonengas gevangen in een microcaviteit, gevormd door twee bolvormige spiegels, gevuld met een kleurstofoplossing. De caviteit zorgt voor longitudinale opsluiting van de fotonen, terwijl hun transversale beweging zich vrij ontwikkelt onder invloed van een parabolische potentiaal die voortkomt uit de spiegelgeometrie. Wat dit systeem bijzonder maakt, is dat de fotonen thermisch worden gethermaliseerd door herhaalde absorptie- en emissieprocessen met de kleurstofmoleculen, waarbij de uitwisseling van energie leidt tot een evenwichtstoestand die beschreven kan worden met een Bose–Einsteinverdeling [1].

De thermalisatie van fotonen in een kleurstofge vulde microcaviteit is gebaseerd op de Kennard-Stepanov-relatie, die een directe koppeling legt tussen de frequentieafhankelijke absorptie- en emissiecoëfficiënten van de kleurstofmoleculen bij een gegeven temperatuur T . Deze relatie waarborgt dat de verhouding tussen het emissie- en absorptiespectrum exponentieel afneemt met toenemende fotonenergie, waarmee voldaan wordt aan de voorwaarde van detailed balance. Hierdoor kan het fotonensysteem thermisch in evenwicht komen met het moleculaire bad waarin het zich bevindt [1].

Een essentieel en bijzonder aspect van dit systeem is de rol van de chemische potentiaal μ van de fotonen. In conventionele thermische straling, zoals bij zwarte lichaamsstraling, geldt $\mu = 0$, aangezien fotonen daarin vrij kunnen worden gecreëerd of geabsorbeerd en hun aantal dus niet behouden blijft. In het geval van een microcaviteit gevuld met kleurstofmoleculen wordt het fotonenaantal echter effectief gereguleerd via herhaalde absorptie- en emissieprocessen met de moleculen. Dit leidt tot een fotonengas dat zich gedraagt als een thermodynamisch ensemble met temperatuur T en een niet-nul chemische potentiaal, bepaald door de verhouding tussen geëxciteerde en niet-geëxciteerde moleculen [1].

In die zin vormt de aanwezigheid van een instelbare chemische potentiaal μ het onderscheidende kenmerk ten opzichte van klassieke thermische fotonenverdelingen. Deze situatie maakt het mogelijk om een toestand van thermisch evenwicht te bereiken waarin een Bose–Einstein-condensatie van fotonen kan optreden [1].

De microscopische beschrijving van de dynamica van dit systeem, in afwezigheid van foton-fotoninteracties, kan formeel worden benaderd met behulp van een mastervergelijking voor de tijdsevolutie van de dichtheidsmatrix van het fotonengas. Deze vergelijking

houdt rekening met dissipatie- en pomptermen, evenals met het thermalisatieproces via de interactie met de kleurstofmoleculen. In de limiet van evenwicht leidt dit formeel tot een stationaire toestand die overeenkomt met de Bose–Einsteinverdeling voor fotonen [7].

Dit is uiterst interessant, want het laat zien dat thermodynamische condensatie mogelijk is in een systeem van massaloze deeltjes zoals fotonen, mits ze voldoende lang in de caviteit gevangen blijven en herhaaldelijk in wisselwerking treden met een warmtebad. De oorspronkelijke benadering van Klaers et al. ging uit van een ideaal gas van niet-interagerende fotonen: foton-fotoninteracties werden verwaarloosd of beschouwd als verwaarloosbaar klein [1].

Maar wat gebeurt er als we interacties tussen fotonen wel expliciet meenemen in het model? Kunnen er nieuwe fenomenen optreden, zoals coherentieverlies of dissipatieve faseovergangen zoals de overgang van een superfluidum naar een Mott-isolator?

Dat is precies de inzet van deze thesis: we breiden het model uit met termen die effectieve foton-fotoninteracties representeren, en onderzoeken hoe deze de stationaire eigenschappen van het systeem beïnvloeden. We doen dit binnen het raamwerk van open kwantumsystemen, waarbij de tijdsevolutie beschreven wordt door een mastervergelijking voor de dichtheidsmatrix. Via zowel analytische technieken als numerieke simulaties bestuderen we hoe het systeem zich gedraagt in regimes waar interacties niet langer te negeren zijn.

2.2 Dynamica via de optische master vergelijking

In dit deel richten we ons op de mathematische studie van de dynamica van een open kwantumsysteem, en wordt uitgewerkt in analogie met [7]. Ons doel is om een bewegingsvergelijking af te leiden voor de evolutie van de dichtheidsmatrix van het systeem. Zodra we de dichtheidsmatrix ρ kennen, kunnen we de dynamica van het systeem volledig bestuderen, aangezien de dichtheidsmatrix alle benodigde informatie bevat over de toestand van het systeem. Met de evolutie van ρ kunnen we eenvoudig observabele grootheden en andere eigenschappen van het systeem afleiden, waardoor we een beeld kunnen krijgen van de systeemdynamica.

De afleiding van de bewegingsvergelijking voor de dichtheidsmatrix is dus cruciaal voor het begrijpen van de tijdsevolutie van het systeem. Zodra we de gereduceerde dichtheidsmatrix $\rho_S(t)$ van het systeem kunnen bepalen, kunnen we de dynamica van het gekoppelde systeem analyseren. We richten ons op een fysisch systeem met Hamiltoniaan H_S , waarvan we de dynamica willen volgen, dat echter zoals eerder vermeld gekoppeld is aan een reservoir met Hamiltoniaan H_B . Aangezien het systeem interactie heeft met zijn omgeving, introduceren we een interactie-Hamiltoniaan H_{int} in de afleiding van de totale Hamiltoniaan. De totale Hamiltoniaan, waarmee we onze analyse beginnen, wordt dan gegeven door:

$$H_{tot} = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B + H_{int}. \quad (1)$$

Waarbij I_B en I_S de eenheidsoperatoren van respectievelijk het reservoir en het systeem voorstellen.

Laat $\rho_{tot}(t)$ de evolutie van de totale dichtheidsmatrix voorstellen, die het systeem beschrijft dat interactie heeft met zijn omgeving (het ‘reservoir’). Deze dichtheidsmatrix voldoet aan de Liouville-von Neumann-vergelijking:

$$\partial_t \rho_{tot}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_{tot}, \rho_{tot}(t)], \quad (2)$$

omdat deze in feite een analogie van de Schrödingervergelijking is, maar dan voor de evolutie van de dichtheidsmatrix in plaats van voor de golffunctie van een zuiver systeem.

Wij zijn echter geïnteresseerd in de bewegingsvergelijking voor de dichtheidsmatrix van het systeem zelf, in plaats van voor de totale dichtheidsmatrix. Daarom nemen we het partiële spoor over de vrijheidsgraden van het reservoir, zodat we de gereduceerde dichtheidsmatrix van het systeem verkrijgen:

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B[\rho_{tot}(t)], \quad (3)$$

2.2.1 Born benadering

We transformeren de von Neumann-vergelijking (2) naar het interactiebeeld. Hiertoe herinneren we dat voor elke operator $A(t) = H_S \otimes H_B$, geldt:

$$\tilde{A}(t) = [U_S^\dagger(t) \otimes U_B^\dagger(t)] A(t) [U_S(t) \otimes U_B(t)], \quad (4)$$

met $U_S(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_S t\right)$ en $U_B(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_B t\right)$. Dit toepassen op de von Neumann-vergelijking levert de von Neumann-vergelijking in het interactiebeeld:

$$\partial_t \tilde{\rho}_{tot}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{int}(t), \tilde{\rho}_{tot}(t)]. \quad (5)$$

We kunnen deze vergelijking formeel integreren en bekomen zo:

$$\tilde{\rho}_{tot}(t) = \tilde{\rho}_{tot}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau [\tilde{H}_{int}(\tau), \tilde{\rho}_{tot}(\tau)]. \quad (6)$$

Door dit terug te substitueren in de comutator van vergelijking (6) bekomen we finaal:

$$\partial_t \tilde{\rho}_{tot}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{int}(t), \tilde{\rho}_{tot}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(\tau), \tilde{\rho}_{tot}(\tau)]]. \quad (7)$$

Als eerste aanname zeggen we dat er op tijdstip $t = 0$ nog geen correlaties zijn tussen het systeem en de omgeving. Onder deze benadering is de totale dichtheidsmatrix te schrijven als:

$$\tilde{\rho}_{tot}(t) \approx \tilde{\rho}(t) \otimes \tilde{\rho}_B, \quad (8)$$

Deze benadering wordt de **Born-benadering** genoemd.

Door vergelijking (8) in vergelijking (7) in te vullen en het spoor te nemen over de vrijheidsgraden van het reservoir, vinden we:

$$\partial_t \tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[\text{Tr}_B(\tilde{H}_{int}(t) \tilde{\rho}_B), \tilde{\rho}(0) \right] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \text{Tr}_B \left[\tilde{H}_{int}(t), \left[\tilde{H}_{int}(\tau), \tilde{\rho}(\tau) \otimes \tilde{\rho}_B \right] \right]. \quad (9)$$

Merk op dat we mogen aannemen dat $\tilde{H}_{shift} = \text{Tr}_B(H_{int} \tilde{\rho}_B) = 0$. Want als deze niet nul is, kunnen we eenvoudigweg zijn bijdrage opnemen in de systeem-Hamiltoniaan, $H_{int} \rightarrow H_{int} - H_{shift} \otimes I_B$ en $H_S \rightarrow H_S + H_{shift}$.

Dus valt de eerste van de rechterzijde in vergelijking (9) weg en blijven we met de tweede term over. Door gebruik te maken van een Schmidt-decompositie van de interactie-Hamiltoniaan

$$H_{int} = \sum_{\alpha} s_{\alpha} \otimes B_{\alpha}, \quad (10)$$

waarbij we eisen dat de koppelingenoperatoren van het systeem en het reservoir Hermitisch zijn, i.e. $s_{\alpha} = s_{\alpha}^{\dagger}$ en $B_{\alpha} = B_{\alpha}^{\dagger}$. Rekening houden met de cyclische permutatie van het spoor en volgende definitie van de verwachtingswaarde van een operator: $\langle O \rangle_B = \text{Tr}_B(\rho_B O)$, in acht nemen vinden. Om zo te bekomen:

$$\partial_t \tilde{\rho}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t d\tau \left([\tilde{s}_{\alpha}(t) \tilde{s}_{\beta}(\tau) \tilde{\rho}(\tau) - \tilde{s}_{\beta}(\tau) \tilde{\rho}(\tau) \tilde{s}_{\alpha}(t)] \langle \tilde{B}_{\alpha}(t) \tilde{B}_{\beta}(\tau) \rangle_B + \text{h.c.} \right). \quad (11)$$

Dit is de master vergelijking in de Born-benadering. Merk op dat de rechterkant nog steeds afhangt van $\tilde{\rho}(\tau)$, d.w.z. dat de evolutie niet-Markoviaans is, omdat het in het algemeen afhangt van de geschiedenis van de gereduceerde toestand.

In veel fysische situaties kan men deze lastige afhankelijkheid van de geschiedenis van de toestand elimineren door een benadering met betrekking op de tijdschalen van de dynamica.

Laten we starten met de badcorrelatiefuncties $C_{\alpha\beta}(t, \tau) = \langle \tilde{B}_{\alpha}(t) \tilde{B}_{\beta}(\tau) \rangle_B$ uit (11) te onderzoeken. We maken daartoe een tweede veronderstelling, nl. dat de toestand van het reservoir stationair is, zodat ze per definitie alleen afhankelijk zijn van het tijdsverschil $t - \tau$, d.w.z.

$$C_{\alpha\beta}(t, \tau) \equiv C_{\alpha\beta}(t - \tau) = \langle \tilde{B}_{\alpha}(t - \tau) \tilde{B}_{\beta}(0) \rangle_B. \quad (12)$$

In de meeste fysische baden zullen deze correlatiefuncties afnemen op een tijdschaal τ_B . Aangezien het reservoir groot is, wordt de informatie verspreid op tijdschalen τ_B die veel sneller zijn dan de tijdschaal τ_R van de relaxatiedynamica van het systeem, $\tau_B \ll \tau_R$.

Merk op dat deze benadering vooral overeenkomt met onze derde vereiste, nl. dat er een zwakke koppeling tussen het systeem en het reservoir heerst. Bij een zwakke koppeling is de interactie-Hamiltoniaan H_{int} proportioneel aan een kleine parameter κ , d.w.z. $H_{int} \propto \kappa$. Dit betekent dat de koppeling tussen het systeem en het reservoir zwak is, en daarom evolueert het systeem langzaam door de invloed van het reservoir.

De relaxatietijd τ_R van het systeem (de tijd die het systeem nodig heeft om naar zijn evenwichtstoestand terug te keren) is omgekeerd evenredig met de sterkte van de koppeling

κ . Dit betekent dat hoe zwakker de koppeling is, hoe langer het systeem erover doet om te relaxeren. Formeel uitgedrukt:

$$\tau_R \propto \frac{\hbar^2}{\kappa^2} \quad (13)$$

Aangezien κ klein is bij zwakke koppeling, is de relaxatietijd τ_R groot. Met andere woorden, het systeem evolueert traag in vergelijking met de correlatietijd van het reservoir.

De correlatietijd van het reservoir τ_B beschrijft hoe snel de correlaties in het reservoir vervagen. De badcorrelatiefuncties $C_{\alpha\beta}(t-\tau)$ vervallen snel, wat betekent dat het reservoir snel zijn geheugen verliest. Dit houdt in dat naarmate de tijdschaal τ_B klein is, de interacties tussen systeem en reservoir zich snel aanpassen en het systeem geen lange termijngeheugen van eerdere toestanden ontwikkelt.

Aangezien $\tau_B \ll \tau_R$ (dus de correlatietijd van het reservoir is veel kleiner dan de relaxatietijd van het systeem), kunnen we aannemen dat de toestand van het systeem $\tilde{\rho}(t)$ nagenoeg constant blijft op de relevante tijdschalen van de badcorrelaties. Dit betekent dat we, binnen de tijd waarop het reservoir zijn geheugen verliest, kunnen aannemen dat de toestand van het systeem nauwelijks verandert.

Hierdoor kunnen we aannemen dat de toestand van het systeem op tijd τ (in het verleden) dezelfde is als de toestand op de huidige tijd t . Daarom vervangen we in de integraal $\tilde{\rho}(\tau)$ door $\tilde{\rho}(t)$. We krijgen dan:

$$\partial_t \tilde{\rho}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^t d\tau ([\tilde{s}_\beta(\tau)\tilde{\rho}(t), \tilde{s}_\alpha(t)]C_{\alpha\beta}(t-\tau) + \text{h.c.}) \quad (14)$$

Dit is de tijdsafhankelijke Redfield master vergelijking in het interactiebeeld.

Om de vergelijking verder te vereenvoudigen, passen we een substitutie toe voor de integratievariabele τ , namelijk $\tau \rightarrow t - \tau$, zodat de badcorrelatiefunctie $C_{\alpha\beta}(\tau)$ verschijnt in de integraal. Aangezien $C_{\alpha\beta}(\tau)$ snel afneemt, kunnen we de bovengrens van de integraal naar oneindig uitbreiden. Zo wordt vergelijking (14) verder vereenvoudigd naar:

$$\partial_t \tilde{\rho}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\infty d\tau ([\tilde{s}_\beta(t-\tau)\tilde{\rho}(t), \tilde{s}_\alpha(t)]C_{\alpha\beta}(\tau) + \text{h.c.}) \quad (15)$$

In deze stap wordt het benaderend geheugenloze karakter van de dynamica duidelijk, aangezien de toestand van het systeem alleen afhankelijk is van de huidige tijd t en niet van het verleden.

Vervolgens transformeren we vergelijking (15), die in het interactie beeld geschreven is, naar een vergelijking in het Schrödinger beeld.

Om de transformatie naar de Schrödinger-afbeelding te maken, moeten we de definitie van de interactie-afbeelding gebruiken. De relatie tussen de dichtheidsmatrix in de Schrödinger-afbeelding en de interactie-afbeelding is als volgt:

$$\tilde{\rho}(t) = U_S^\dagger(t)\rho(t)U_S(t), \quad (16)$$

waarbij $U_S(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_S t\right)$ de unitaire evolutieoperator is van het systeem in de Schrödinger-afbeelding.

De inverse transformatie is dan:

$$\rho(t) = U_S(t)\tilde{\rho}(t)U_S^\dagger(t). \quad (17)$$

We willen de tijdsafgeleide van de dichtheidsmatrix in de Schrödinger-afbeelding vinden, dus nemen we de afgeleide van $\rho(t) = U_S(t)\tilde{\rho}(t)U_S^\dagger(t)$:

$$\partial_t \rho(t) = \partial_t \left(U_S(t)\tilde{\rho}(t)U_S^\dagger(t) \right). \quad (18)$$

Met de productregel krijgen we:

$$\partial_t \rho(t) = (\partial_t U_S(t)) \tilde{\rho}(t)U_S^\dagger(t) + U_S(t) (\partial_t \tilde{\rho}(t)) U_S^\dagger(t) + U_S(t)\tilde{\rho}(t) (\partial_t U_S^\dagger(t)). \quad (19)$$

De tijdsafgeleide van de unitaire operator $U_S(t)$ is:

$$\partial_t U_S(t) = -\frac{i}{\hbar} H_S U_S(t), \quad (20)$$

en:

$$\partial_t U_S^\dagger(t) = \frac{i}{\hbar} U_S^\dagger(t) H_S. \quad (21)$$

Daarom wordt de afgeleide van $\rho(t)$:

$$\partial_t \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} H_S U_S(t)\tilde{\rho}(t)U_S^\dagger(t) + U_S(t) (\partial_t \tilde{\rho}(t)) U_S^\dagger(t) + \frac{i}{\hbar} U_S(t)\tilde{\rho}(t)U_S^\dagger(t) H_S. \quad (22)$$

Dit kan herschreven worden als:

$$\partial_t \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho(t)] + U_S(t) (\partial_t \tilde{\rho}(t)) U_S^\dagger(t). \quad (23)$$

Nu vervangen we de tijdsafgeleide $\partial_t \tilde{\rho}(t)$ door de hierboven afgeleide Redfield master vergelijking (15), waarin we per definitie stellen dat $\tilde{s}_\alpha(t) = U_S^\dagger(t)s_\alpha U_S(t)$ (de systeemoperator in de interactie-afbeelding).

Dit levert ons finaal volgende vergelijking op:

$$\partial_t \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho(t)] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^\infty d\tau ([s_\beta \rho(t), s_\alpha] C_{\alpha\beta}(\tau) + \text{h.c.}). \quad (24)$$

Dit kunnen we nog herschrijven als:

$$\partial_t \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho(t)] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_\alpha ([u_\alpha \rho(t), s_\alpha] + \text{h.c.}), \quad (25)$$

waarbij dit de stationaire Redfield master vergelijking is met operatoren

$$u_\alpha = \sum_\beta \int_0^\infty d\tau \tilde{s}_\beta(-\tau) C_{\alpha\beta}(\tau) \quad (26)$$

Deze operatoren u_α kunnen we nog verfijnder uitwerken, indien we twee maal een eenheidselement invoegen als volgt:

$$u_\alpha = \sum_{\beta,n,m} \int_0^\infty d\tau |n\rangle \langle n| \tilde{s}_\beta(-\tau) |m\rangle \langle m| C_{\alpha\beta}(\tau) = \pi\hbar \sum_{\beta,n,m} s_{\beta,nm} W_{\alpha\beta}(\Delta_{nm}) |n\rangle \langle m|, \quad (27)$$

waarbij we de energiever verschillen $\Delta_{nm} = E_n - E_m$ hebben gebruikt en $\langle n| \tilde{s}_\alpha(-\tau) |m\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta_{nm} \tau} s_{\alpha,nm}$, met matrixelementen $s_{\alpha,nm} = \langle n| s_\alpha |m\rangle$ en de Laplace-transformatie van de badcorrelatiefunctie

$$W_{\alpha\beta}(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^\infty d\tau e^{-\frac{i}{\hbar} E\tau} C_{\alpha\beta}(\tau). \quad (28)$$

2.3 Toepassing: Bose-Hubbard model in fermionisch bad

Wij baseren ons model op voorgaand experimenteel systeem van Klaers et al [1]. Om deze fysische eigenschappen te modelleren, gebruiken we als reservoir een verzameling twee-niveausystemen, waarbij elke TLS een eenvoudig systeem met twee energietoestanden: een grondtoestand $|g\rangle$ en een aangeslagen toestand $|e\rangle$ heeft. De toestand van een TLS wordt beschreven door Pauli-operatoren. De operator σ_z geeft aan of het TLS zich in de grondtoestand of in de aangeslagen toestand bevindt [9], deze operator werkt als volgt:

$$\sigma_z |g\rangle = -|g\rangle \quad \text{en} \quad \sigma_z |e\rangle = +|e\rangle.$$

De operator σ_+ is de ‘raising operator’ die het systeem van de grondtoestand naar de aangeslagen toestand brengt, en voldoet aan:

$$\sigma_+ |g\rangle = |e\rangle \quad \text{en} \quad \sigma_+ |e\rangle = 0.$$

De ‘lowering operator’ σ_- brengt het TLS van de aangeslagen naar de grondtoestand, met de werkingen:

$$\sigma_- |e\rangle = |g\rangle \quad \text{en} \quad \sigma_- |g\rangle = 0.$$

Het volledige reservoir wordt gemodelleerd als een verzameling van zulke TLS’en die gekoppeld zijn aan elk van de sites van het systeem. De Hamiltoniaan van dit reservoir is [9]:

$$H_B = \sum_{i,k} W_{i,k} \sigma_{i,k}^z, \quad (29)$$

waarbij i de index van de site in het systeem, k het label van het specifieke TLS op die site, en $W_{i,k}$ de energie is die verbonden is aan het TLS. Deze energie $W_{i,k}$ stelt het energiever verschil voor tussen de grondtoestand en de aangeslagen toestand van het TLS op site i .

In dit werk beschouwen we als systeem een Bose-Hubbard keten, waarin bosonen kunnen tunnelen tussen sites en met elkaar interageren en waarbij de Bose-Hubbard keten de volgende hamiltoniaan H_S heeft:

$$H_S = -J \sum_{i=1}^{L-1} (a_i^\dagger a_{i+1} + a_{i+1}^\dagger a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^L n_i(n_i - 1) + \mu \sum_{i=1}^L n_i, \quad (30)$$

met μ de chemische potentiaal van het model die we instellen op: $\mu = 2J$, J de tunnelingsconstante voorstelt, U de interactiesterkte vertegenwoordigd en L het aantal sites in het model aanduidt.

De koppeling tussen het systeem en het reservoir beschrijft de interactie tussen de bosonen in het systeem en de TLS in het reservoir. Deze interactie wordt beschreven door de volgende Hamiltoniaan [9]:

$$H_{SB} = \sum_{i,k} c_{i,k} \left(a_i \sigma_{i,k}^+ + a_i^\dagger \sigma_{i,k}^- \right), \quad (31)$$

waarbij a_i de annihilatie-operator voor een boson op site i is en $a_i^\dagger$ de creatie-operator. Verder bepaalt de koppelingsconstante $c_{i,k}$ hoe sterk het TLS k op site i gekoppeld is aan het systeem [9].

Het volledige systeem wordt dan beschreven door de totale Hamiltoniaan [9]:

$$H_{\text{tot}} = H_S + H_B + H_{SB}, \quad (32)$$

Dit model maakt het mogelijk om op een gecontroleerde manier de invloed van dissipatieve termen te bestuderen op de dynamica van het systeem [9].

Dit gezegd zijnde, kunnen we vervolgens de mastervergelijking voor de dichtheidsmatrix $\rho(t)$ afleiden, naar analogie van [7], door gebruik te maken van vergelijking (24). Deze beschrijft de tijdsontwikkeling van het systeem onder de invloed van de interactie met het reservoir, en heeft de vorm:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -i[H_S, \rho(t)] + \sum_{i=1}^L \left([u_i^- \rho(t), a_i^\dagger] + [u_i^+ \rho(t), a_i] + \text{h.c.} \right). \quad (33)$$

De termen u_i^- en u_i^+ geven de interactie tussen het systeem en het reservoir weer. De operatoren u_i^- en u_i^+ kunnen uitgedrukt worden in termen van de correlatiefuncties $C_i^-(\tau)$ en $C_i^+(\tau)$ zoals volgt:

$$u_i^- = \int_0^\infty d\tau \tilde{a}_i(-\tau) C_i^-(\tau), \quad (34)$$

$$u_i^+ = \int_0^\infty d\tau \tilde{a}_i^\dagger(-\tau) C_i^+(\tau). \quad (35)$$

De correlatiefuncties $C_i^-(\tau)$ en $C_i^+(\tau)$ kunnen worden uitgedrukt als:

$$C_i^-(\tau) = \sum_k |c_{i,k}|^2 \langle \sigma_{i,k}^-(\tau) \sigma_{i,k}^+(0) \rangle, \quad (36)$$

$$C_i^+(\tau) = \sum_k |c_{i,k}|^2 \langle \sigma_{i,k}^+(\tau) \sigma_{i,k}^-(0) \rangle. \quad (37)$$

Door de uitdrukkingen voor u_i^- en u_i^+ verder uit te werken, verkrijgen we:

$$u_i^- = \sum_{kq} |k\rangle \langle k| a_i |q\rangle \langle q| W_i^-(E_k - E_q), \quad (38)$$

$$u_i^+ = \sum_{kq} |k\rangle \langle k| a_i^\dagger |q\rangle \langle q| W_i^+(E_k - E_q), \quad (39)$$

waarbij $W_i^\pm(E)$ de Fouriertransformatie is van de correlatiefuncties $C_i^\pm(\tau)$, gegeven door:

$$W_i^\pm(E) = \int_0^\infty d\tau e^{-iE\tau} C_i^\pm(\tau). \quad (40)$$

We kunnen nu $W_i^+(E)$ afleiden, waarbij de afleiding voor $W_i^-(E)$ analoog is. Merk op dat we in de uitdrukking voor $W_i^+(E)$ te maken hebben met de correlatiefunctie $C_i^+(\tau)$, gegeven door:

$$C_i^+(\tau) = \sum_k |c_{i,k}|^2 n(\hbar W_{i,k}). \quad (41)$$

Hier is $n(\hbar W_{i,k})$ de thermische bezettingsfunctie van de k -de modus van het reservoir.

We introduceren vervolgens de spectrale dichtheid $J_i(E)$ als:

$$J_i(E) = \sum_k |c_{i,k}|^2 \delta(E - W_{i,k}), \quad (42)$$

waarbij $\delta(E - W_{i,k})$ de Dirac-deltafunctie is die de specifieke energieniveaus van het reservoir representeert. Hiermee kunnen we de integraal voor $W_i^+(E)$ vereenvoudigen:

$$W_i^+(E) = \int_{-\infty}^\infty dE' \int_0^\infty d\tau e^{-iE\tau/\hbar} J_i(E') e^{iE'\tau/\hbar} n(E'). \quad (43)$$

Door de transformatie $E' \rightarrow E - E'$ vervolgens uit te voeren, krijgen we de vereenvoudigde uitdrukking:

$$W_i^+(E) = \int_{-\infty}^\infty dE' \int_0^\infty d\tau e^{-iE'\tau/\hbar} J_i(E - E') n(E - E'). \quad (44)$$

Nu splitsen we de complexe functie $W_i^+(E)$ op in haar reële en imaginaire delen:

$$W_i^+(E) = g(E) + iw(E). \quad (45)$$

De reële en imaginaire delen zijn gegeven door:

$$W_i^+(E) = \int_{-\infty}^\infty dE' \int_0^\infty d\tau \left[\cos\left(-\frac{E'\tau}{\hbar}\right) + i \sin\left(-\frac{E'\tau}{\hbar}\right) \right] J_i(E - E') n(E - E'). \quad (46)$$

Het reële deel van de integraal is dan:

$$W_i^+(E) = \int_{-\infty}^\infty dE' \int_0^\infty d\tau \cos\left(-\frac{E'\tau}{\hbar}\right) J_i(E - E') n(E - E'). \quad (47)$$

De integraal over τ kan worden uitgevoerd en levert:

$$W_i^+(E) = \int_{-\infty}^\infty dE' \frac{\pi}{\hbar} \delta(E') J_i(E - E') n(E - E'). \quad (48)$$

Door gebruik te maken van de eigenschappen van de Dirac-deltafunctie, krijgen we de uiteindelijke uitdrukking (hier verwaarlozen we het imaginaire deel):

$$W_i^+(E) = J_i(E)n(E). \quad (49)$$

Op een vergelijkbare manier vinden we voor $W_i^-(E)$:

$$W_i^-(E) = J_i(-E)(1 - n(-E)). \quad (50)$$

Waarbij $n(E)$ de thermische bezettingsfunctie voorstelt, gegeven door:

$$n(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/T} + 1}, \quad (51)$$

waarin μ de chemische potentiaal is en T de temperatuur van het systeem.

Tot slot, kiezen we een vlakke spectrale dichtheid $J_i(E) = \gamma$, waarmee we de numerieke oplossing van de mastervergelijking kunnen verkrijgen.

2.3.1 Expansie van $u_i^{+,-}$ -termen

In deze sectie wordt de benadering van de oplossing voor de dynamica van een kwantum-systeem besproken, in analogie met [11]. We beginnen met de vergelijkingen voor $u_{\pm}$, gegeven in vergelijkingen (34) en (35), waar een eenheidselement van de volgende vorm wordt toegevoegd:

$$1 = e^{-i(E-\epsilon_0)\tau} \Big|_{E=\epsilon_0}, \quad (52)$$

en waarbij gebruik wordt gemaakt van het Hadamard-lemma als tweede sleutelstep om te komen tot volgende algemene vorm voor $u^{\pm}$:

$$u = \int_0^\infty d\tau e^{-i([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)\tau} [v] e^{-iE\tau} \Big|_{E=\epsilon_0} C(\tau). \quad (53)$$

De term $e^{-i([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)\tau}$ is hier op te vatten als een superoperator die werkt op v , en wordt geëvalueerd via een Taylor-reeks in τ :

$$e^{-i([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)\tau} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\tau)^n}{n!} ([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)^n.$$

Daarnaast wordt gebruikgemaakt van de identiteit

$$(-i\tau)^n e^{-iE\tau} = \frac{\partial^n}{\partial E^n} e^{-iE\tau}, \quad (55)$$

waarmee men de tijdvermenigvuldiging omzet in afgeleiden naar energie. Door deze omzetting, en door de afgeleiden buiten de integraal te brengen, wordt de volledige integraal herschreven als een reeks in $([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)$, met coëfficiënten die gedefinieerd zijn als:

$$W^{(n)}(\epsilon_0) := \int_0^\infty d\tau (-i\tau)^n e^{-i\epsilon_0\tau} C(\tau) = \frac{\partial^n}{\partial E^n} \int_0^\infty d\tau e^{-i\epsilon_0\tau} C(\tau). \quad (56)$$

Zo verkrijgt men uiteindelijk de energie-expansie tot orde N :

$$u \approx u^{(N)} = W^{(0)}(\epsilon_0)[v] + \sum_{n=1}^N \frac{W^{(n)}(\epsilon_0)}{n!} ([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)^n [v]. \quad (57)$$

Vervolgens wordt de specifieke bijdrage aan u_i^- en u_i^+ bepaald door de v terug te vervangen door de respectievelijke operatoren a_i (daling) en $a_i^\dagger$ (stijging) in vergelijking (54). Dit levert de volgende uitdrukkingen op :

$$u_i^- \approx \sum_{n=0}^N \frac{W_i^{-(n)}(\epsilon_0)}{n!} ([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)^n [a_i], \quad (58)$$

en

$$u_i^+ \approx \sum_{n=0}^N \frac{W_i^{+(n)}(\epsilon_0)}{n!} ([H_S, \cdot] - \epsilon_0 \cdot)^n [a_i^\dagger]. \quad (59)$$

Daarna worden de bijdragen van de verschillende ordes geanalyseerd, onder de aanname $\epsilon_0 = 0$ in dit model.

Nulde orde bijdrage Voor de nulde orde ($N=0$) vinden we de volgende bijdragen voor u_i^- en u_i^+ :

$$u_i^{-(0)} \approx W_i^-(0)a_i = \gamma [1 - n(-0)] a_i = \frac{\gamma}{e^{-\mu/T} + 1} a_i, \quad (60)$$

en

$$u_i^{+(0)} \approx W_i^+(0)a_i^\dagger = \gamma [n(0)] a_i^\dagger = \frac{\gamma}{e^{\mu/T} + 1} a_i^\dagger. \quad (61)$$

Deze nulde orde termen beschrijven de basisinteracties van het systeem en worden vaak gebruikt om de grondtoestand van het systeem te karakteriseren.

Eerste orde bijdrage: Voor de eerste orde ($N=1$) worden de effecten van de interacties tussen de operatoren a_i , $a_i^\dagger$ en de Hamiltoniaan H_S meegenomen. Dit leidt tot de volgende bijdragen:

$$u_i^{-(1)} \approx W_i^{-(1)}(0) \cdot [H_S, a_i] = -\frac{\gamma e^{-\mu/T}}{T(e^{-\mu/T} + 1)^2} (Ja_{i+1} + Ja_{i-1} - 2Ja_i - Ua_i^\dagger a_i^2),$$

en

$$u_i^{+(1)} \approx W_i^{+(1)}(0) \cdot [H_S, a_i^\dagger] = \frac{\gamma e^{\mu/T}}{T(e^{\mu/T} + 1)^2} (Ja_{i+1}^\dagger + Ja_{i-1}^\dagger - 2Ja_i^\dagger - Ua_i^{\dagger 2} a_i).$$

Deze eerste orde termen beschrijven de directe effecten van de interacties op de operatoren a_i en $a_i^\dagger$.

Tweede orde bijdrage: Ten slotte worden de tweede orde (N=2) termen berekend, die de effecten van hogere-orde interacties in het systeem bevatten. Dit geeft de volgende bijdragen:

$$u_i^{-(2)} \approx \frac{W_i^{-(2)}(0) \cdot ([H_S, [H_S, a_i]])}{2} = \frac{W^{-(2)}}{2} (H_S^2 a - 2H_S a H_S + a H_S^2) \quad (62)$$

en

$$u_i^{+(2)} \approx \frac{W_i^{+(2)}(0) \cdot ([H_S, [H_S, a_i^\dagger]])}{2} = \frac{W^{+(2)}}{2} (H_S^2 a^\dagger - 2H_S a^\dagger H_S + a^\dagger H_S^2). \quad (63)$$

Deze termen bevatten de kwadratische effecten van de interacties en bieden een meer gedetailleerde beschrijving van de dynamica van het systeem. Op analoge manier kunnen we nog hogere ordes bepalen maar voor dit model maken we de keuze tot eerste orde te werken.

Eerste centrale vergelijking: Mastervergelijking doorheen dit werk

Ter samenvatting presenteren we hier de centrale mastervergelijking die doorheen dit werk als uitgangspunt zal dienen voor de analyse van de dissipatieve dynamica.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -i[H_S, \rho(t)] + \sum_{i=1}^L ([u_i^- \rho(t), a_i^\dagger] + [u_i^+ \rho(t), a_i] + \text{h.c.}), \quad (64)$$

waarbij H_S de Bose-Hubbard-Hamiltoniaan is en $a_i, a_i^\dagger$ respectievelijk de annihilatie- en creatie-operator op site i voorstellen. De dissipatieve interactie met het reservoir wordt hierin verwerkt via de operatoren $u_i^\pm$:

$$u_i^- = \frac{\gamma}{e^{-\mu/T} + 1} a_i - \frac{\gamma e^{-\mu/T}}{T(e^{-\mu/T} + 1)^2} (J a_{i+1} + J a_{i-1} - 2J a_i - U a_i^\dagger a_i^2),$$

$$u_i^+ = \frac{\gamma}{e^{-\mu/T} + 1} a_i^\dagger + \frac{\gamma e^{-\mu/T}}{T(e^{-\mu/T} + 1)^2} (J a_{i+1}^\dagger + J a_{i-1}^\dagger - 2J a_i^\dagger - U a_i^{\dagger 2} a_i).$$

Deze vergelijking vormt het uitgangspunt voor zowel de analyse van de dichtheids-matrixevolutie als de tijdsevolutie van observabelen.

2.4 Tijds-evolutie van operatoren

Nu hebben we een manier gevonden om de tijds-evolutie van de dichtheidsmatrix van het systeem te bepalen, en kunnen we de tijds-evolutie van de verwachtingswaarde van eender welke operator A bepalen. Dit door te stellen dat $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$ en vervolgens de tijdsafgeleide binnen het spoor te brengen, zoals beschreven in [12].

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \text{Tr} \left(A \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) \right). \quad (65)$$

Hierin stelt $\rho(t)$ de dichtheidsmatrix van het systeem voor. De dichtheidsmatrix bevat alle informatie over de toestanden van het systeem, en de tijds-evolutie van deze matrix bepaalt de evolutie van alle fysische grootheden in het systeem. Om de tijds-evolutie van $\langle A \rangle$ te berekenen, moeten we de tijdsafgeleide van de dichtheidsmatrix $\rho(t)$ kennen. Deze werd in vorige sectie bepaald en levert nu geen belemmering meer.

Door deze uitdrukking voor $\partial_t \rho(t)$ te substitueren in de eerder genoemde tijds-evolutie-vergelijking voor $\langle A \rangle$, krijgen we de tijds-evolutie van de verwachtingswaarde van A als volgt:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \text{Tr} \left(A \left(-\frac{i}{\hbar} [H_s, \rho(t)] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,\alpha} ([u_{i,\alpha} \rho(t), s_{i,\alpha}]) - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,\alpha} ([\rho(t) u_{i,\alpha}^\dagger, s_{i,\alpha}^\dagger]) \right) \right). \quad (66)$$

We vereenvoudigen nu de termen in deze vergelijking. De eerste term bevat de commutator met de Hamiltoniaan H_s . Na het uitvoeren van de commutator en het cyclisch permuteren van de operatoren zodat de dichtheidsmatrix $\rho(t)$ uiterst rechts komt te staan in het spoor, krijgen we de verwachtingswaarde van de commutator $[A, H_s]$, omdat het spoor van een operator vermenigvuldigd met de dichtheidsmatrix de verwachtingswaarde van die operator is. Dit wordt:

$$-\frac{i}{\hbar} \text{Tr}(A[H_s, \rho(t)]) = -\frac{i}{\hbar} \langle [A, H_s] \rangle = -\frac{i}{\hbar} (\langle AH_s \rangle - \langle H_s A \rangle). \quad (67)$$

De tweede en derde term bevatten de sommen over de operatoren $u_{i,\alpha}$ en $s_{i,\alpha}$. Door de commutator in deze termen te evalueren en cyclisch te permuteren, kunnen we de uitdrukking herschrijven als:

$$\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,\alpha} \text{Tr} (A ([u_{i,\alpha} \rho(t), s_{i,\alpha}] + h.c.)) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,\alpha} \left(\text{Tr} ([s_{i,\alpha}, A] u_{i,\alpha} \rho(t)) - \text{Tr} (u_{i,\alpha}^\dagger [s_{i,\alpha}^\dagger, A] \rho(t)) \right). \quad (68)$$

Vergelijkingen (67) en (68) samen bepalen de tijds-evolutie van de operatoren in ons systeem:

Tweede centrale vergelijking: Tijdsevolutie operatoren

De tweede fundamentele vergelijking die in deze thesis centraal staat, betreft de tijdsevolutie van de verwachtingswaarde van een willekeurige operator A in het systeem. Deze werd afgeleid op basis van de eerder geïntroduceerde mastervergelijking en luidt als volgt:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = -\frac{i}{\hbar} (\langle AH_S \rangle - \langle H_S A \rangle) + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,\alpha} \left(\langle [s_{i,\alpha}, A] u_{i,\alpha} \rangle - \langle u_{i,\alpha}^\dagger [s_{i,\alpha}^\dagger, A] \rangle \right). \quad (69)$$

Deze vergelijking maakt het mogelijk om, vertrekkend van de dynamica van de dichtheidsmatrix, direct de tijdsevolutie van observabelen te bestuderen. In deze context staan $s_{i,\alpha}$ voor de koppelingsoperatoren van het systeem, en $u_{i,\alpha}$ beschrijven het effect van het reservoir tot op eerste orde.

Door toepassing van deze formule kunnen we de dynamica van fysisch relevante grootheden zoals $\langle a_i \rangle$ (coherentie) en $\langle n_i \rangle$ (deeltjesgetal) analyseren. Zo verkrijgen we inzicht in hoe parameters zoals tunnelingsterkte J , interactieparameter U , temperatuur T en chemische potentiaal μ het dynamisch gedrag en de benadering van de stationaire toestand beïnvloeden.

3 Benaderde analytische oplossing

In dit hoofdstuk presenteren we een analytische benadering voor de beschrijving van de systeemdynamica in verschillende regimes. De focus ligt op het verkrijgen van inzicht in de evolutie van bepaalde observabelen.

De gekozen regimes laten toe om de invloed van specifieke termen in de Hamiltoniaan afzonderlijk te analyseren. De hier gepresenteerde resultaten vormen een belangrijke basis voor de latere numerieke simulaties, en helpen om de fysische mechanismen die aan de grondslag liggen van het systeemgedrag beter te begrijpen.

3.1 Dynamica van 1 site-systeem

In deze subsectie bestuderen we de tijdsevolutie van de relevante operatoren $\langle n \rangle$ en $\langle a \rangle$, in een vereenvoudigde situatie waarin we ons beperken tot één enkele site van het systeem. Daarbij negeren we tunnelingsprocessen door $J = 0$ te stellen, en focussen we uitsluitend op de interactieterm van de Hamiltoniaan. De Hamiltoniaan reduceert in dit geval tot:

$$H_S = \frac{U}{2} n(n-1), \quad (70)$$

waarbij $n = a^\dagger a$ de bezettingsoperator is op de enige beschouwde site.

3.1.1 Tijdsevolutie van $\langle a \rangle$

We kiezen de annihilatie-operator a als de operator A in deze afleiding. Dit vereist het berekenen van de commutatoren $[s_\alpha, a]$, $[s_\alpha^\dagger, a]$ en $[a, H_S]$. De grootheden u_α zijn bekend

als u_i^+ en u_i^- , waarbij $s_\alpha = a$ respectievelijk $s_\alpha = a^\dagger$ overeenkomen als keuze voor s_α .

Door deze substituties toe te passen in vergelijkingen (69) en rekening te houden met de volgende fundamentele commutatierelaties:

$$[a, a] = 0 \quad (71)$$

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1, \quad (72)$$

bekomen we de volgende bewegingsvergelijking voor de verwachtingswaarde van de annihilatie-operator:

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle = \frac{-2Ui}{\hbar}\langle a^\dagger a^2 \rangle + \langle u^{+\dagger} \rangle - \langle u^- \rangle. \quad (73)$$

Ten slotte substitueren we de verwachtingswaarden van $u^{+\dagger}$ en u^- . Hierdoor verkrijgen we de uiteindelijke vergelijking:

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle = \frac{-2Ui}{\hbar}\langle a^\dagger a^2 \rangle + (W^{+(0)} - W^{-(0)})a + (W^{+(1)} + W^{-(1)})Ua^\dagger a^2. \quad (74)$$

Stationaire oplossing voor $\langle a \rangle$

We beginnen met de dynamische mean-field vergelijking (74) en kiezen de conventie $\hbar = 1$, zodat de vergelijking herschreven wordt als:

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle = -2Ui\langle a^\dagger a^2 \rangle + (W^{+(0)} - W^{-(0)})\langle a \rangle + (W^{+(1)} + W^{-(1)})U\langle a^\dagger a^2 \rangle. \quad (75)$$

Om de notatie te vereenvoudigen, definiëren we de grootheden:

$$A = W_i^{+(0)} - W_i^{-(0)}, \quad B = W_i^{+(1)} + W_i^{-(1)}. \quad (76)$$

Door deze substitutie in vergelijking (75) verkrijgen we:

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle \approx -2Ui\langle a^\dagger a^2 \rangle + A\langle a \rangle + BU\langle a^\dagger a^2 \rangle. \quad (77)$$

We hanteren nu de factorisatiebenadering:

$$\langle abc\dots \rangle = \langle a \rangle \langle b \rangle \langle c \rangle \dots \quad (78)$$

en postuleren een mogelijke stationaire oplossing van de vorm:

$$\langle a \rangle = C_1 e^{i\mu t}. \quad (79)$$

Substitutie van deze oplossing in vergelijking (77) en gelijkstellen aan nul resulteert in:

$$-2UC_1^2C_1^*e^{i\mu t} + AC_1e^{i\mu t} + BUC_1^2C_1^*e^{i\mu t} = 0. \quad (80)$$

Dit kan herschreven worden als:

$$-2UC_1^2C_1^*i + AC_1 + BUC_1^2C_1^* = 0. \quad (81)$$

Door afzonderlijk de reële en imaginaire componenten gelijk te stellen, verkrijgen we het volgende stelsel:

$$\begin{cases} 2UC_1^2C_1^* = 0 \\ BUC_1^2C_1^* + AC_1 = 0 \end{cases} \quad (82)$$

Hieruit volgt direct dat $C_1 = 0$.

Bespreking stationaire oplossing voor $\langle a \rangle$

De afwezigheid van een niet-triviale oplossing voor $\langle a \rangle$ kan worden begrepen door de symmetrie van de Hamiltoniaan. De Hamiltoniaan H_s bezit een $U(1)$ -symmetrie, wat inhoudt dat deze invariant blijft onder de transformatie [13]:

$$a \rightarrow e^{i\theta} a. \quad (83)$$

Deze symmetrie impliceert dat de operator a zich vrij kan roteren in het complexe vlak zonder dat de fysische eigenschappen veranderen [14]. Dit betekent dat de verwachtingswaarde $\langle a \rangle$ eveneens moet transformeren als:

$$\langle a \rangle \rightarrow e^{i\theta} \langle a \rangle. \quad (84)$$

Aangezien er geen specifieke voorkeurshoek θ is in het systeem, volgt hieruit dat de enige consistente oplossing $\langle a \rangle = 0$ is. Dit resultaat bevestigt onze eerdere analytische berekeningen en toont aan dat er geen macroscopische coherentie in het systeem ontstaat [15].

3.1.2 Tijdsevolutie van $\langle n \rangle$

Om de tijdsevolutie van het gemiddelde aantal deeltjes op site i te bepalen, maken we opnieuw gebruik van vergelijking (69). Ditmaal kiezen we voor A de operator n , wat resulteert in de volgende vergelijking:

$$\frac{d}{dt}\langle n \rangle = \text{Tr} \left(-\frac{i}{\hbar} n [H_s, \rho] \right) + \text{Tr} \left(n \sum_{\alpha} [u_{\alpha} \rho, s] \right) + \text{Tr} \left(n \sum_{\alpha} [s_{\alpha}^{\dagger}, \rho u_{\alpha}^{\dagger}] \right). \quad (85)$$

Door gebruik te maken van cyclische permutatie-eigenschappen binnen de sporen, kan deze vergelijking herschreven worden als:

$$\frac{d}{dt}\langle n \rangle = \text{Tr}([n, H_s]\rho) + \text{Tr}([a, n]u_+\rho) + \text{Tr}([a^{\dagger}, n]u_-\rho) + \text{Tr}(u_+^{\dagger}[n, a^{\dagger}]\rho) + \text{Tr}(u_-^{\dagger}[n, a]\rho).$$

De commutatoren die voorkomen in deze spoor-termen, worden als volgt geëvalueerd:

$$[n, H_s] = \frac{U}{2}[n, n^2] - \frac{U}{2}[n, n] = 0 \quad (86)$$

en de andere commutatoren zijn gekend als:

$$[a, n] = a, \quad [a^\dagger, n] = -a^\dagger, \quad [n, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [n, a] = -a. \quad (87)$$

Hieruit volgt de uiteindelijke bewegingsvergelijking:

$$\frac{d}{dt}\langle n \rangle = \langle au_+ \rangle - \langle a^\dagger u_- \rangle + \langle u_+^\dagger a^\dagger \rangle - \langle u_-^\dagger a \rangle. \quad (88)$$

De vier termen in het rechterlid van vergelijking (88) kunnen verder worden uitgewerkt. De bijdragen van nulde orde worden gegeven door:

$$2W_+^{(0)}(1 + \langle n \rangle) - 2W_-^{(0)}\langle n \rangle. \quad (89)$$

De bijdragen van eerste orde zijn:

$$W_+^{(1)}\left[U\langle aa^\dagger a \rangle\right] + W_-^{(1)}\left[U\langle a^{\dagger 2} a^2 \rangle\right]. \quad (90)$$

Als we alles samenvoegen levert dit finaal de volgende bewegingsvergelijking op:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n \rangle \Big|_J &= 2W_+^{(0)}(1 + \langle n \rangle) - 2W_-^{(0)}\langle n \rangle + W_+^{(1)}(2U\langle n^2 \rangle + 2U\langle n \rangle) \\ &\quad - W_-^{(1)}(-2U\langle n^2 \rangle + 2U\langle n \rangle). \end{aligned} \quad (91)$$

Stationaire oplossing voor $\langle n \rangle$

Bij het oplossen van vergelijking (91) moet een benadering worden gemaakt voor het tweede moment van de bezettingsoperator n . Een eenvoudige maar vaak te beperkte aanname zou zijn om de correlatie te verwaarlozen en te stellen:

$$\langle n^2 \rangle = \langle n \rangle^2, \quad (92)$$

wat impliceert dat de variantie van n exact nul is, dus dat het deeltjesgetal volledig scherp bepaald is en er geen fluctuaties zijn. Deze aanname is echter te restrictief voor realistische fysische situaties waarin bezettingsfluctuaties wél een rol spelen.

Daarom introduceren we een correctiefactor f en maken de ruimere benadering:

$$\langle n^2 \rangle \approx f\langle n \rangle^2, \quad (93)$$

waarbij $f \geq 1$ een maat is voor de sterkte van de bezettingsfluctuaties. Indien $f = 1$, is de variantie van n nul en beschrijft men een toestand met volledig gekwantiseerde bezetting. Dit komt overeen met de situatie in een Mott-isolator, waarin numberfluctuations onderdrukt zijn. Zoals uitgebreider besproken zal worden in hoofdstuk 5, is deze afwezigheid van fluctuaties (i.e. $\text{Var}(n) = 0$) een noodzakelijke voorwaarde voor het ontstaan van perfecte Mott-isolator fysica.

Voor $f > 1$ daarentegen is er sprake van niet-triviale fluctuaties rond het gemiddelde, wat wijst op een toestand waarin de bezetting niet scherp is, typisch voor regimes buiten het Mott-plateau, zoals o.a. een superlfuide regime. De factor f laat ons dus toe om op gecontroleerde wijze af te wijken van de ideaalgevalbenadering $\langle n_j^2 \rangle = \langle n_j \rangle^2$, en zo fluctuerende regimes fenomenologisch te beschrijven.

Toegepast op vergelijking (91) leidt dit tot de volgende stationaire vergelijking:

$$2W^{+(0)}(1 + \langle n \rangle) - 2W^{-(0)}\langle n \rangle + W^{+(1)}(2Uf\langle n \rangle^2 + 2U\langle n \rangle) - W^{-(1)}(-2Uf\langle n \rangle^2 + 2U\langle n \rangle) = 0. \quad (94)$$

Deze vergelijking kan herschreven worden als een kwadratische vergelijking in $\langle n_j \rangle$:

$$Uf(W^{+(1)} + W^{-(1)})\langle n \rangle^2 + (W^{+(0)} - W^{-(0)} + UW^{+(1)} - UW^{-(1)})\langle n \rangle + W^{+(0)} = 0. \quad (95)$$

Aangezien deze vergelijking de vorm $an^2 + bn + c = 0$ heeft, kunnen de oplossingen expliciet worden geschreven als:

$$\langle n_{1,2} \rangle = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (96)$$

waarbij de coëfficiënten gegeven worden door:

- $a = 2Uf(W^{+(1)} + W^{-(1)})$
- $b = 2W^{+(0)} - 2W^{-(0)} + 2UW^{+(1)} - 2UW^{-(1)}$
- $c = 2W^{+(0)}$

Deze oplossingen beschrijven de stationaire bezetting $\langle n_j \rangle$ in termen van de dissipatieve overgangparameters en de interactiesterkte, waarbij de factor f expliciet de rol van bezettingsfluctuaties incorporeert.

Bespreking stationaire oplossing $\langle n \rangle$

Omdat de Hamiltoniaan H_s een $U(1)$ -symmetrie bezit, betekent dit voor de dichtheidsoperator $\langle a^\dagger a \rangle$ geldt dan [14]:

$$\langle a^\dagger a \rangle \rightarrow e^{i\theta} e^{-i\theta} \langle a^\dagger a \rangle = \langle a^\dagger a \rangle, \quad (97)$$

Hieruit halen we dat deze verwachtingswaarde invariant blijft onder de $U(1)$ -symmetrie, en dus geen directe informatie oplevert over mogelijke symmetriebreking of macroscopische coherentie.

Een alternatieve methode om de stationaire oplossing voor $\langle n \rangle$ fysisch te interpreteren, is door de betrokken termen $W^{\pm(0)}$ en $W^{\pm(1)}$ in de stationaire oplossing, gegeven door vergelijking (96), uit te drukken in functie van de bezettingsfunctie $n(E)$, en vervolgens $n(E)$ zelf te benaderen via een Taylor-expansie rond $E = 0$. Dit maakt het mogelijk om een vereenvoudigde, maar inzichtelijke uitdrukking te bekomen [16]:

$$n(E) \simeq \frac{1}{\frac{E-\mu}{T} + 2} \quad (98)$$

De overgangen kunnen dan benaderd worden als:

$$\begin{cases} W^{-(0)} \simeq \gamma \frac{2T-\mu}{4T}, \\ W^{+(0)} \simeq \gamma \frac{2T+\mu}{4T}, \\ W^{-(1)} \simeq \frac{-1}{4T} \gamma, \\ W^{+(1)} \simeq \frac{-1}{4T} \gamma. \end{cases} \quad (99)$$

Deze benadering laat toe om een vereenvoudigde vorm van de stationaire oplossing te verkrijgen, waarin de temperatuur en chemische potentiaal expliciet voorkomen. Uitschrijven van vergelijking (96) geeft:

$$\langle n \rangle = \frac{W^{+(0)}}{W^{-(0)} - W^{+(0)} - UfnW^{+(1)} - UfnW^{-(1)}}. \quad (100)$$

Substitutie van de benaderingen voor $W^{\pm(0/1)}$ uit vergelijking (98) leidt tot:

$$\langle n \rangle \simeq \frac{T}{-\mu + Ufn} = \frac{-T}{\mu - Ufn}. \quad (101)$$

In het limietgeval zonder interacties volgt:

$$\langle n \rangle = \frac{W^{+(0)}}{W^{-(0)} - W^{+(0)}} = \frac{1}{\frac{W^{-(0)}}{W^{+(0)}} - 1}, \quad (102)$$

en met de benadering:

$$\frac{W^-}{W^+} \simeq 1 - \frac{\mu}{T}, \quad (103)$$

bekomen we:

$$\langle n \rangle \simeq \frac{1}{1 - \frac{\mu}{T} - 1} = \frac{-T}{\mu}, \quad (104)$$

Door de expansie van de Bose distributie gegeven door:

$$n(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - 1}, \quad (105)$$

door te voeren, zien we in dat dit precies het klassieke resultaat oplevert. Dit doordat men bij grote bezettingen de exponentiële term in deze Bose distributie kan expanderen tot:

$$e^{\beta(E-\mu)} \approx 1 + \beta(E - \mu), \quad (106)$$

waardoor we voor $N(E)$ als klassieke limiet vinden:

$$n(E) \approx \frac{1}{\beta(E - \mu)} = \frac{1}{\frac{1}{k_B T}(E - \mu)}. \quad (107)$$

In dit werk is $E = 0$ en stellen we voor de Boltzmanconstante: $k_B = 1$, waardoor we finaal vinden dat:

$$n = \frac{-T}{\mu}, \quad (108)$$

wat exact het resultaat is dat we terug vinden in vergelijking (104).

Door deze methode wordt de fysische betekenis van de oplossing transparanter: de bezetting wordt lineair bepaald door temperatuur en chemische potentiaal, en interacties verschuiven effectief de energieniveaus via Ufn .

3.2 Dynamica van niet interagerend systeem

In deze sectie analyseren we de tijdsevolutie van de verwachtingswaarden $\langle a_i \rangle$ en $\langle n_i \rangle$, onder de aanname dat uitsluitend tunnelingseffecten bijdragen aan de dynamica. Dit komt overeen met het regime waarin de interactieterm wordt uitgeschakeld door $U = 0$ te stellen, zodat enkel het tunnelinggedeelte van de Hamiltoniaan overblijft. Op die manier kunnen we de invloed van louter kinetische processen op de systeemdynamica geïsoleerd bestuderen. De gebruikte vergelijkingen zijn gebaseerd op het formele kader uit hoofdstuk 2.

3.2.1 Tijdsevolutie van $\langle a_i \rangle$

In deze sectie richten we ons op het bepalen van de tijdsevolutie van de operator $\langle a_i \rangle$, die de verwachtingwaarde van de operator a_i representeert. We maken gebruik van de eerder afgeleide vergelijking voor de tijdsafgeleide van deze verwachtingwaarde, die als volgt wordt uitgedrukt:

$$\frac{d}{dt}\langle a_i \rangle = \text{Tr}(-ia_i[H_s, \rho]) + \text{Tr}(a_i[u_i^+ \rho, a_i]) + \text{Tr}(a_i[u_i^- \rho, a_i^\dagger]) + \text{Tr}(a_i[a_i^\dagger, \rho u_i^{+\dagger}]) + \text{Tr}(a_i[a_i, \rho u_i^{-\dagger}]). \quad (109)$$

Deze uitdrukking beschrijft hoe de verwachtingwaarde van a_i evolueert in de tijd. De eerste term omvat de invloed van de Hamiltoniaan H_s op de toestand ρ , terwijl de andere termen de effecten van de u_α 's beschrijven, die in wezen verantwoordelijk zijn voor de interacties tussen de deeltjes en de omgeving.

Door gebruik te maken van de eigenschap $\text{Tr}(A\rho) = \langle A \rangle$, waarbij het spoor van een operator over de dichtheidsmatrix gelijk is aan de verwachtingswaarde van die operator, kunnen we de tijdsevolutie herschrijven. Verder voeren we een cyclische permutatie door en substitueren we de uitdrukkingen voor u_α 's.

Na deze stappen krijgen we de volgende vereenvoudigde vorm voor de tijdsafgeleide van de verwachtingswaarde van a_i :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle a_i \rangle &= -i\langle [a_i, H_s] \rangle - \langle u_i^- \rangle + \langle u_i^{+\dagger} \rangle = \left(iJ + JW^{-(1)} - JW^{+(1)} \right) (\langle a_{i+1} \rangle + \langle a_{i-1} \rangle - \langle a_i \rangle) \\ &\quad + (W^+ + W^-) \langle a_i \rangle. \end{aligned} \quad (110)$$

In de bovenstaande vergelijking is de tijdsevolutie van de verwachtingswaarde van a_i uitgedrukt in termen van de interactieparameters J , $W^{-(1)}$, en $W^{+(1)}$. De termen $\langle a_{i+1} \rangle$, $\langle a_{i-1} \rangle$, en $\langle a_i \rangle$ geven de koppelingen van de verschillende sites in het systeem weer.

We zijn geïnteresseerd in het verkrijgen van een oplossing in de Fourier-ruimte, aangezien deze een gemakkelijke analytische oplossing levert. Door over te schakelen naar Fourier-ruimte kunnen gekoppelde termen in het Hamiltoniaan vaak worden *gediagonaliseerd*, waardoor het systeem wordt herleid tot een som van onafhankelijke modi in plaats van een netwerk van gekoppelde sites [13] [17].

Daartoe voeren we de volgende Fourier-transformatie in, waarbij we de operatoren a_n en $a_n^\dagger$ in termen van de golfvectors k herschrijven:

$$\begin{cases} a_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k a_k e^{ink}, \\ a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k a_k^\dagger e^{-ink}. \end{cases} \quad (111)$$

Hierin vertegenwoordigt a_k de annihilatie-operator voor een mode met golfvector k , en zorgt de normalisatiefactor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ervoor dat de transformatie unitaire eigenschappen behoudt [18].

Na het substitueren van deze Fourier-transformatie in de tijdsafgeleide vergelijking, krijgen we de uiteindelijke expressie voor de tijdsevolutie van $\langle a_k \rangle$ in de Fourier-ruimte:

$$\frac{d}{dt}\langle a_k \rangle = (2 \cos k - 1) \left(-iJ + W^{-(1)}J - W^{+(1)}J \right) \langle a_k \rangle + (W^+ - W^-) \langle a_k \rangle. \quad (112)$$

Stationaire oplossing voor $\langle a_i \rangle$

Voor de stationaire oplossing van de tijdsevolutie beschouwen we de situatie waarbij de tijdsafgeleide van $\langle a_k \rangle$ nul is. Dit impliceert dat de verwachtingswaarde van a_k constant blijft over de tijd, wat overeenkomt met een evenwichtstoestand van het systeem. Dit leidt tot de volgende vergelijking:

$$\frac{d}{dt}\langle a_k \rangle = 0. \quad (113)$$

In dit geval kunnen we eenvoudig concluderen dat de stationaire oplossing van de tijdsevolutie gelijk is aan nul:

$$\langle a_k \rangle = 0, \quad (114)$$

omdat de uitdrukking volgende vorm aanneemt:

$$\frac{d}{dt}\langle a_k \rangle = A\langle a_k \rangle,$$

en het dus triviaal is dat dit enkel en alleen nul kan zijn als $\langle a_k \rangle = 0$.

De bespreking van de stationaire oplossing van $\langle a_k \rangle$ is equivalent aan deze van het 1 site model. Wat vertrouwen schept in de gevonden stationaire oplossing voor a_k .

3.2.2 Tijdsevolutie van $\langle n_i \rangle$

Analoog berekend is tijdsevolutie van de verwachtingswaarde voor het aantal deeltjes op site i is gegeven door:

$$\frac{d}{dt}\langle n_i \rangle = \text{Tr}(-in_i[H_s, \rho]) + \text{Tr}(n_i[u_i^+ \rho, a_i]) + \text{Tr}(n_i[u_i^- \rho, a_i^\dagger]) + \text{Tr}(n_i[a_i^\dagger, \rho u_i^{+\dagger}]) + \text{Tr}(n_i[a_i, \rho u_i^{-\dagger}]). \quad (115)$$

Na het cyclisch permuteren van de termen in de sporen en het gebruik maken van de relatie $\text{Tr}(A\rho) = \langle A \rangle$ en de substitutie van de u_α 's, vinden we de volgende uitdrukking voor de tijdsevolutie van de verwachtingswaarde van n_i :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n_i \rangle &= iJ\langle a_i^\dagger a_{i+1} - a_{i-1}^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i-1} - a_{i+1}^\dagger a_i \rangle + 2W^+\langle a_i a_i^\dagger \rangle - 2W^-\langle a_i^\dagger a_i \rangle \\ &\quad - JW^{+(1)}(\langle a_i a_{i-1}^\dagger \rangle + \langle a_i a_{i+1}^\dagger \rangle - 2\langle a_i a_i \rangle) - JW^{-(1)}(\langle a_i^\dagger a_{i+1} \rangle + \langle a_i^\dagger a_{i-1} \rangle - 2\langle a_i^\dagger a_i \rangle) - \\ &\quad JW^{+(1)}(\langle a_{i-1} a_i^\dagger \rangle + \langle a_{i+1} a_i^\dagger \rangle - 2\langle a_i a_i^\dagger \rangle) - JW^{-(1)}(\langle a_{i+1}^\dagger a_i \rangle + \langle a_{i-1}^\dagger a_i \rangle - 2\langle a_i^\dagger a_i \rangle). \end{aligned} \quad (116)$$

Tot slot voeren we de Fourier transformatie door en verkrijgen de volgende vorm voor de tijdsevolutie van $\langle n_k \rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle n_k \rangle = A\langle n_k \rangle + B, \quad (117)$$

waarbij $B = 2W^+ - 4JW^{+(1)}(\cos k - 1)$ en $A = 2(W^+ - W^-) - 4J(W^{+(1)} + W^{-(1)})(\cos k - 1)$.

Stationaire oplossing van $\langle n_k \rangle$

De stationaire toestand wordt bepaald door het rechterlid van de bewegingsvergelijking gelijk te stellen aan nul. Aangezien de tijdsevolutie van $\langle n_k \rangle$ de vorm heeft van een lineaire functie, resulteert dit in de volgende uitdrukking:

$$\langle n_k \rangle = \frac{-B}{A} = \frac{-2W^+ + 4JW^{+(1)}(\cos k - 1)}{2(W^+ - W^-) - 4J(W^{+(1)} + W^{-(1)})(\cos k - 1)}. \quad (118)$$

Bespreking van de stationaire oplossing $\langle n_k \rangle$

Wederom zitten we met een $U(1)$ -symmetrie, wat inhoudt dat het systeem invariant blijft onder globale fase-rotaties [13]. Hoewel deze symmetrie waarborgt dat $\langle n_i \rangle$ invariant blijft,

biedt ze op zichzelf geen methode om deze waarde expliciet te bepalen. Daarom passen we, analoog aan het één-site geval, een Taylor-expansie toe op de energiedistributie $n(E)$ om een fysisch interpreteerbare uitdrukking voor $\langle n_k \rangle$ te verkrijgen [16].

Deze benadering levert:

$$\langle n_k \rangle = \frac{T}{2J(1 - \cos k) - \mu}. \quad (119)$$

Door over te gaan van momentumruimte naar reële ruimte via $k = 0$, bekomen we:

$$\langle n_i \rangle = \frac{-T}{\mu}, \quad (120)$$

wat exact overeenkomt met het eerder afgeleide resultaat in de limiet van afwezige tunneling en interactie (zie vergelijkingen (105)–(108)).

Hieruit concluderen we dat de gemiddelde bezetting $\langle n_i \rangle$ in deze limiet onafhankelijk is van de tunnelingsterkte J . Fysisch betekent dit dat de tunnelingterm wel bijdraagt aan de delokalisatie van deeltjes, maar geen invloed uitoefent op de lokale energieniveaus van de sites. Met andere woorden, tunneling beïnvloedt de spreiding van toestanden in momentumruimte, maar laat de intrinsieke energie-offset per site onveranderd.

4 Numerieke simulatie in Gutzwiller-benadering

Wanneer zowel tunneling als interactie in rekening worden gebracht, is het in het algemeen niet mogelijk om een analytische of numerieke oplossing te vinden voor de tijdsevolutie van het systeem [19, 43]. De kwantumtoestand van het systeem wordt beschreven in een Hilbertruimte die bestaat uit alle mogelijke verdelingen van deeltjes over de sites. Naarmate het aantal sites L en het maximale aantal bosonen per site N toeneemt, groeit het aantal mogelijke configuraties exponentieel als $(N + 1)^L$ [20]. Elke unieke verdeling van bosonen vertegenwoordigt een basisvector in de Hilbertruimte, en deze configuraties vormen de vrijheidsgraden van het systeem. Door de combinatie van tunneling en interactie ontstaat een sterke koppeling tussen al deze toestanden. Hierdoor resulteert de tijdsevolutie in een systeem van differentiaalvergelijkingen met een exponentieel grote dimensie, wat een exacte analytische én exacte numerieke oplossing in de praktijk onmogelijk maakt [21].

Om toch de dynamica van het systeem te kunnen bestuderen, maken we gebruik van een verdere benadering: we simuleren niet de exacte tijdsevolutie, maar stellen een benadering voor de mastervergelijking, gegeven door vergelijking (64), voor, die de dynamica van de dichtheidsmatrix onder invloed van dissipatie beschrijft [5, 22]. Hierbij gebruiken we specifiek de *Gutzwiller-benadering*.

4.1 Stationaire oplossing en de rol van dissipatie

Bij het bestuderen van open kwantumsystemen zijn we geïnteresseerd in het langetermijngedrag van het systeem. De verwachtingswaarde van een fysische grootheid A wordt gegeven door $\langle A \rangle(t) = \text{Tr}(A\rho(t))$, waarbij $\rho(t)$ de tijdsafhankelijke dichtheidsmatrix is. In

dissipatieve systemen verandert $\rho(t)$ continu door de interactie met de omgeving, en dus is $\langle A \rangle(t)$ in het algemeen tijdsafhankelijk.

De tijdsevolutie van $\rho(t)$ wordt beschreven door een mastervergelijking van de vorm:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[H_S, \rho] + \mathcal{L}(\rho), \quad (121)$$

waarbij H_S de Hamiltoniaan van het systeem is, en $\mathcal{L}(\rho)$ de dissipatieve bijdrage voorstelt, gemodelleerd door een Liouvillian superoperator. Voor een brede klasse van systemen zorgt deze dissipatie ervoor dat het systeem bij $t \rightarrow \infty$ evolueert naar een unieke stationaire toestand ρ_{stat} , gedefinieerd als de oplossing van:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad -i[H_S, \rho_{\text{stat}}] + \mathcal{L}(\rho_{\text{stat}}) = 0. \quad (122)$$

De snelheid waarmee dit stationaire evenwicht bereikt wordt, wordt bepaald door de spectrale kloof van de Liouvillian, ook wel de *Liouvillian gap* genoemd [25].

Dus voor voldoende grote tijd vervaagt het effect van eventuele initiële toestanden, en bepaalt enkel ρ_{stat} nog het gedrag van het systeem. De verwachtingswaarde van een operator A convergeert dan naar:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle A \rangle(t) = \text{Tr}(A \rho_{\text{stat}}). \quad (123)$$

In deze thesis zijn we precies in deze stationaire limiet geïnteresseerd. Daarom lossen we de mastervergelijking numeriek op tot de oplossing effectief tijdsafhankelijk geworden is, en gebruiken we $\text{Tr}(A \rho(t))$ als benadering van $\text{Tr}(A \rho_{\text{stat}})$.

Op die manier kunnen we fysische observabelen op consistente wijze evalueren in de stationaire toestand. Deze grootheden zullen in het volgende hoofdstuk cruciaal blijken voor het identificeren van faseovergangen in het dissipatieve systeem.

4.2 Numerieke bepaling van de dichtheidsmatrix

In sectie 2 hebben we besproken hoe de verwachtingswaarden van fysische observabelen kunnen worden berekend zodra de dichtheidsmatrix $\rho(t)$ van het systeem bekend is. Om dit aan te pakken bespreken we in deze subsectie hoe we de complexiteit van het probleem reduceren door gebruik te maken van de Gutzwiller-benadering.

We stellen dat de dichtheidsmatrix $\rho(t)$ kan worden gefactoriseerd als het tensorproduct van de lokale dichtheidsmatrices $\rho_i(t)$, oftewel:

$$\rho(t) = \bigotimes_i \rho_i(t), \quad (124)$$

waarbij $\rho_i(t)$ de dichtheidsmatrix is die de toestand van de i -de site van het systeem beschrijft. Deze factorisatie is een aanname die het mogelijk maakt om de dynamica van het systeem op elke site afzonderlijk te behandelen. Dankzij deze benadering kunnen we

de rekencomplexiteit aanzienlijk verlagen, aangezien we de dichtheidsmatrix voor iedere site onafhankelijk kunnen simuleren.

Verder, aangezien we werken met een translatie-invariant systeem, waarbij alle sites fysiek identiek zijn, geldt dat de verwachtingswaarde van een operator op verschillende sites gelijk is. Specifiek, de verwachting van de annihilatie-operator a_j op site j zal gelijk zijn aan de verwachting van a_i op site i . Dit kan worden uitgedrukt als:

$$\langle a_j \rangle = \langle a_i \rangle \quad \text{voor alle } i, j. \quad (125)$$

Deze eigenschap maakt het mogelijk om de koppelingen tussen verschillende sites te vereenvoudigen door de operatoren op verschillende sites te vervangen door hun verwachtingswaarde. Dit vermindert de complexiteit van de berekeningen, aangezien we niet langer de operatoren voor elke site afzonderlijk hoeven te behandelen.

De dynamica van de dichtheidsmatrix $\rho_i(t)$ wordt beschreven door de mastervergelijking voor de i -de site:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -i(H_S \rho_i - \rho_i H_S) + \sum_j \left(u_i^- \rho_i a_j^\dagger - a_j^\dagger u_i^- \rho_i \right) + \sum_j \left(u_i^+ \rho_i a_j - a_j u_i^+ \rho_i \right) + h.c. \quad (126)$$

Hierin zijn H_S de systeemhamiltoniaan en $u_i^\pm$ de dissipatieve interacties tussen verschillende sites. De summaties over j vertegenwoordigen de koppelingen tussen sites, maar dankzij de translatie-invariantie kunnen deze worden vereenvoudigd door de verwachtingswaarde van de operatoren in plaats van de operatoren zelf te gebruiken.

Ook de dissipatieve termen $u_i^\pm$ die de interacties tussen sites beschrijven worden equivalent behandeld en zijn onder Gutzwiller gegeven door:

$$u_1^- = W^{-(0)} a_1 + W^{-(1)} \left(-J a_1 - U a_1^\dagger a_1 a_1 \right),$$

$$u_1^+ = W^{+(0)} a_1^\dagger - W^{+(1)} \left(-J a_1^\dagger - U a_1^\dagger a_1^\dagger a_1 \right),$$

$$u_2^- = W^{-(0)} \text{Tr}(a_1 \rho) + W^{-(1)} (J a_1),$$

$$u_2^+ = W^{+(0)} \text{Tr}(a_1^\dagger \rho) - W^{+(1)} (J a_1^\dagger).$$

Dus door de Gutzwiller-benadering te gebruiken, vervangen we intersite-operatoren door hun verwachtingswaarden, wat de numerieke berekeningen aanzienlijk vereenvoudigt. De tijdsevolutie van de lokale dichtheidsmatrix $\rho_i(t)$ wordt vervolgens numeriek opgelost via de Runge-Kutta methode (RK4).

4.3 Introduceren symmetriebreking

Een volgend belangrijk punt dat we moeten duiden alvorens we naar de tijdsevolutie van enkele operatoren gaan kijken, is het feit dat wanneer de initiële toestand van een systeem een coherente toestand is, dit leidt tot spontane symmetriebreking. Dit heeft als gevolg dat de verwachte waarde van de veldoperator a (bijvoorbeeld $\text{Tr}(\rho(0)a)$) niet meer nul is, zoals in het analytische geval. Dit effect kan worden begrepen door naar de eigenschappen van coherente toestanden te kijken en de rol van symmetrieën in het systeem te onderzoeken.

Zoals reeds vermeld is de Hamiltoniaan van ons systeem $U(1)$ -symmetrisch, wat betekent dat het systeem geen voorkeur heeft voor een specifieke fase van de veldoperatoren a_i en $a_i^\dagger$. Deze symmetrie zorgt ervoor dat het totale deeltjesaantal $N = \sum_i a_i^\dagger a_i$ behouden blijft. In een evenwichtstoestand, zoals een thermisch evenwicht, is de verwachtingswaarde van de annihilatie-operator a nul, omdat de symmetrie vereist dat de verwachtingswaarde van a in alle richtingen in het complexe vlak gemiddeld nul is. Met andere woorden, de fase van de operator is ongedefinieerd in evenwichtstoestanden die onder de $U(1)$ -symmetrie invariant zijn [28].

Wanneer we echter een coherente toestand als initiële toestand kiezen, breekt de $U(1)$ -symmetrie spontaan. Een coherente toestand is immers een speciale kwantumtoestand die het dichtst bij een klassieke toestand staat en die wordt gedefinieerd als een eigentoestand van de annihilatie-operator a , met $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ [12]. Deze toestand heeft een welbepaalde amplitude én fase, die wordt bepaald door de complexe parameter α . In tegenstelling tot Fock-toestanden, die een exact aantal deeltjes bevatten maar een willekeurige fase hebben, is de coherente toestand een superpositie van Fock-toestanden met verschillende aantallen deeltjes. Dit betekent dat het aantal deeltjes in een coherente toestand niet exact bepaald is en een spreiding vertoont, maar de fase van de toestand wel goed gedefinieerd is.

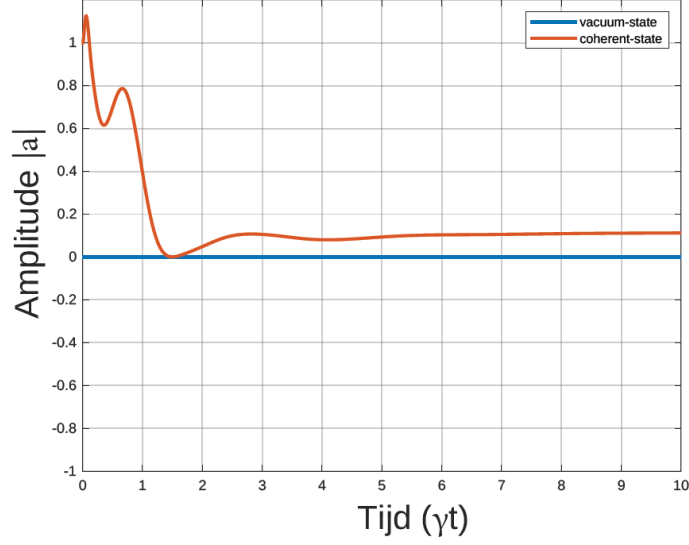
Omdat de coherente toestand een eigenvector is van de annihilatie-operator a , geldt voor de verwachtingswaarde van a in deze toestand dat:

$$\text{Tr}(\rho(0)a) = \langle\alpha|a|\alpha\rangle = \alpha. \quad (127)$$

Aangezien $\alpha \neq 0$, is de verwachtingswaarde van de operator a niet nul. Dit betekent dat de initiële toestand met de coherente fase de $U(1)$ -symmetrie spontaan breekt, wat resulteert in een niet-nul waarde voor $\text{Tr}(\rho(0)a)$ [13].

Na de initiële symmetriebreking kan de tijdsevolutie van de verwachtingswaarde van $a(t)$ verder worden onderzocht. Deze observatie is van cruciaal belang voor het begrijpen van de dynamica van het systeem en de ontwikkeling van de fase door de tijd heen.

Na de implementatie van de coherente toestand in plaats van de vacuümtoestand, blijkt inderdaad dat de amplitude a niet nul blijft in haar tijdsevolutie, zoals geschetst in Figuur 1. Dit biedt reeds enige vertrouwen in de correctheid van onze numerieke simulatie omdat het bevestigt dat de symmetriebreking correct is geïmplementeerd.



Figuur 1: Invloed van een coherente state op de tijdsevolutie van de amplitude a , voor parameters $\alpha = \gamma = 1$, $U = J = 1$, $T = 10$ en $\mu = 0.5$.

4.4 Controle numerieke code

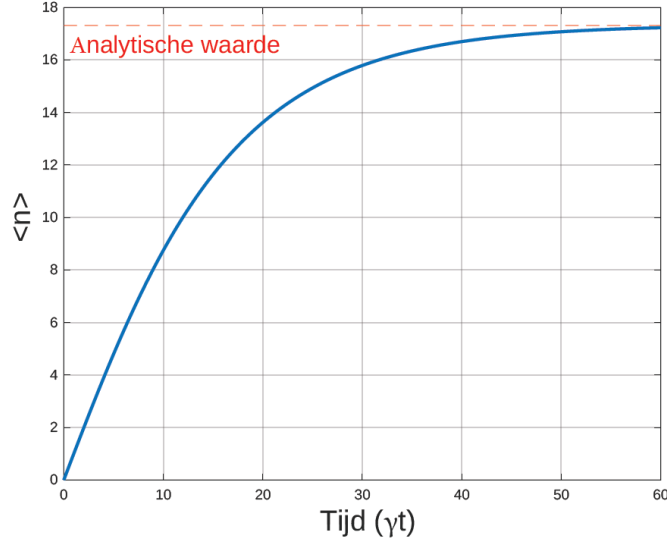
Het is van cruciaal belang om de numerieke code ook grondig te controleren in de limietgevallen, door de numerieke resultaten te vergelijken met de analytische limietgevallen, bepaald in sectie 3. Dit biedt de nodige garanties voor de juistheid en stabiliteit van de simulaties, en stelt ons in staat om eventuele fouten in de implementatie vroegtijdig op te sporen.

4.4.1 Limietgeval: $J \rightarrow 0$

In de limiet $J \rightarrow 0$ verdwijnen tunneling-effecten en reduceert het systeem tot een verzameling niet-gekoppelde sites. De kinetische energie valt weg, waardoor de dynamica volledig bepaald wordt door lokale interacties binnen elke site. In deze situatie is de Gutzwiller-benadering niet langer nodig, aangezien er geen intersite-correlaties zijn en de dichtheidsmatrix ρ enkel lokale informatie bevat.

Wanneer we de numerieke resultaten van de Gutzwiller-code voor $J = 0$ vergelijken met de exacte numerieke oplossing voor een systeem met één site, constateren we dat beide benaderingen exact dezelfde resultaten opleveren voor de dichtheidsmatrix ρ en relevante operatoren $A = a, n$.

Daarnaast matchen onze analytische resultaten uit hoofdstuk 3 ook met onze numerieke Gutzwiller resultaten, weergegeven in Figuur 2. Daar de rode stippellijn de analytische waarde voorstelt, en de blauwe lijn de tijdsevolutie van $\langle n \rangle$.



Figuur 2: Vergelijking van de analytische steady-state benadering met de numerieke tijdsevolutie van f , met parameters: $U = 0.5$, $J = 0$, $T = 10$, $\alpha = \gamma = 1$ en $\mu = 0.5$.

Merk tot slot op dat de factor f , uit ons analytisch resultaat, wordt bepaald door de verhouding $\frac{\langle n^2 \rangle}{\langle n \rangle^2}$. Deze factor kan niet analytisch verder worden uitgerekend, maar we kunnen deze wel numeriek bepalen uit de tijdsevolutie van $\langle n \rangle$ en $\langle n^2 \rangle$, berekend door onze Gutzwiller-code.

De numeriek berekende waarde van f kan vervolgens worden ingevuld in de analytische oplossing die we eerder afgeleid hebben (in vergelijking 95). Dit biedt de mogelijkheid om de numerieke resultaten te vergelijken met de analytische voorspellingen. Als de numerieke oplossing voor $\langle n \rangle$ overeenkomt met de analytische oplossing, nadat we de numeriek berekende f hierin hebben gesubstitueert, versterkt dit ons vertrouwen in de juistheid van de code.

Deze aanpak van het numeriek bepalen van f en het vergelijken van de resultaten met de analytische oplossing fungeert als een belangrijke validatiestap. Het biedt de nodige garanties dat de numerieke simulaties correct uitgevoerd zijn en dat de Gutzwiller-code de juiste dynamica van het systeem simuleert.

4.4.2 Limietgeval: $U \rightarrow 0$

In sectie 3.2 werd formule (119) afgeleid, waarin de grootheid $\langle n_k \rangle$ wordt uitgedrukt als functie van de golfvector k . Bij terugtransformatie naar de reële ruimte (r -ruimte) blijkt dat in een homogeen systeem voornamelijk de $k = 0$ -component bijdraagt. Dit maakt $\langle n_{k=0} \rangle$ de fysisch relevante grootheid bij analyse in r -ruimte. De onderliggende reden hiervoor wordt duidelijk via de discrete Fourier-transformatie, die de relatie tussen beide representaties vastlegt:

$$\tilde{n}_k = \sum_i n_i e^{-ikx_i}, \quad n_i = \frac{1}{N} \sum_k \tilde{n}_k e^{ikx_i}. \quad (128)$$

Specifiek geldt voor $k = 0$:

$$\tilde{n}_0 = \sum_i n_i, \quad (129)$$

waaruit volgt dat $\tilde{n}_0$ de totale deeltjesaantallen over alle sites omvat. De corresponderende waarde in r -ruimte, $n_i = \frac{1}{N}\tilde{n}_0$, geeft dan de gemiddelde deeltjesdichtheid in het systeem. Deze eigenschap is algemeen bekend uit de literatuur over Fouriertransformaties in fysische context [30].

In een homogeen systeem, waarbij de bezetting over alle posities gelijk is, draagt enkel de $k = 0$ -component substantieel bij. De hogere k -componenten beschrijven fluctuaties rond het gemiddelde, maar hun bijdrage verdwijnt gemiddeld in de thermodynamische limiet ($N \rightarrow \infty$), vanwege de oscillatoire aard van de factoren e^{-ikx_i} . Dit maakt het gerechtvaardigd om in de analyse van een homogeen systeem de terugtransformatie uit te voeren met $k = 0$.

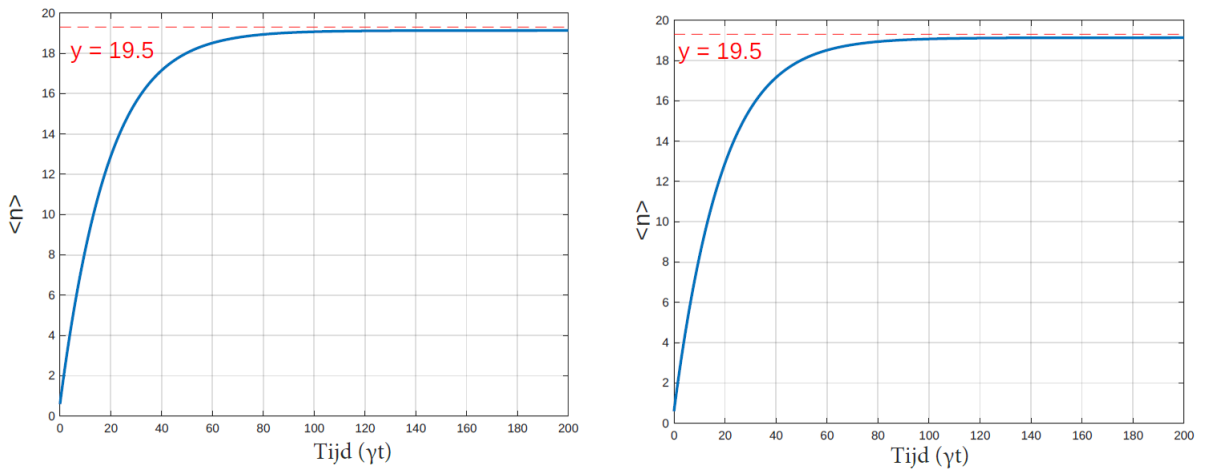
De homogeniteit zelf volgt rechtstreeks uit de vorm van de Bose-Hubbard-Hamiltoniaan in afwezigheid van externe potentialen. Elke site wordt identiek behandeld, en de Hamiltoniaan is invariant onder translatie, wat impliceert dat er geen voorkeurslocatie is binnen het rooster [31].

Daarom geldt dat in een dergelijk homogeen en interactievrij systeem de $k = 0$ -component fysisch dominant is, en kan men bij de terugtransformatie naar r -ruimte zonder verlies aan algemeenheid $k = 0$ stellen.

Verder werd in vergelijking (120) analytisch aangetoond dat:

$$\langle n_i \rangle_{(U=0, J \neq 0)} = \langle n_i \rangle_{(U=0, J=0)}, \quad (130)$$

waaruit volgt dat de tunnelingsterkte J geen invloed heeft op de gemiddelde bezetting $\langle n_i \rangle$ wanneer de interactieterm afwezig is. Dit resultaat wordt bevestigd door numerieke simulatie, weergegeven in Figuur 3. De analytische oplossing (rode lijn) stemt daar perfect overeen met de numeriek berekende tijdsevolutie (blauwe lijn).



Figuur 3: Vergelijking van de analytische benadering met de numerieke bepaling van $\langle n \rangle$ met linker parameters: $\gamma = \alpha = 1$, $U = 0$, $J = 2$, $T = 10$ en $\mu = 0.5$ en rechter parameters: $\gamma = \alpha = 1$, $U = 0$, $J = 0$, $T = 10$ en $\mu = 0.5$.

5 Fenomenologie doorheen faseovergangen

Het doel van dit werk is te onderzoeken of en hoe faseovergangen optreden in ons dissipatieve open systeem. We richten ons daarbij specifiek op de overgang van een coherente naar een incoherente toestand en evalueren of zich een overgang van een superfluïde naar een Mott-isolator voordoet.

Een eerste stap in dit onderzoek is het kiezen van geschikte fysische grootheden die gevoelig zijn voor zulke overgangen. In deze sectie lichten we toe welke operatoren we gebruiken en waarom ze relevante informatie geven over de toestand van het systeem.

5.1 Dynamica van de amplitude $|a(t)|$ t.b.v. faseovergang

In deze subsectie bestuderen we de tijdsevolutie van de annihilatie-operator $a(t)$. Deze analyse, geïnspireerd door [32] en [33], heeft tot doel de dynamische gedragskenmerken van het systeem te karakteriseren in het licht van een mogelijke faseovergang.

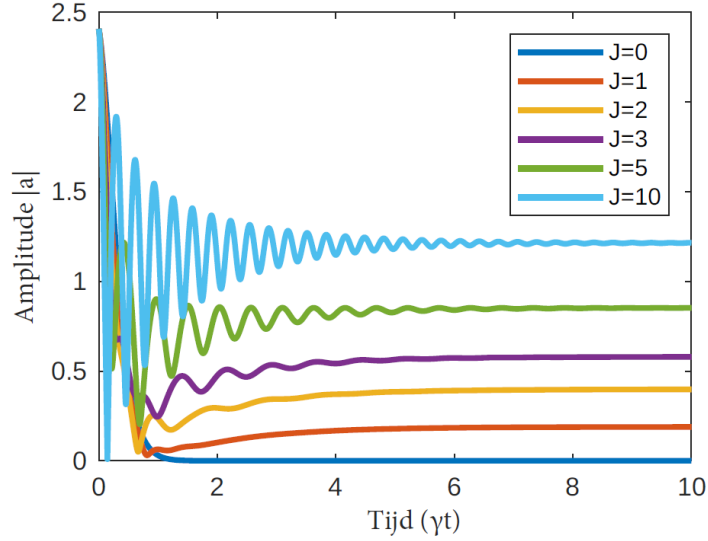
In de coherente fase gedragen de bosonen zich als een toestand met een eventueel collectief geheel en goed gedefinieerde globale fase. Dit komt tot uiting in een oscillerend verloop van $a(t)$, waarbij de amplitude van de sinusvormige tijdsevolutie de onderliggende fasecoherentie weerspiegelt. Naarmate de interactiesterkte toeneemt, zal deze fasecoherentie dalen door lokalisatie en gaat het systeem over naar een incoherente toestand, waarbij de eventuele collectieve toestand gebroken is. De verwachtingswaarde $a(t)$ vervaagt dan en kan abrupt tot nul dalen, wat het verlies van globale fasecoherentie signaleert. Dit komt overeen met een overgang van een superfluïde naar Mott-isolator.

Concreet kunnen we stellen dat in de coherente fase de bosonen een toestand aannemen met een bepaalde fase. Dit komt tot uiting in de tijdsafhankelijke verwachtingswaarde van de annihilatie-operator $a(t)$, die sinusvormig oscilleert. De frequentie van deze oscillatie reflecteert de energie van het systeem, terwijl de amplitude een maat is voor de mate van coherentie.

Bij toenemende interactie-energie U wordt het voor bosonen energetisch ongunstig om grote fluctuaties in het aantal deeltjes per site te vertonen. Dit resulteert in een afname van $|\langle a(t) \rangle|$ bij grotere U . In de limiet van sterke interacties U zullen de fluctuaties in het aantal bosonen per site zelfs volledig verdwijnen, wat leidt tot een meer gelokaliseerde toestand.

Een analoog effect doet zich voor bij dissipatie. Door de koppeling aan een externe omgeving gaat fase-informatie verloren, hetgeen leidt tot decoherentie. Dit manifesteert zich als een dempende sinusvormige evolutie van $a(t)$, waarbij de amplitude uitdooft en de coherentie verdwijnt.

Daarmee fungeert $|\langle a(t) \rangle|$ als een directe indicator voor de coherentiegraad in het systeem. Grote amplitudes duiden op een hoog coherente fase, terwijl een vervallen of verwaarloosbare waarde wijst op het ontbreken van globale fasecoherentie. Zowel tunneling, interactie en dissipatie beïnvloeden deze grootheid, en laten zich aldus aflezen in de temporele evolutie van $\langle a(t) \rangle$.



Figuur 4: Tijdsevolutie van de amplitude voor vaste $U = 2$, en verschillende J -waarden bij $T = 10$, $n = 1$, en $\gamma = \alpha = 1$.

Figuur 4 illustreert duidelijk de dynamische regimes van het systeem en de temporele evolutie van de amplitude $|\langle a(t) \rangle|$ voor uiteenlopende waarden van J bij vaste U .

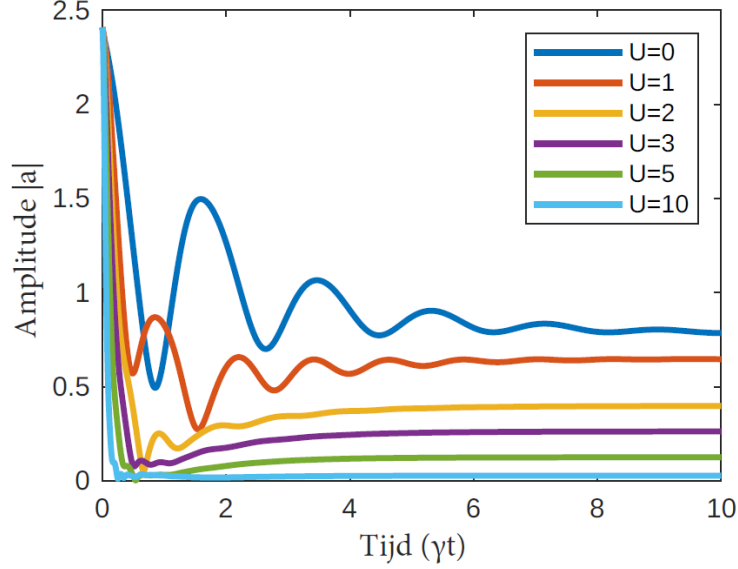
Voor $J = 0$ bevinden we ons in een sterk incoherente toestand. In dit regime is tunneling tussen sites uitgesloten, waardoor de fasecoherentie volledig verdwijnt. Dit blijkt uit het onmiddellijke verval van $|\langle a \rangle|$ naar nul, waarna de waarde constant nul blijft in de tijd.

Bij geringe maar niet-verwaarloosbare J wordt een vrij incoherente toestand bereikt: de amplitude daalt nog steeds, maar niet exact naar nul. Dit wijst op restcoherentie die echter onderdrukt wordt door de dominante interactie-energie U .

Voor $J \approx U$ bevinden we ons in een overgangsregime, gekenmerkt door kortstondige oscillaties van $|\langle a \rangle|$ die vervolgens uitdoven. Dit suggereert beginnende delokalisatie van de deeltjes en de opkomst van collectief gedrag, zij het met een dempende invloed van de interacties en de dissipatie.

Wanneer $J > U$, vertonen de oscillaties van $|\langle a \rangle|$ een verhoogde persistentie, wat duidt op een duidelijk coherente toestand. De damping blijft echter aanwezig vanwege de niet-verwaarloosbare waarde van U en de dissipatie.

In Figuur 5 wordt de rol van U verder onderzocht bij constante hoppingsterkte $J = 2$. De observaties bevestigen het fysische beeld dat ook uit Figuur 4 naar voren kwam. I.e. in het regime $U \ll J$ wordt de amplitude gekarakteriseerd door sinusvormige oscillaties met uitdovende amplitude. Naarmate U toeneemt, dempen deze oscillaties sneller, als gevolg van sterker wordende interacties en dissipatie. In de limiet $U \gg J$ vervalst de amplitude nagenoeg tot nul. Beide figuren illustreren hiermee op overtuigende wijze het optreden van een coherentieverlies.



Figuur 5: Tijdsevolutie van de amplitude $a(t)$, voor vaste $J = 2$ en verschillende U -waarden bij $T = 10$, $n = 1$, en $\gamma = \alpha = 1$.

Merk wel op dat een échte overgang van een superfluïde naar een Mott-isolator gepaard gaat met het volledig onderdrukken van bezettingsfluctuaties, wat leidt tot lokalisatie van deeltjes op individuele sites. Deze lokalisatie is geen klassiek effect, maar een intrinsiek kwantummechanisch fenomeen dat voortvloeit uit het principe van getalskwantisatie. Enkel in dit regime spreekt men correct van een Mott-isolator. Indien deze volledige lokalisatie uitblijft en slechts sprake is van verlies aan globale fasecoherentie, bijvoorbeeld door dissipatie of interactie-effecten, dan gaat het om een overgang van een coherente naar een incoherente toestand, zonder de kenmerken van een Mott-fase.

5.2 Dynamica van de numberfluctuations t.b.v. faseovergang

Een aanvullende methode om vast te stellen of een systeem een faseovergang ondergaat kan zijn door te kijken naar de numberfluctuations of equivalent de fluctuaties in de fase van de golffunctie. Deze twee grootheden zijn met elkaar verbonden via de onzekerheidsrelatie:

$$\Delta n_i \cdot \Delta \theta_i \gtrsim 1 \quad (131)$$

wat betekent dat als numberfluctuations klein zijn, de fluctuaties in de fase groot moeten zijn en omgekeerd [34]. In dit werk kiezen we om te werken met de numberfluctuations.

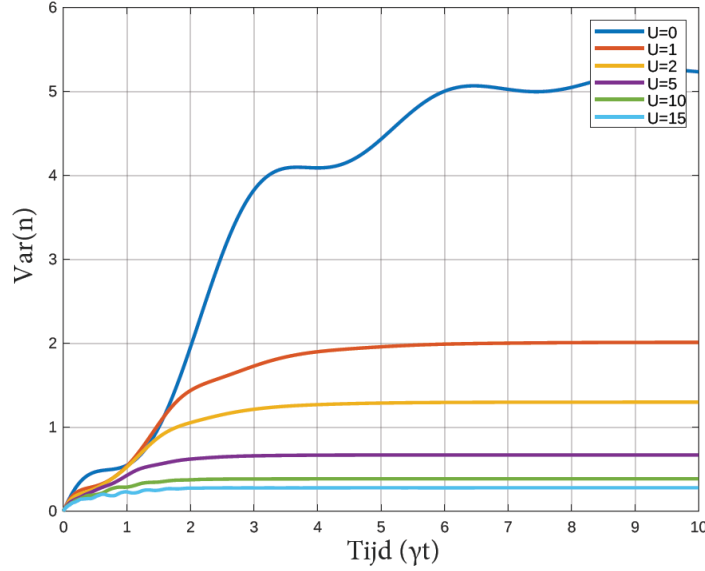
De numberfluctuations geven aan hoe sterk het aantal deeltjes per roosterplaats varieert en worden wiskundig beschreven door:

$$\langle (\Delta n_i)^2 \rangle = \langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 \quad (132)$$

Zoals reeds gezegd, indien de bosonen gelokaliseerd zijn door bijvoorbeeld dominante interacties $U \gg J$, worden fluctuaties in de bezetting sterk onderdrukt:

$$\langle (\Delta n_i)^2 \rangle = 0. \quad (133)$$

Anderzijds, waar tunneling domineert $J \gg U$, kunnen de bosonen vrij tunnelen tussen roosterplaatsen, waardoor de numberfluctuations groot zijn[32].



Figuur 6: Tijdsevolutie van de numberfluctuations voor vaste $J = 2$, en verschillende U waarden bij $T = 10$, $n = 5$ en $\gamma = \alpha = 1$.

In Figuur 6 zien we de tijdsevolutie van de numberfluctuations, weergegeven als $\text{Var}(n)$, voor verschillende waarden van de interactieparameter U , waarbij de hoppingsparameter $J = 2$ constant blijft. De waarnemingen tonen een duidelijk verband tussen de grootte van de numberfluctuations en de waarde van U , wat logisch is gezien de fysica van het systeem.

Bij $U = 0$ zijn de fluctuaties van n groot, omdat er geen interactie tussen de deeltjes is. De deeltjes kunnen zich zonder enige interactie over de sites hoppen, wat resulteert in grote fluctuaties in het aantal deeltjes op elke site.

Wanneer de interactieparameter U toeneemt, zien we dat de fluctuaties in n beginnen af te nemen. Een grotere waarde van U betekent dat het steeds moeilijker wordt voor de deeltjes om van de ene site naar de andere te hoppen, aangezien dit extra energie vereist. Wanneer de deeltjes niet meer vrij kunnen hoppen, nemen de fluctuaties af.

Bij $U = 10$ en $U = 15$ zien we dat de fluctuaties vrijwel volledig gedempt zijn. Indien de variantie nul is geeft dat een indicatie van een Mott-isolator toestand.

Een meer geschikt criterium voor coherentie is de tweede-orde correlatiefunctie g^2 , die de mate van coherentie van het systeem meet. Deze grootheid geeft de genormaliseerde kans om twee deeltjes gelijktijdig op dezelfde plaats aan te treffen en wordt gedefinieerd als:

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} \rangle}{\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle^2}. \quad (134)$$

Hierbij stelt $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$ het gemiddelde aantal deeltjes op een roosterplaats voor, terwijl de teller $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} \rangle$ de kans representeert om twee deeltjes gelijktijdig op dezelfde plaats aan te treffen. Doordat de teller en de noemer in de breuk op dezelfde manier geschaald zijn, is $g^{(2)}(0)$ onafhankelijk van de absolute grootte van het systeem en het totale aantal deeltjes. Dit maakt het mogelijk om fluctuaties tussen systemen met verschillende parameters op een consistente manier te vergelijken [36] [37].

De waarde van $g^{(2)}(0)$ biedt inzicht in het karakter van de toestand van het systeem:

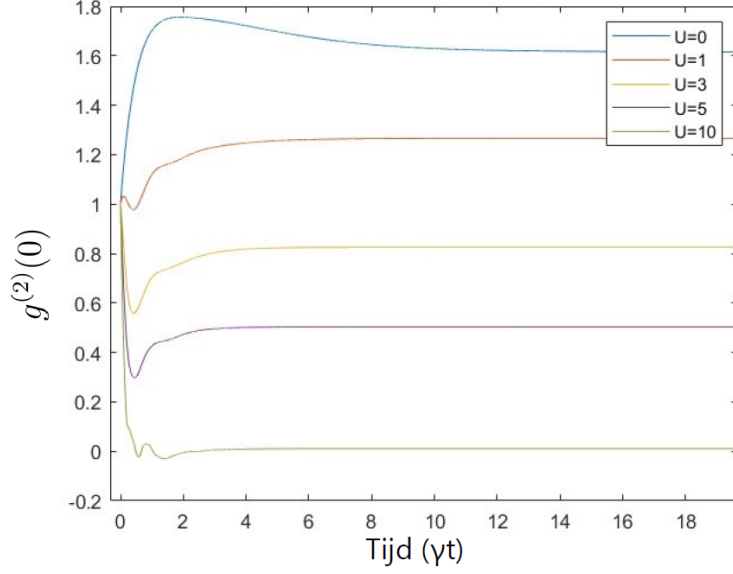
- Wanneer $g^{(2)}(0) = 1$, spreken we van een Poissonverdeling. Dit is typerend voor coherente toestanden, waarin de deeltjes met een goed gedefinieerde globale fase fluctueren [37].
- Indien $g^{(2)}(0) < 1$, treedt *antibunching* op: de kans om twee deeltjes gelijktijdig op dezelfde locatie aan te treffen is lager dan bij een Poissonverdeling. Dit wijst op een situatie waarbij de deeltjes door interacties gelokaliseerd worden en de bezettingsfluctuaties onderdrukt zijn [38].
- Als $g^{(2)}(0) > 1$, spreken we van *bunching*: de kans op dubbele bezetting is dan verhoogd. Dit is een typisch kenmerk van thermische toestanden, waarin de deeltjes geen collectieve fase delen en lokale ophoping van deeltjes frequenter voorkomt [39].

Voor een overgang van een superfluïde naar een Mott-isolator verwachten we dat de tweede-orde correlatiefunctie $g^{(2)}(0)$ daalt van een waarde rond 1 (kenmerkend voor een Poissonverdeling in coherente toestanden) naar een waarde veel kleiner dan 1, wat wijst op *antibunching* en dus sterk onderdrukte bezettingsfluctuaties. Dit gedrag is typisch voor de Mott-fase, waarin deeltjes gelokaliseerd zijn en de numberfluctuations per site verdwijnen.

Wanneer dit verval in $g^{(2)}$ echter uitblijft of slechts zwak optreedt, duidt dit eerder op het verlies van globale fasecoherentie, zonder dat er sprake is van volledige lokalisatie. Met andere woorden: het systeem verliest deels zijn coherente karakter, maar bereikt niet noodzakelijk de Mott-isolatorfase.

Daarom volstaat het meestal niet om enkel $g^{(2)}(0)$ te beschouwen. De interpretatie van deze overgang vereist tevens kennis van de amplitude $|\langle a \rangle|$. Wanneer zowel $g^{(2)} \approx 1 \rightarrow g^{(2)} \ll 1$ én $|\langle a \rangle| > 0 \rightarrow |\langle a \rangle| \approx 0$ worden waargenomen, kan men spreken van een echte superfluïde naar Mott-overgang. Zo niet, dan betreft het een meer algemene overgang van een coherente naar een incoherente toestand of geen faseovergang.

In Figuur 7 hebben we $g^{(2)}(0)$ bepaald voor verschillende waarden van de interactieparameter U , met een constante waarde van $J = 2$.



Figuur 7: Tijdsevolutie van de tweede-orde correlatiefunctie $g^{(2)}(0)$ voor vaste $J = 2$, en verschillende U -waarden, bij $T = 5$, $\gamma = \alpha = 1$ en $\mu = 0.5$.

We observeren hier opnieuw een duidelijke overgang van een coherente naar een incoherente toestand, mogelijk samenhangend met lokalisatie van de deeltjes en een volledige onderdrukking van de bezettingsfluctuaties, karakteristiek voor de overgang van een superfluïde naar een Mott-isolator.

Nu we deze tweede-orde correlatiefunctie $g^{(2)}(0)$ beter begrijpen, kunnen we het gedrag ervan analyseren in specifieke regimes.

Een bijzonder inzichtelijk geval is het regime waarin het systeem zich in een zuivere Fock-toestand $|n\rangle$ bevindt, waarin het aantal deeltjes exact vastligt [26]. In dergelijke toestanden kunnen de relevante kwantumverwachtingswaarden eenvoudig worden berekend.

Voor een Fock-toestand $|n\rangle$ wordt de verwachtingswaarde van de operator in de teller van $g^{(2)}(0)$ gegeven door:

$$\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} | n \rangle = n(n-1), \quad (135)$$

terwijl de verwachtingswaarde in de noemer is:

$$\left(\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle \right)^2 = n^2.$$

Hieruit volgt voor de tweede-orde correlatiefunctie:

$$g^{(2)}(0) = \frac{n(n-1)}{n^2} = 1 - \frac{1}{n}. \quad (137)$$

Dit resultaat toont aan dat $g^{(2)}(0) < 1$ in een Fock-toestand: de kans om twee deeltjes gelijktijdig op dezelfde plek aan te treffen is kleiner dan in een klassiek systeem (bijvoor-

beeld een Poisson-verdeelde toestand). Deze onderdrukking van gezamenlijke aanwezigheid komt voort uit de kwantummechanische aard van de Fock-toestand, waarbij deeltjes strikt in bepaalde toestanden zitten en geen numberfluctuaties vertonen.

Indien het systeem niet in een vaste Fock-toestand verkeert, maar in een coherente superpositie van toestanden met verschillende n , is het aantal deeltjes per site onderhevig aan fluctuaties. Dit maakt het onmogelijk om een eenvoudige analytische uitdrukking zoals hierboven voor $g^{(2)}(0)$ af te leiden. In dit regime is het handiger om numerieke simulaties die het volledige statistische gedrag van de ordeparameter meenemen te opteren [26].

5.3 Temperatuurgedreven overgangen

In de voorgaande secties onderzochten we de theorie van coherentie verlies bij temperaturen ($T < T_c$), waarbij het systeem een toestandsverandering ondergaat als gevolg van een veranderende verhouding J/U . Deze kwantumfaseovergang werd volledig gedreven door de competitie tussen de tunnelingsterkte J en de interactiesterkte U .

In deze subsectie richten we ons echter op een ander mechanisme van deze overgang, namelijk een temperatuurgedreven overgang. Ook bij vaste J/U -verhouding kan het systeem evolueren naarmate de temperatuur stijgt. Thermische fluctuaties kunnen bij voldoende temperatuur de coherentie in de fase van de ordeparameter verbreken, wat leidt tot het verdwijnen van de coherente fase orde. Dit fenomeen wordt ook beschreven door Hgel en Pollet in hun werk over de thermodynamica van het Bose-Hubbard model [40].

Deze overgang manifesteert zich rond een welbepaalde kritische temperatuur, die we in deze sectie analytisch zullen afleiden op basis van een effectief fase-model. Het is precies rond deze temperatuur dat thermische fluctuaties voldoende energie hebben om de coherente fase van de ordeparameter te verstoren, waardoor het systeem overgaat van een coherente toestand naar een incoherente toestand. Dit proces wordt grondig behandeld in de literatuur [41], waarbij men de kritische temperatuur bepaalt in verschillende scenario's.

In het coherente regime is er immers sprake van lange-afstandsorte in de fase van de ordeparameter. Naarmate de temperatuur stijgt, nemen de thermische fluctuaties toe, en zodra deze groot genoeg zijn om de fasecoherentie te breken, verdwijnt de ordeparameter ψ . Dit markeert het moment van de overgang, een gedrag dat ook empirisch is bevestigd in simulaties van het Bose-Hubbard model [41].

Hoewel we in dit werk een open kwantumsysteem beschouwen, waarbij het systeem in contact staat met een omgeving, gebruiken we nog steeds het Bose-Hubbard model om de faseovergang te analyseren. Dit is gerechtvaardigd zolang de dissipatie zwak is ten opzichte van de interne Hamiltoniaanse dynamica, en het systeem dus de kans krijgt om in evenwicht te komen, zoals gedetailleerd wordt besproken in [40].

Voor de afleiding gaan we uit van het coherente regime. Verder geldt er dat de tunnelingseffecten dominant zijn ($J \gg U$), daardoor volstaat het om in de Hamiltoniaan enkel de tunnelings-term te behouden. De operator $\hat{a}_i$, die het veld op site i voorstelt, wordt in dit regime benaderd als een klassiek complex veld:

$$\hat{a}_i \approx \sqrt{n_i} e^{i\theta_i}. \quad (138)$$

Hierin stelt n_i de bezettingsgraad voor op site i , en θ_i de fase van de ordeparameter. We veronderstellen dat de dichtheidsfluctuaties klein zijn, daar de fasefluctuaties klein zijn in een coherente toestand, en beschouwen daartoe $n_i \approx n$ als een constante. De hele dynamica wordt dan gedragen door de fasedynamiek, zoals beschreven in eerdere literatuur [40].

De hopping-term in de Hamiltoniaan wordt dan:

$$H_{\text{hop}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \text{h.c.} \approx -2Jn \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j). \quad (139)$$

Om dit verder te vereenvoudigen, maken we gebruik van een mean-field benadering, waarbij de faseverschillen benaderd worden door koppeling aan een gemiddelde ordeparameter $\psi = \langle e^{i\theta} \rangle$. Daardoor kunnen we schrijven :

$$\cos(\theta_i - \theta_j) \approx \cos(\theta_i - \langle \theta_j \rangle), \quad (140)$$

en dus wordt de Hamiltoniaan:

$$H_{\text{mf}} = -2Jnz \sum_i \psi \cos(\theta_i), \quad (141)$$

waarbij z het coördinatiegetal is (het aantal burens per site).

De statistische som per site wordt dan:

$$Z = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\beta 2Jnz\psi \cos \theta}, \quad (142)$$

en de ordeparameter volgt uit:

$$\psi = \langle \cos \theta \rangle = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos \theta e^{\beta 2Jnz\psi \cos \theta}}{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\beta 2Jnz\psi \cos \theta}}. \quad (143)$$

We zijn specifiek geïnteresseerd in het gedrag **nabij de kritische temperatuur**, waar de ordeparameter net begint te ontstaan. In dit regime benaderen we deze dus als klein. Dit is fysisch gerechtvaardigd omdat de kritische temperatuur net de overgang markeert tussen een fase zonder orde (waar $\psi = 0$) en een fase met orde ($\psi > 0$). De ordeparameter groeit vanuit nul, en is dus per definitie klein nabij het omslagpunt. Deze benadering is verder onderbouwd in de literatuur [40].

Met deze fysische motivatie benaderen we de exponentiële functie tot eerste orde:

$$e^{\beta 2Jnz\psi \cos \theta} \approx 1 + \beta 2Jnz\psi \cos \theta. \quad (144)$$

De teller in de formule voor de ordeparameter ψ wordt dan:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos \theta (1 + \beta 2Jnz\psi \cos \theta) d\theta = \beta 2Jnz\psi \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 \theta d\theta = \beta 2Jnz\psi \pi. \quad (145)$$

De noemer wordt:

$$\int_{-\pi}^{\pi} (1 + \beta 2Jnz\psi \cos \theta) d\theta = 2\pi. \quad (146)$$

We vinden dan:

$$\psi = \frac{\beta 2Jnz\psi\pi}{2\pi} = \beta Jnz\psi. \quad (147)$$

Voor een niet-triviale oplossing ($\psi \neq 0$) geldt:

$$1 = \beta_c Jnz \Rightarrow T_c = \frac{Jnz}{k_B}. \quad (148)$$

In onze simulaties kiezen we $k_B = 1$ en $z = 1$, zodat dit reduceert tot:

$$T_c = Jn. \quad (149)$$

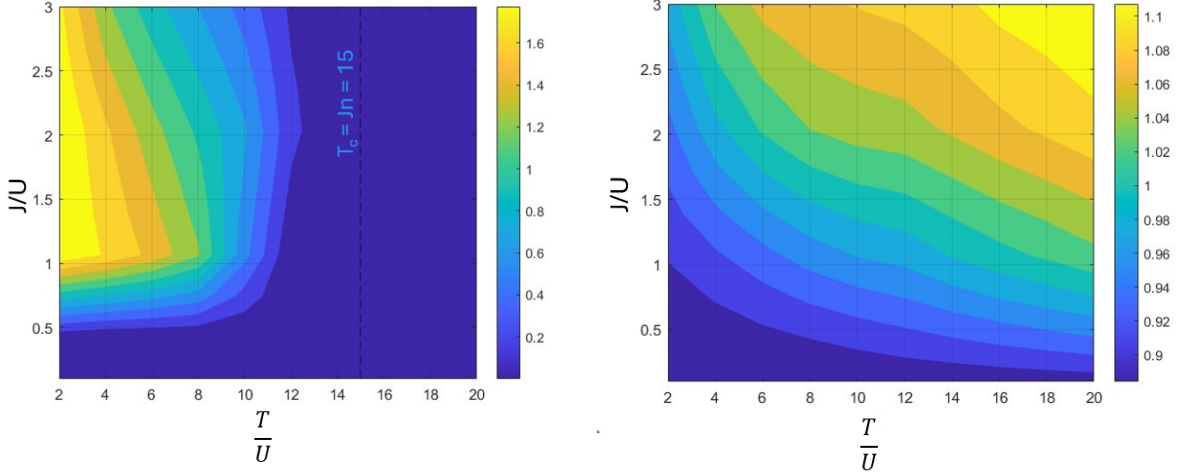
Het belang van deze analytische afleiding reikt verder dan louter theoretisch inzicht. De formule $T_c = Jn$ fungeert tevens ook als een ijkpunt voor de numerieke simulaties die in volgende sectie worden uitgevoerd. Doordat deze uitdrukking voortkomt uit een fysisch gemotiveerde benadering in het regime van kleine fluctuaties rond de coherente fase, kan ze dienen als controlemechanisme om de correctheid van de numeriek bepaalde overgangstemperaturen na te gaan.

6 Resultaten faseovergang

Na het begrijpen van hoe we deze faseovergangen fysisch correct kunnen vaststellen richten we ons onderzoek vooral ook op het detecteren en afbakenen van deze fysische regimes binnen een "fasediagram". In plaats van enkel te vragen of faseovergangen plaatsvinden, willen we begrijpen onder welke omstandigheden deze zich voordoen. Een dergelijk diagram biedt een visuele weergave van de overgang tussen de eventuele superfluïde naar Mott-isolator fase, afhankelijk van belangrijke parameters zoals de interactiesterke U , de hoppingsterkte J en de temperatuur T .

Hieronder bestuderen we de figuren voor de amplitude $|\langle a \rangle|$ en de tweede-orde correlatiefunctie $g^{(2)}(0)$ bij verschillende waarden van de gemiddelde deeltjesdichtheid n_{av} . Dit stelt ons in staat om de invloed van het aantal deeltjes in het systeem in aanmerking te nemen. Door al deze parameters te variëren, krijgen we een volledig beeld van hoe alle vrije parameters van het systeem samen de respons van het systeem bepalen.

Hoewel de figuren strikt genomen geen fasediagrammen zijn in de gebruikelijke zin, waarbij expliciet de grenzen tussen verschillende fasen worden aangegeven, kunnen deze figuren wel dienst doen als een soort fasediagram en ons helpen om een eventuele overgang tussen verschillende fysische regimes inzichtelijk te maken.



Figuur 8: Faseplot van links: $|a|$ en, rechts: $g^{(2)}(r=0)$ a.f.v. T en J/U , met de linker -en rechterparameters: $n = 5$, $J/U = [0, 3]$, $T/U = [2, 20]$ en $\gamma = \alpha = 1$.

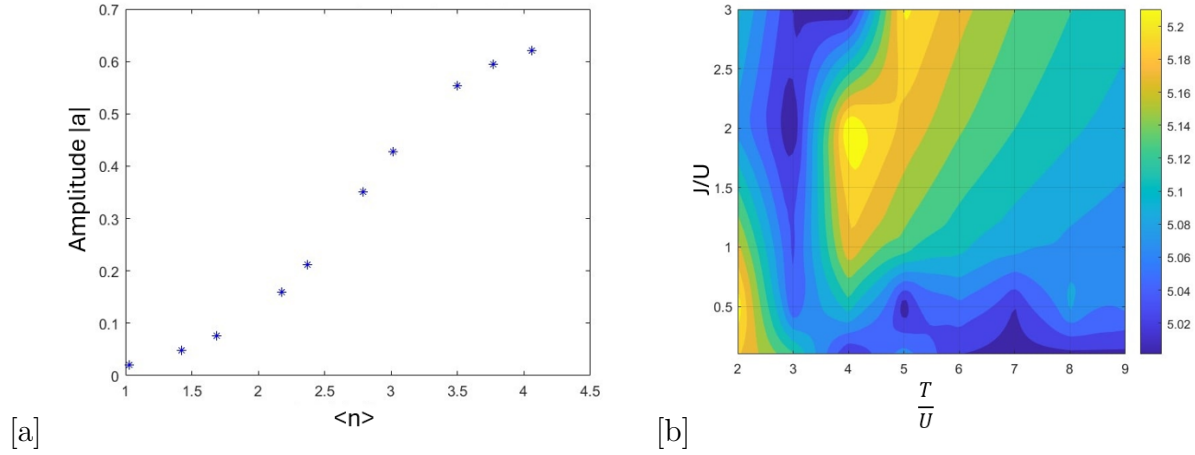
Uit Figuur 8 blijkt dat de amplitude $|\langle a \rangle|$ voornamelijk dominant is in het regime van lagere temperatuur en hoge J/U . Dit is in lijn met de verwachting dat een coherente fase zich manifesteert bij een voldoende sterke hoppingsterkte en lage thermische verstoringen.

Naarmate de temperatuur toeneemt, zien we dat de amplitude afneemt en uiteindelijk verdwijnt, wat wijst op de overgang naar een incoherente fase. Dit effect kan worden toegeschreven aan thermische fluctuaties, die de coherente bosonische fase verstoren en uiteindelijk een incoherente toestand induceren.

In Figuur 8 zien we ook hoe de tweede-orde correlatiefunctie $g^{(2)}(0)$ zich bij lage temperatuur en kleine J/U , redelijk laag is. Verder stijgt deze naarmate J/U toeneemt. Voor hogere temperaturen zien we hetzelfde gedrag maar neemt $g^{(2)}$ licht toe, wat wijst op de groei van thermische fluctuaties.

Deze gegevens suggereren dat we daadwerkelijk een overgang waarnemen van coherente naar incoherente toestand, waarbij de overgang wordt gedreven door de verhouding van de hoppingssterkte J en de interactiesterkte U . Verder wordt bevestigd dat thermische verstoringen een cruciale rol spelen in het destabiliseren van de coherente fase, wat uiteindelijk leidt tot de vorming van een incoherente toestand.

Er dient opgemerkt te worden dat het constant houden van het aantal deeltjes n tevens ook een must is om de overgang tussen verschillende fases of toestanden systematisch te onderzoeken in de figuren van de amplitude. Dit stelt ons in staat om de invloed van de temperatuur en de verhouding J/U op de dynamica op een duidelijke manier te analyseren. Dit zullen we doen door de chemische potentiaal μ van het reservoir zodanig in te stellen dat het deeltjesaantal constant blijft. Dit is bijzonder relevant aangezien verschillende waarden voor n zelfs bij constante waarden van de parameters U , J en T leiden tot verschillende resultaten voor de amplitude $|\langle a \rangle|$. Dit probleem wordt geïllustreerd in Figuur 9 (a).

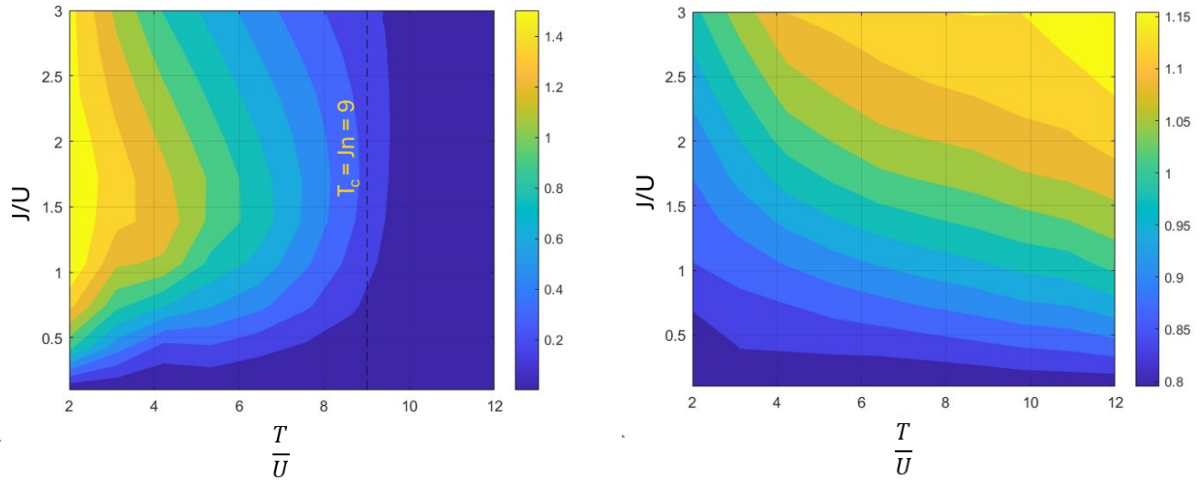


Figuur 9: Staving van het belang van een vast aantal deeltjes n_{av} , met rechts een figuur van de amplitude $|a|$ a.f.v. n met parameters: $J = U = 1$, $T/U = 10$, $\alpha = 0.5$ en $\gamma = \alpha = 1$ en links een figuur van n a.f.v. $J/U = [0, 3]$, $T/U = [2, 9]$ en $\gamma = \alpha = 1$.

Ter ondersteuning wordt in Figuur 9 (b) een figuur van het deeltjesaantal n gepresenteerd, waarmee we het vertrouwen in de voorgaande bevindingen verder kunnen waarborgen.

We zien dus dat het aantal deeltjes een significante impact hebben op de kritische eigenschappen van het systeem, met mogelijke veranderingen in de fase.

Om de invloed van het aantal deeltjes n_{av} systematisch te onderzoeken, construeren we opnieuw dezelfde figuren, ditmaal voor $n_v = 3$ deeltjes. Door deze resultaten te vergelijken met de eerder verkregen diagrammen, kunnen we deze invloed beter begrijpen. De resulterende figuren voor $n = 3$ worden weergegeven in Figuur 10.



Figuur 10: Faseplot van links: $|a|$ en, rechts: $g^{(2)}(r=0)$ a.f.v. T en J/U , met de linker- en rechterparameters: $n = 3$, $J/U = [0, 3]$, $T/U = [2, 12]$ en $\gamma = \alpha = 1$.

Uit de vergelijking van figuren 8, 9 en 10 blijkt dat naarmate het gemiddeld aantal deeltjes in het systeem toeneemt, de overgang van de coherente- naar de incoherente fase minder gevoelig wordt voor thermische fluctuaties. Dit kan worden toegeschreven aan het feit dat een groter aantal deeltjes leidt tot sterkere collectieve effecten. I.e. wanneer de populatie van deeltjes toeneemt, is de kans groter dat meerdere deeltjes zich in dezelfde

toestand bevinden, zelfs wanneer thermische fluctuaties de fasen van individuele deeltjes beïnvloeden. Hierdoor wordt de impact van dergelijke fluctuaties in zekere zin “gefilterd” door de grote aantallen: willekeurige verstoringen van de fase van enkele deeltjes hebben minder invloed op het collectieve gedrag van het systeem als geheel.

Verder zien we dezelfde fysica terugkeren als deze voor $n_{av} = 5$. Dit vergt het vertrouwen in de resultaten.

Wat verder ook vertrouwen schept in onze resultaten van de figuren is dat de faseovergang ongeveer optreedt bij de kritische temperatuur die afgeleid werd in voorgaande sectie.

Tot slot merk op dat in onze resultaten geen faseovergang van een superfluïde naar een Mott-isolatorfase wordt waargenomen, maar enkel een overgang van een coherente naar een incoherente fase. Dit blijkt uit de geringe fluctuaties in $g^{(2)}(0)$, wat duidt op een overgang van een incoherente naar coherente fase in plaats van de overgang van een Mott-isolator naar superfluidum.

7 Kwantisatie van deeltjesaantal

Tot op eerste orde blijkt dat de overgang van een superfluïde- naar een Mott-isolator fase niet optreedt in ons model. Dit wijst erop dat de kwantisatie van het aantal deeltjes per roosterplaats niet gewaarborgd is binnen deze eerste-orde benadering [43]. Aangezien perfecte Mott-isolatoren gekarakteriseerd worden door goed gedefinieerde, geheeltallige bezettingen per site, is het van belang te onderzoeken onder welke omstandigheden deze kwantisatie alsnog kan optreden.

Om dit te onderzoeken, beperken we ons tot de limiet $J = 0$, waarin er geen tunneling is tussen de sites. In deze limiet functioneren de sites onafhankelijk van elkaar, en kunnen we het probleem reduceren tot de dynamica van een enkele site. Aangezien tunneling de kwantisatie verstoort, verwachten we dat eventuele kwantisatie van het deeltjesaantal het duidelijkst waarneembaar is in de limiet $J = 0$.

Hiertoe analyseren we de tijdsevolutie van de bezettingsverdeling ρ_n , die de kans weergeeft dat een site zich in de toestand met n deeltjes bevindt.

7.1 Constructie bewegingsvergelijking ρ_n

Uitgaande van de gekende vorm van de bewegingsvergelijking voor de dichtheidsmatrix ρ , projecteren we deze op de toestand $|n\rangle$ door de vergelijking tussen bra- en kettoestanden te plaatsen.

De bijdrage op nulde orde levert dan:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \rho | n \rangle^{(0)} &= \langle n | \left(-iH_S \rho + i\rho H_S + u_i^- \rho a_i^\dagger - a_i^\dagger u_i^- \rho + u_i^+ \rho a_i - a_i u_i^+ \rho + h.c. \right) | n \rangle^{(0)} = \dots \\ &= \left(-2W^{-(0)}n - 2W^{+(0)}(n+1) \right) \rho_n + 2W^{-(0)}(n+1)\rho_{n+1} + 2W^{+(0)}n\rho_{n-1}. \end{aligned} \quad (150)$$

De eerste orde bijdrage levert dan:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \rho | n \rangle^{(1)} = \dots = & \left(2W^{-(1)}Un(n-1) - 2W^{+(1)}Un(n+1) \right) \rho_n - 2W^{-(1)}Un(n+1)\rho_{n+1} + \dots \\ & 2W^{+(1)}Un(n-1)\rho_{n-1}. \end{aligned} \quad (151)$$

De tweede orde levert vervolgens:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \rho | n \rangle^{(2)} = \dots = & \left(-W^{+(2)}U^2n^2(n+1) - W^{-(2)}U^2n(n-1)^2 \right) \rho_n + W^{+(2)}U^2n^2(n+1)\rho_{n+1} + \dots \\ & W^{-(2)}U^2n(n-1)^2\rho_{n-1}, \dots \end{aligned} \quad (152)$$

en zo kunnen we verder de ordes uitschrijven. Vervolgens herkennen we een patroon in deze bewegingsvergelijking waardoor we de bewegingsvergelijking als machtreeks kunnen schrijven als volgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_n = & \left[\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^k 2W^{-(k)}n(n-1)^k U^k}{k!} - \frac{2W^{+(k)}n^k(n+1)U^k}{k!} \right) \right] \rho_n + \dots \\ & \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{2(-1)^k W^{-(k)}U^k n^k(n+1)}{k!} \right) \rho_{n+1} + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{2W^{+(k)}n(n-1)^k U^k}{k!} \right) \rho_{n-1}. \end{aligned} \quad (153)$$

Hierin herkennen we de formule van een Markov-keten waarbij overgangen enkel plaatsvinden tussen naburige toestanden $n \rightarrow n \pm 1$ [44].

De algemene vorm van zo'n mastervergelijking voor de tijdsevolutie van de kans $\rho_n(t)$ op toestand n luidt:

$$\frac{d\rho_n}{dt} = R_{n+1 \rightarrow n} \rho_{n+1} + R_{n-1 \rightarrow n} \rho_{n-1} - (R_{n \rightarrow n+1} + R_{n \rightarrow n-1}) \rho_n, \quad (154)$$

waarbij $R_{m \rightarrow n}$ de overgangsrates is van toestand m naar toestand n . Deze structuur komt exact overeen met de afgeleide vorm in vergelijking (153), waarin we de overgangen $n \leftrightarrow n \pm 1$ expliciet herkennen.

7.1.1 Stationaire toestand en detailed balance

Zoals afgeleid in vergelijking (153), is de dynamica van ρ_n volledig beschreven door lokale overgangen $n \leftrightarrow n \pm 1$, waarbij de structuur van de vergelijking identiek is aan die van een Markov-keten [44]. De coëfficiënten in de vergelijking representeren de overgangsrates tussen toestanden en worden aangeduid met $R_{m \rightarrow n}$. We interpreteren deze $R_{m \rightarrow n}$ fysisch als de effectieve overgangswaarschijnlijkheden $P_{m \rightarrow n}$, dus:

$$P_{m \rightarrow n} = R_{m \rightarrow n}. \quad (155)$$

In de stationaire toestand geldt $\frac{d\rho_n}{dt} = 0$, wat resulteert in de balansvergelijking:

$$R_{n+1 \rightarrow n} \rho_{n+1}^{(\text{st})} + R_{n-1 \rightarrow n} \rho_{n-1}^{(\text{st})} = (R_{n \rightarrow n+1} + R_{n \rightarrow n-1}) \rho_n^{(\text{st})}. \quad (156)$$

Indien het systeem detailed balance benadert, kunnen we per paar naburige toestanden eisen dat:

$$R_{n \rightarrow n+1} \rho_n^{(\text{st})} = R_{n+1 \rightarrow n} \rho_{n+1}^{(\text{st})}, \quad (157)$$

$$R_{n \rightarrow n-1} \rho_n^{(\text{st})} = R_{n-1 \rightarrow n} \rho_{n-1}^{(\text{st})}. \quad (158)$$

Deze gelijkheden impliceren een recursieve verhouding:

$$\frac{\rho_{n+1}^{(\text{st})}}{\rho_n^{(\text{st})}} = \frac{R_{n \rightarrow n+1}}{R_{n+1 \rightarrow n}}, \quad (159)$$

en dus:

$$\rho_n^{(\text{st})} = \rho_0 \prod_{k=1}^n \frac{R_{k-1 \rightarrow k}}{R_{k \rightarrow k-1}}. \quad (160)$$

We herkennen hierin de overgangsratios $R_{n+1 \rightarrow n}$ en $R_{n-1 \rightarrow n}$ uit vergelijkingen (153) en (154), waarin we de volgende Taylorreeksontwikkeling herkennen:

$$R_{n+1 \rightarrow n} = 2(n+1)W^-(-Un), \quad (161)$$

en

$$R_{n-1 \rightarrow n} = 2nW^+(Un - U). \quad (162)$$

De verhouding in vergelijking (160) kan worden geïnterpreteerd als de waarschijnlijkheden van deeltjes die respectievelijk van toestand $n+1$ naar n gaan, en van toestand $n-1$ naar n , in termen van de parameters van het systeem [5].

Nu, indien voor een bepaald $n = n^*$ geldt dat

$$\frac{R_{n^*-1 \rightarrow n^*}}{R_{n^* \rightarrow n^*-1}} := \frac{p_{n^*}}{p_{n^*-1}} \gg 1 \quad \text{en} \quad \frac{R_{n^*+1 \rightarrow n^*}}{R_{n^* \rightarrow n^*+1}} := \frac{p_{n^*}}{p_{n^*+1}} \gg 1, \quad (163)$$

dan hebben toestanden met $n = n^* - 1$ en $n = n^* + 1$ de neiging om over te gaan naar n^* , terwijl de omgekeerde processen sterk onderdrukt zijn. In dat geval zal ρ_n sterk gepiekt zijn rond $n = n^*$, wat zich uit in een scherp maximum in de bezettingsdistributie. Indien dit geldt voor geheeltallige $n = 1, 2, 3, \dots$, vormt dit een direct signaal van de kwantisatie van het deeltjesaantal: het systeem 'verkiest' dan specifieke, geheeltallige bezettingen [43].

Dit gedrag is een noodzakelijke voorwaarde voor het verschijnen van Mott-isolatoren, waarbij de fluctuaties in deeltjesaantal per site minimaal zijn en ρ_n sterk geconcentreerd

is rond specifieke geheeltallige n . De analyse via de verhoudingen gedefinieerd in vergelijking (163) laat toe om deze kwantisatie waar te nemen en te verklaren, zelfs in aanwezigheid van dissipatie en eindige temperatuur.

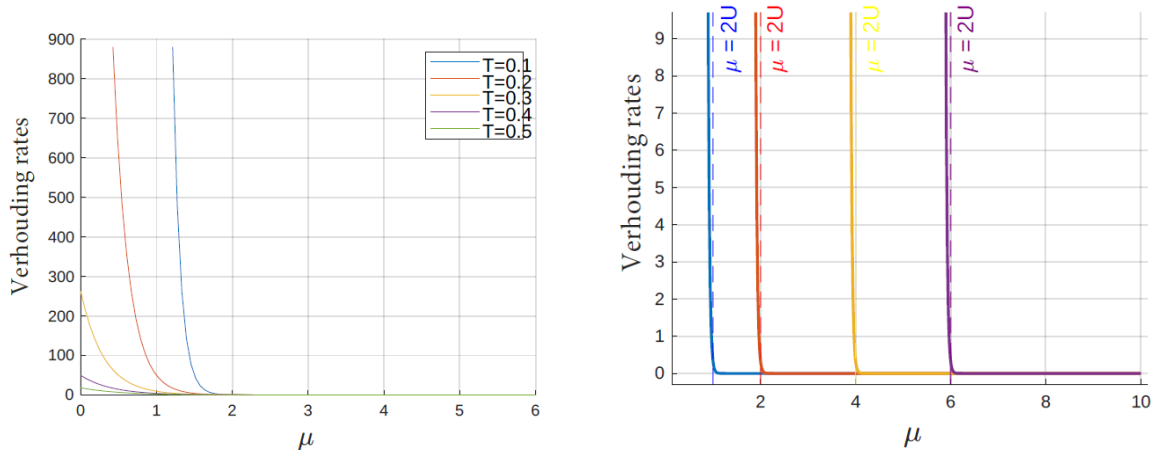
Nu het plan van aanpak is onderbouwd, richten we ons op de analyse van de invloed van temperatuur T , interactiesterkte U en chemische potentiaal μ op het al dan niet optreden van pieken in de dichtheidsverdeling ρ_n . Daarbij nemen we aan, zoals eerder vermeld, dat de deeltjesstroom $J = 0$, zodat er geen bijkomende invloedsfactoren optreden. Wanneer gunstige verhoudingen optreden volgens de voorwaarden van vergelijking (163), rijst de vraag bij welke kleinst mogelijke orde-expansie van de dissipatieve termen $u^\pm$ deze effecten al voldoende nauwkeurig zichtbaar worden.

7.1.2 Resultaten en bespreking

De resultaten tonen aan dat de pieken in de kansverhoudingen een sterke temperatuurafhankelijkheid vertonen: bij hogere temperaturen vervagen deze pieken en worden ze uitgesmeerd door thermische fluctuaties. Hierdoor neemt de lokale ordening af en wordt het onderscheid tussen verschillende bezettingsniveaus minder scherp. Dit benadrukt het belang van het lage-temperatuurgedrag om de onderliggende fysica correct te begrijpen. Verdere analyse zal zich dan ook richten op dit regime van lage temperaturen.

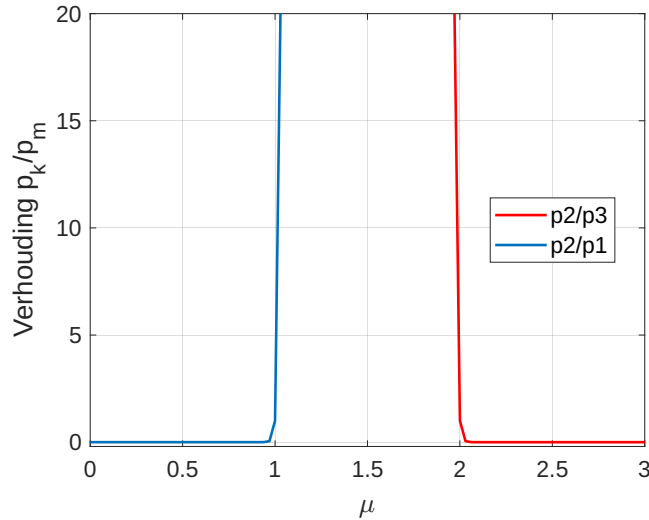
Bij lage temperaturen manifesteren de pieken van p_2/p_1 , p_2/p_3 , p_3/p_4 , enzovoort, zich scherp bij $\mu = nU$, terwijl de kansverhoudingen buiten deze punten vrijwel verwaarloosbaar zijn. Deze pieken markeren de overgangen tussen bezettingen n en $n \pm 1$, en weerspiegelen rechtstreeks de energiedrempels van het Bose-Hubbardmodel. Elke piek komt overeen met het energetisch meest gunstige punt om een extra deeltje aan het systeem toe te voegen.

Deze bevindingen worden geïllustreerd in Figuur 11 voor ratio p_2/p_3 .



Figuur 11: Links: invloed van T bij $U = 1$ voor rate p_2/p_3 ; rechts: invloed van U bij $T = 0.02$ voor rate p_2/p_3 .

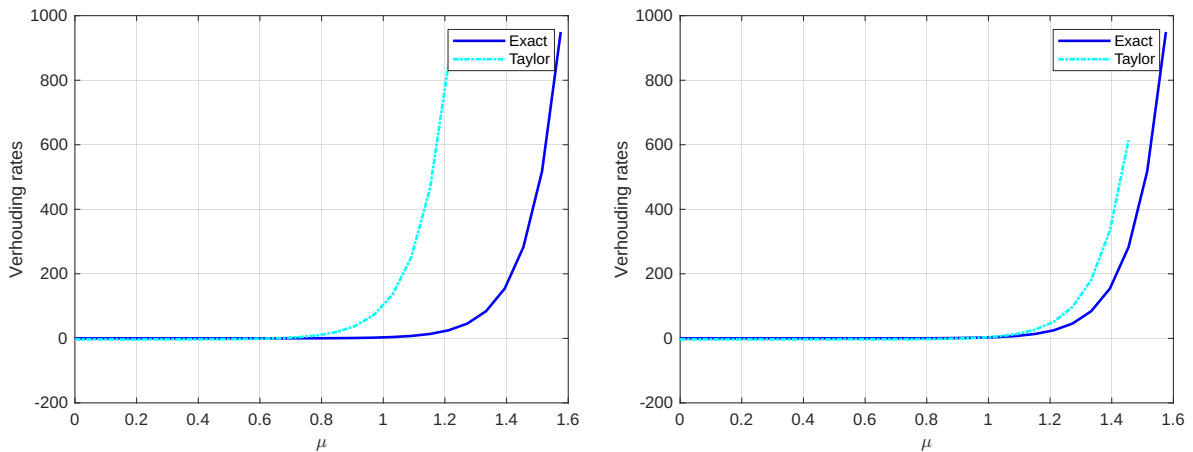
Figuur 12 toont hoe de dichtheidsverdeling ρ_n sterk geconcentreerd is rond specifieke geheeltallige bezettingen, wat wijst op een duidelijke kwantisatie van het deeltjesaantal. In het interval $\mu \in [1, 2]$ is de kans op een bezetting met twee deeltjes veel groter dan voor één of drie deeltjes, zo zagen we ook dat in het interval $\mu \in [0, 1]$ de kans op een bezetting met één deeltje groter is dan een bezetting met nul of twee deeltjes. Evenzo is in het interval $\mu \in [2, 3]$ de kans op drie deeltjes dominant ten opzichte van twee of vier. Dit gedrag zet zich ook voort bij hogere waarden van n , en bevestigt dat ρ_n uitgesproken maxima vertoont bij geheeltallige bezettingen. Dergelijke pieken zijn een ondubbelzinnig signaal van deeltjeskwantisatie.

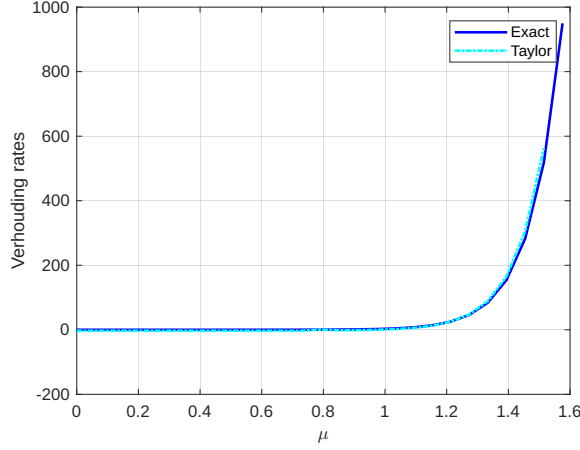


Figuur 12: Kwantisatie beeld voor $n=2$ deeltjes bij $T=0.02$ en $U=1$.

Nu het gekwantiseerde gedrag duidelijk in kaart is gebracht, rijst de vraag bij welke minimale orde voor de Taylor-expansie van de dissipatieve termen $u^\pm$ het kwantisatie-effect voor het eerst nauwkeurig zichtbaar wordt.

Bij lage temperaturen, waar de kansverdelingen uitgesproken pieken en abrupte overgangen vertonen, is een veel hogere orde van expansie vereist dan wat we eerder gebruikten om de exacte resultaten nauwkeurig te benaderen. Concreet blijkt onder andere dat bij een matig lage temperatuur van $T/U = 0.2$ een expansie tot en met orde 15 pas volstaat om een goede overeenkomst met het exacte resultaat te bekomen. Deze bevindingen worden geïllustreerd in Figuur 13.





Figuur 13: Vergelijking tussen exacte ratio en Taylor-benadering voor ordes: 5, 10 en 15 bij $T/U = 0.2$. Hierin stelt de donker blauwe curve het exacte resultaat voor en de lichtblauwe het benaderde resultaat, met links de kleinste orde, en rechts de grootste.

Bij nog lagere temperaturen neemt de vereiste expansieorde aanzienlijk toe, wat resulteert in sterk oplopende rekentijden. Hierdoor wordt het uitvoeren van simulaties in dit regime computationeel belastend en minder praktisch.

Merk tot slot op dat dit gedrag het gevolg is van het feit dat de kansen p_j afhangen van de Fermi-Dirac verdeling, waarvan we weten dat deze voor hoge temperatuur een lineair gedrag vertoont rond de chemische potentiaal. De eerste orde expansie is een lineaire expansie en vertegenwoordigt daarom goed deze benadering van hoge temperaturen. Echter bij hoge temperaturen is het klassieke regime dominant en zijn kwantum-effecten, zoals kwantisatie van het aantal deeltjes per site, niet aanwezig. Indien we naar deze lagere temperaturen willen kijken, waar het klassieke regime niet meer domineert, zullen we in ons model een hogere orde moeten gebruiken.

7.2 Combinatie van lokaal exacte dynamica en tunneling

In hoofdstuk 6 stelden we vast dat ons eerste-orde model niet volstaat om kwantisatie in kaart te brengen. Op grond van de bovenstaande, analytische resultaten stelden we vast dat in de limiet waarin de dissipatieve u -termen exact gekend zijn, deze kwantisatie wel degelijk terugkomt in de dynamica van de stationaire toestanden van het systeem.

Dit roept de fundamentele vraag op: is het mogelijk om binnen een perturbatieve master-vergelijking zoals Redfield, tot op eerste orde en zonder numeriek te zware berekeningen, een manier te vinden om deze exacte u -termen af te dwingen?

7.2.1 Expansie in de niet-lokale termen van de systeem Hamiltoniaan

Om het probleem op een hanteerbare manier te benaderen, hebben we ons gebaseerd op [45], en vertrekken we vanuit een herformulering van de systeem-Hamiltoniaan die toelaat om lokale en niet-lokale bijdragen afzonderlijk te behandelen. Deze opdeling vormt de basis voor een benadering waarin lokale dynamica exact kan worden vastgelegd, terwijl niet-lokale processen zoals tunneling als verstoring worden beschouwd.

We splitsen daartoe de Hamiltoniaan van het systeem op in een som van site-lokale termen $H_S^{\text{loc},i}$ en een restterm H_S^{rest} :

$$H_S = \sum_{i=1}^L H_S^{\text{loc},i} + H_S^{\text{rest}}. \quad (164)$$

Elke lokale term $H_S^{\text{loc},i}$ werkt alleen op site i , en is gewoonlijk exact diagonaaliseerbaar omdat ze slechts betrekking heeft op één vrijheidsgraad per site: het aantal bosonen n_i . De restterm bevat het tunneling-gedeelte, die het systeem niet-lokaal maakt.

Voor het lokale gedeelte stellen we een dissipatieve koppeling die enkel lokaal werkt op site j , via operator v .

Deze operator splitsen we als een spectrale ontbinding in de lokale basis van site j , zodat:

$$v = \sum_{kq} \hat{v}_{kq}^j, \quad \text{met} \quad \hat{v}_{kq}^j = |k_j\rangle\langle k_j| v |q_j\rangle\langle q_j|. \quad (165)$$

Op basis daarvan kunnen we de Redfield-operator lokaal benaderen als volgt:

$$u_{\text{loc}} = \sum_{kq} \sum_{n=0}^N \frac{W^{(n)}(\varepsilon_{kq}^j)}{n!} ([H_S, \cdot] - \varepsilon_{kq}^j \cdot)^n [\hat{v}_{kq}^j]. \quad (166)$$

De kern van de aanpak van het lokale deel zit in de keuze van de expansie-energieën ε_{kq}^j . Voor elke overgang tussen lokale toestanden kunnen we deze kiezen als het exacte energieverval tussen die twee toestanden:

$$\varepsilon_{kq}^j = E_k^{\text{loc},j} - E_q^{\text{loc},j}. \quad (167)$$

En nu gebeurt er iets cruciaals: als het residuele deel van de Hamiltoniaan nul is, en er dus geen tunneling tussen sites is, dan voldoet elke spectrale component $\hat{v}_{kq}^j$ exact aan:

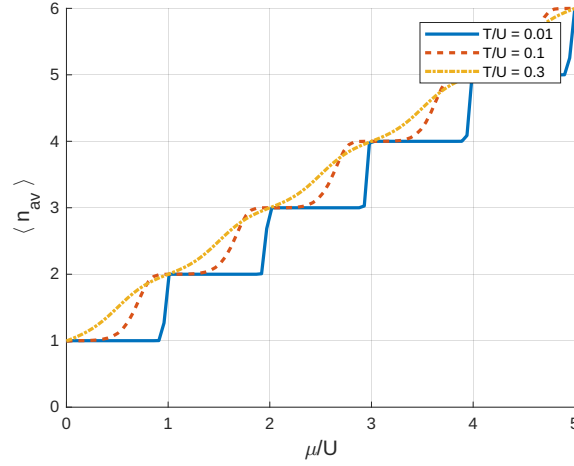
$$([H_S, \cdot] - \varepsilon_{kq}^j \cdot) [\hat{v}_{kq}^j] = 0. \quad (168)$$

Wat betekent dat vergelijking (166) in één klap exact wordt bij orde $N = 0$, en alle hogere termen automatisch verdwijnen.

Zodra tunneling J ingeschakeld wordt, ontstaan er natuurlijk afwijkingen. De vraag blijft wat er gebeurt als de lokale interactie dominant blijft over de koppeling, i.e. $J \ll U$. Is de convergentie dan traag genoeg om kwantisatie-effecten, zoals de overgang van een superfluide toestand naar een Mott-isolator, in kaart te brengen?

7.2.2 Preliminare resultaten

Een eerste stap in het onderzoek van deze innovatieve aanpak betreft de kwantisatie van het deeltjesaantal. Daartoe hebben we een curve opgesteld die het gemiddeld aantal deeltjes weergeeft als functie van de genormaliseerde chemische potentiaal, μ/U . De resultaten hiervan zijn weergegeven in Figuur 14, waarbij de tunnelingseffecten voorlopig buiten beschouwing zijn gelaten ($J = 0$).

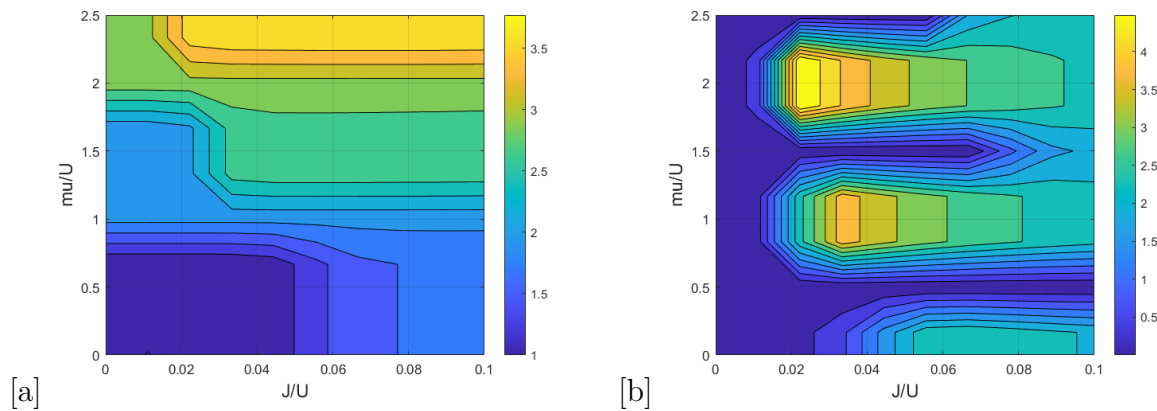


Figuur 14: Kwantisatie van het deeltjesaantal binnen de lokale dynamica, voor parameters: $J = 0$, $U = 5$ en $\gamma = \alpha = 1$.

Deze resultaten uit Figuur 14 bevestigen het beeld dat we eerder presenteerden rond Figuur 12, waarbij voor $\mu \in [0, 1]$ het gemiddeld aantal deeltjes gelijk is aan 1 en voor $\mu \in [1, 2]$ het gemiddeld aantal deeltjes 2 bedraagt. Dit omdat in Figuur 14 de scherpe kwantisatietrapjes precies samenvallen met deze trappen.

Bovendien vervagen bij hogere temperaturen de karakteristieke trappen in de $\langle n \rangle$ -curve door thermische fluctuaties, die de bezettingsniveaus afvlakken. Met andere woorden, de kwantisatie van het deeltjesaantal spreidt zich uit bij toenemende temperatuur.

Vervolgens onderzoeken we hoe de dynamica evolueert wanneer tunnelingseffecten wel worden meegenomen. Hypothetisch zou men verwachten dat er een overgang optreedt van een superfluïde naar een Mott-isolatorfase, nu we de kwantisatie van het deeltjesaantal hebben vastgesteld. Deze overgang zullen we weergeven door de zoektocht naar Mott-lobben, die in een faseplot optreden als gebieden met een vast, geheel aantal deeltjes per roosterplaats, gescheiden door superfluïde domeinen. Deze lobben visualiseren de parameterregimes waarin het systeem zich in een Mott-isolatorfase bevindt en maken zo de kwantumfaseovergang tussen de superfluïde en Mott-fase zichtbaar.



Figuur 15: Overgang van supefluïde- naar Mott-isolar toestand met links een faseplot voor n_{av} en rechts voor $|a|$ met parameters: $T/U=0.05$, $U=5$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0.01$, $J \in [0, 0.5]$ en $\mu \in [0, 12.5]$.

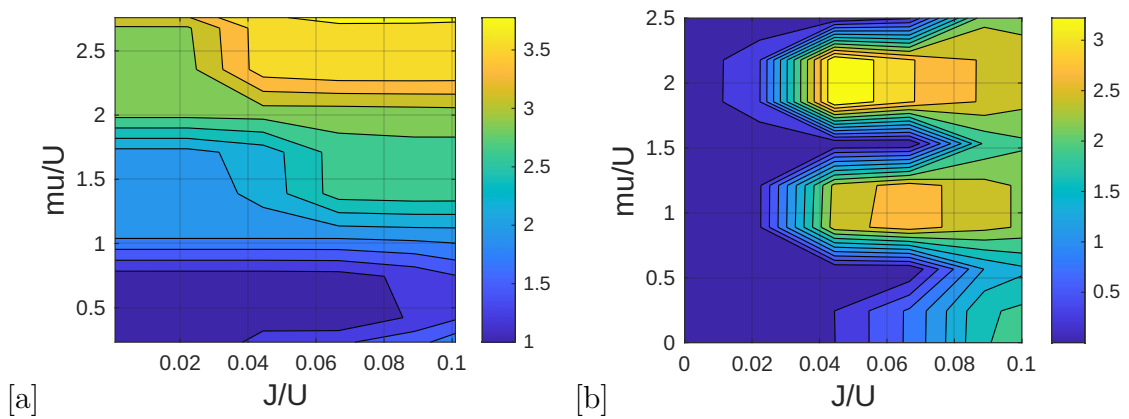
In Figuur 15a wordt de gemiddelde deeltjesdichtheid n_{av} weergegeven als functie van $\frac{\mu}{U}$ en $\frac{J}{U}$. Voor $J = 0$ komen de resultaten exact overeen met de sprongsgewijze toename van het deeltjesaantal zoals getoond in Figuur 14, wat de kwantisatie per roosterplaats in afwezigheid van tunneling weerspiegelt.

Figuur 15b toont de amplitude van de superfluïde component $|a|$ op de z-as. Gebieden waar $|a| = 0$ duiden op Mott-isolatie; erbuiten wijst een niet-nul $|a|$ op een superfluïde fase waarin deeltjes delokaliseren en collectief gedrag vertonen.

De globale structuur van het bekomen fase-diagram komt sterk overeen met eerdere resultaten van o.a. Fabrice Gerbier [42], die het Bose-Hubbard model bij eindige temperatuur analyseerde. Hoewel hij geen expliciete dissipatie beschouwt, onderzoekt hij evenwichtstoestanden die analoog zijn aan de thermisch gerelaxeerde situaties in ons model.

Beide benaderingen beschrijven dus de dynamica richting een gelijkaardige thermische eindtoestand, zij het via verschillende mechanismen. Dit verklaart de nauwe overeenkomst in de positie en vorm van de Mott-lobben en bevestigt de betrouwbaarheid van onze beschrijving van thermische evenwichtsregimes.

Zoals ook Gerbier opmerkt, reiken de superfluïde regimes bij eindige temperatuur niet meer tot $J = 0$, in tegenstelling tot de gekende situatie bij $T/U = 0$. Bij kleine maar niet-nul temperatuur zorgen thermische fluctuaties ervoor dat het steeds moeilijker wordt om fasecoherentie op te bouwen in het systeem. Vooral bij lage tunneling, waar de koppeling tussen de sites zwak is, kunnen deze thermische effecten de coherentie snel verstoren. Daardoor is een minimale hoeveelheid tunneling nodig om die orde te behouden, en reikt het superfluïde domein niet langer tot bij $J = 0$. Verder vervaagt de kwantisatie van het deeltjesaantal, zoals geschetst in Figuur 14, waardoor de Mott-fase minder scherp gedefinieerd wordt. Dit gedrag is ook zichtbaar in Figuren 15-16. De temperatuurstijging van $T/U = 0.05 \rightarrow 0.1$ zorgt ervoor dat het superfluïde gedeelte kleiner wordt naarmate de temperatuur stijgt, en dat de Mott-lobes vervormen en minder uitgesproken worden.



Figuur 16: Overgang van superfluïde- naar Mott-isolator toestand met links een faseplot voor n_{av} en rechts voor $|a|$ met parameters: $T/U=0.1$, $U=5$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0.01$, $J \in [0, 0.5]$ en $\mu \in [0, 12.5]$.

Onze resultaten bevestigen dus dat de combinatie van lokaal exacte interacties en zwakke thermische effecten leiden tot een realistische beschrijving van de kwantumfaseovergang tussen een superfluidum en Mott-isolator, en dat deze consistent is met eerder werk over thermisch evenwicht binnen hetzelfde model, wat vertrouwen schept in onze resultaten.

8 Besluit

In dit werk onderzochten we de dissipatieve dynamica van het Bose-Hubbard-model in interactie met een fermionisch reservoir (TLS). Aan de hand van de mastervergelijking werd de systeemdynamica geanalyseerd.

Onze resultaten tonen het optreden van een duidelijke faseovergang van een coherente naar een incoherente fase, gestuurd door interactie-effecten. Uit de analyse van de amplitude $|\langle a \rangle|$ blijkt het volgende:

- Bij zwakke interactie U en sterke tunneling J bevindt het systeem zich in een coherente fase, gekenmerkt door een stationaire toestand met $|\langle a \rangle| > 0$.
- Bij toenemende interactie U daalt deze stationaire waarde, totdat in het regime $U \gg J$ de amplitude $|\langle a \rangle|$ naar nul gaat, wat wijst op een overgang naar een incoherente fase.

Daarnaast bevestigden de resultaten dat de thermische effecten ook een cruciale bijdrage leveren: bij lage temperaturen blijft de coherentie behouden, maar naarmate de temperatuur stijgt, neemt deze geleidelijk af. Boven de kritische temperatuur $T_c \sim Jn$ is de coherentie volledig verdwenen.

Ten slotte werd de kwantisatie van het deeltjesaantal onderzocht aan de hand van de kansverhoudingen $p_n/p_{n\pm 1}$. Bij een exacte berekening van de dissipatieve termen $u^\pm$ manifesteert deze kwantisatie zich duidelijk: voor lage temperatuur vertoont de kansverhoudingen uitgesproken pieken bij $n = U/\mu$, met $n = 1, 2, 3, \dots$, terwijl de waarden elders nagenoeg verwaarloosbaar zijn. Deze pieken markeren de overgangen tussen bezettingen n en $n \pm 1$, en vormen een ondubbelzinnig signaal van deeltjeskwantisatie.

In het eerste voorgestelde model werd echter een benadering gehanteerd waarbij de dissipatieve $u^\pm$ -termen werden geëxpandeerd tot eerste orde in energie. Deze lage-orde expansie bleek ontoereikend om de kwantisatiestructuur accuraat te reproduceren: voor temperaturen tot $T/U \geq 0.2$ bleek een expansie tot minstens orde 15 vereist om de karakteristieke pieken adequaat te reconstrueren. Voor nog lagere temperaturen bleken de benodigde rekenkosten prohibitief.

Een alternatieve modellering, waarbij de interactietermen U lokaal exact werden behandeld, bood een oplossing: zelfs met een eerste-orde expansie van de dissipatieve termen werd de kwantisatie van het deeltjesaantal overtuigend gerecupereerd. Binnen deze aanpak liet het model bovendien toe om, op basis van de Redfield-mastervergelijking, de overgang van een superfluïde naar een Mott-isolatorfase duidelijk te identificeren.

Nawoord

Dit nawoord biedt een vooruitblik op mogelijke richtingen voor toekomstig onderzoek. In dit werk werd specifiek gefocust op de relaxatie naar thermisch evenwicht in interactie met een fermionisch reservoir. Een meer diepgaande analyse van thermisch evenwicht in zulke open kwantumsystemen, zou het eventueel mogelijk maken om overgangsgebieden en kritische punten met grotere nauwkeurigheid te karakteriseren.

Een natuurlijke vervolgstap is het bestuderen van systemen die niet langer naar evenwicht evolueren, maar zich in een permanent aangedreven niet-evenwichtstoestand bevinden. Zulke scenario's doen zich voor in bijvoorbeeld fotoncondensaten of andere systemen met voortdurende pomp en dissipatie. Het zou bijzonder interessant zijn om te onderzoeken hoe lokale interacties de dynamica in zulke niet-evenwichtsomgevingen beïnvloeden.

Referenties

- [1] J. Klaers, J. Schmitt, F. Vewinger, and M. Weitz, *Bose–Einstein condensation of photons in an optical microcavity*, Nature, vol. 468, pp. 545–548, 2010.
- [2] M. Fitzpatrick, N. M. Sundaresan, A. C. Y. Li, J. Koch, and A. A. Houck, *Observation of a dissipative phase transition in a one-dimensional circuit QED lattice*, Phys. Rev. X, vol. 7, no. 1, p. 011016, 2017.
- [3] P. Kirton and J. Keeling, *Nonequilibrium Model of Photon Condensation*, Phys. Rev. Lett., vol. 111, no. 10, p. 100404, 2013.
- [4] M. Biondi, E. van Nieuwenburg, G. Blatter, and S. Schmidt, *Incompressible polaritons in a flat band*, Phys. Rev. Lett., vol. 116, no. 17, p. 173602, 2016.
- [5] Breuer, H.-P., & Petruccione, F. (2002). The Theory of Open Quantum Systems. Oxford University Press.
- [6] Manninen, J., Agasti, S., & Massel, F. (2017). Nonlinear quantum Langevin equations for bosonic modes in solid-state systems. arXiv. DOI: 10.48550/arXiv.1711.00424
- [7] Schnell, A. *Introduction to the Theory of Open Quantum Systems* (Chapter 3.1). Technische Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik, Lecture notes SoSe 2023. Laatst bijgewerkt op 5 september 2024.
- [8] Pethick, C. J., Smith, H. (2008). Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases (2nd ed.). Cambridge University Press.
- [9] Schnell, A. Global to local: Application to bosons. Technische Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik, 11 september 2024.
- [10] Tailoring the nonlinear absorption of fluorescent dyes by substitution at a boron center. Journal of Materials Chemistry C, 2021.
- [11] Schnell, A. Global becomes local: Efficient many-body dynamics for global master equations. Technische Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik, 9 september 2024.
- [12] Serafini, A. (2017). Quantum Continuous Variables: A Primer of Theoretical Methods. CRC Press, Taylor Francis Group. ISBN: 978-1-4822-4634-6.
- [13] Sachdev, S. (2011). Quantum Phase Transitions (2nd ed.). Cambridge University Press. ISBN: 978-0-521-51468-2.
- [14] R. Smith, *Symmetry and Physical Systems*, Oxford University Press, 2020.
- [15] L. Zhang, *Macroscopic Coherence in Quantum Systems*, Journal of Quantum Physics, 2019.
- [16] L. Zhang, *Thermal Systems in Quantum Mechanics*, Journal of Quantum Physics, 2018.
- [17] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press, 2nd ed., 2010.
- [18] A. Zagoskin, *Quantum Engineering: Theory and Design of Quantum Coherent Structures*, Cambridge University Press, 2014.

- [19] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, P. Zoller, *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108–3111 (1998).
- [20] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, *Many-body physics with ultracold gases*, Rev. Mod. Phys. **80**, 885–964 (2008).
- [21] O. Dutta, M. Gajda, P. Hauke, M. Lewenstein, D. S. Lühmann, B. A. Malomed, T. Sowiński, J. Zakrzewski, *Non-standard Hubbard models in optical lattices: a review*, Rep. Prog. Phys. **78**, 066001 (2015).
- [22] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3rd ed., Cambridge University Press (2007).
- [23] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Communications in Mathematical Physics(1976).
- [24] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific (2012).
- [25] W. H. Zurek, *Decoherence, the measurement problem, and interpretation of quantum mechanics*, (2003)
- [26] D. Jaksch en P. Zoller, "The Bose-Hubbard model with atomic interactions," New Journal of Physics, 2005.
- [27] Caleffi, Fabio. Collective Modes and Strong Correlations from a Quantum Gutzwiller Ansatz. Ph.D. Thesis, Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Trieste, 2022. Promotor: Prof. Massimo Capone. Co-promotoren: Dr. Alessio Recati, Dr. Iacopo Carusotto.
- [28] D. Tong, *Gauge Theory: Broken Symmetries*, University of Cambridge Lecture Notes.
- [29] L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York, 1968.
- [30] P. Hadley, *Fourier Transforms*, TU Graz. Beschikbaar op: <https://lampz.tugraz.at/~hadley/ss1/crystaldiffraction/ft/ft.php>
- [31] M. Łacki, D. Delande, J. Zakrzewski, Locating the quantum critical point of the Bose-Hubbard model through singularities of simple observables, Scientific Reports 6, 38340 (2016). Beschikbaar op: <https://www.nature.com/articles/srep38340>
- [32] F. M. Cucchietti, B. Damski, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek, "Dynamics of the Bose-Hubbard model: transition from Mott insulator to superfluid," *arXiv preprint cond-mat/0601650*, 2006.
- [33] M. Capello, F. Becca, M. Fabrizio, and S. Sorella, "Superfluid to Mott-insulator transition in Bose-Hubbard models," *arXiv preprint arXiv:0705.2684*, 2007.
- [34] K. Sengupta and N. Dupuis, *Mott insulator to superfluid transition in the Bose-Hubbard model: a strong-coupling approach*, Phys. Rev. A **71**, 033629 (2005). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.033629>
- [35] L. I. Plimak, M. Fleischhauer, and M. K. Olsen, "Occupation number and fluctuations in the finite-temperature Bose-Hubbard model," 2004
- [36] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, 3rd ed., Oxford University Press, 2000.

- [37] R. J. Glauber, “The quantum theory of optical coherence,” *Physical Review*, vol. 130, no. 6, pp. 2529–2539, 1963.
- [38] G. Hercé, J.-P. Bureik, A. Ténart, A. Aspect, and D. Clément, “Full counting statistics of interacting lattice gases after an expansion: quantifying many-body coherence from atom correlations,” *arXiv preprint* arXiv:2207.00000, 2022.
- [39] H. Paul, “Photon antibunching,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 54, no. 4, pp.
- [40] M. Hügel, L. Pollet, ”Thermodynamics of the Bose-Hubbard model in a theory”, *Phys. Rev. B*, 91, 224510 (2015).
- [41] M. Rodriguez, F. Vázquez, ”Phase diagram of the Bose-Hubbard Model on Complex Networks”, arXiv:1203.1566 (2012).
- [42] F. Gerbier, *Boson Mott insulators at finite temperatures*, arXiv:0705.3956v2 [cond-mat.other], 2007.
<https://arxiv.org/abs/0705.3956>
- [43] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, Boson localization and the superfluid-insulator transition, *Physical Review B*, 40(1):546–570, 1989.
- [44] M. Kardar, *Statistical Physics of Particles*, Cambridge University Press, 2007.
- [45] A. Schnell, ”Private communication,”Technische Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik, 10623 Berlin, Germany, May 2025.

Appendix A: Matlab Code

```

1 clear all;
2 % Parameters
3 % (mu+sqrt(mu^2+4*U*T*f(end)+2*mu*U*f(end)))/(2*U*f(end))
4 N = 5; % Maximale Fockruimte (maximum aantal
    deeltjes)
5 J = 2;
6 alpha = 0.3;
7 T=10;
8 mu=1;
9 for U = [1,2,5,10
10         ]; %Interactie-sterkte
11     F = 0;
12     gamma=1;
13     % Operators
14     a = diag(sqrt(1:N), 1); % Annihilation operator
15     ad = a'; % Creation operator
16     % Initiale toestand (vacuum state)
17     n = (0:N)'; % Fock-basis index
18     coherent_state = exp(-abs(alpha)^2 / 2) * (alpha.^n) ./...
19     sqrt(factorial(n)); % Coherente toestandsvector
20     rho= zeros(N+1);
21     % Gebruik de bestaande rho-matrix, maar pas de eerste rij/kolom aan
22     rho = coherent_state*coherent_state';
23     w_nul_min= gamma/(exp((-0+mu)/(T))+1);
24     w_nul_plus= gamma/(exp((0-mu)/(T))+1);
25     w_eeen_min= -(gamma*(exp((-0+mu)/T)))/(T*(exp((-0+mu)/T)+1)^2);
26     w_eeen_plus= -(gamma*(exp((0-mu)/T)))/(T*(exp((0-mu)/T)+1)^2);
27
28     % Dissipatieve parameters
29     u_minus_i = w_nul_min * a + w_eeen_min *(J*trace(a*rho)-J*a - ...
30         U * ad * a * a); % Voorbeeld u_-i
31     u_plus_i = w_nul_plus * ad - w_eeen_plus*(J*trace(ad*rho)-J*ad - ...
32         U * ad * ad * a); % Voorbeeld u_+i
33     u_minus_i2 = w_nul_min * trace(a*rho) + w_eeen_min *...
34     (J*a-J*trace(a*rho)- U * trace(rho*ad*a*a) ); % Voorbeeld u_-i
35     u_plus_i2 = w_nul_plus * trace(ad*rho) - w_eeen_plus *...
36     (J*ad-J*trace(ad*rho)- U * trace(rho*ad*ad*a)); % Voorbeeld u_+i
37     %
38     % Tijdsevolutieparameters
39     dt = 1e-3; % Tijdstap
40     n_steps = 2e4; % Aantal tijdstappen
41     % Pre-allocatie voor opslaan van trace(rho * ad * a)
42     trace_values = zeros(n_steps, 1);
43     n_values = zeros(n_steps, 1);
44     time = (0:n_steps-1) * dt; % Tijdas
45     H_S= -J*(ad*trace(rho*a)+trace(ad*rho)*a-ad*a-trace(ad*a*rho))+...
46     0.5*U*(ad*a*ad*a-ad*a+trace(ad*a*ad*a*rho)-trace(ad*a*rho));
47     % Definitie van tijdafgeleide functie (drho_dt)
48     drho_dt = @(rho) ...
49         -1i * (H_S * rho - rho * H_S) + ... % Hamiltonian evolution term
50         ((w_nul_min * a + w_eeen_min *(J*trace(a*rho)-J*a - U *...
51         ad * a * a)) * rho * ad - ad * (w_nul_min * a + w_eeen_min *...
52         (J*trace(a*rho)-J*a - U * ad * a * a)) * rho) + ... %
53         dissipative
54         ((w_nul_plus * ad - w_eeen_plus*(J*trace(ad*rho)-J*ad - U *...
55         ad * ad * a)) * rho * a - a * (w_nul_plus * ad - w_eeen_plus*...

```

```

55     (J*trace(ad*rho)-J*ad - U * ad * ad * a)) * rho) + ...
56     ((w_nul_min * a + w_eeen_min *(J*trace(a*rho)-J*a - U *...
57         ad * a * a)) * rho * ad - ad * (w_nul_min * a +...
58         w_eeen_min *(J*trace(a*rho)-J*a - U * ad * a * a)) * rho)' +
...
59     ((w_nul_plus * ad - w_eeen_plus*(J*trace(ad*rho)-J*ad - U *...
60     ad * ad * a)) * rho * a - a * (w_nul_plus * ad - w_eeen_plus*...
61     (J*trace(ad*rho)-J*ad - U * ad * ad * a)) * rho)' +...
62     ((w_nul_min * trace(a*rho) + w_eeen_min *(J*a-J*trace(a*rho)- ...
63     U * trace(rho*ad*a*a) )) * rho * ad - ad * (w_nul_min *...
64     trace(a*rho) + w_eeen_min *(J*a-J*trace(a*rho)- U *...
65     trace(rho*ad*a*a) )) * rho) + ... % dissipative term for u_-i
66     ((w_nul_plus * trace(ad*rho) - w_eeen_plus *(J*ad-J*trace(ad*rho)
-...
67     U * trace(rho*ad*ad*a))) * rho * a - a * (w_nul_plus *...
68     trace(ad*rho) - w_eeen_plus *(J*ad-J*trace(ad*rho)- U *...
69     trace(rho*ad*ad*a))) * rho) + ... % dissipative term for u_+i
70     ((w_nul_min * trace(a*rho) + w_eeen_min *(J*a-J*trace(a*rho)-...
71     U * trace(rho*ad*a*a) )) * rho * ad - ad * (w_nul_min *...
72     trace(a*rho) + w_eeen_min *(J*a-J*trace(a*rho)- U *...
73     trace(rho*ad*a*a) )) * rho)' + ... % h.c. term for u_-i
74     ((w_nul_plus * trace(ad*rho) - w_eeen_plus *(J*ad-J* ...
75     trace(ad*rho)- U * trace(rho*ad*ad*a))) * rho * a - a * ...
76     (w_nul_plus * trace(ad*rho) - w_eeen_plus *(J*ad-J*trace(ad*rho)-
...
77     U * trace(rho*ad*ad*a))) * rho)'; % h.c. term for u_+i
78 % Tijdsevolutie met Runge-Kutta 4
79 for it = 1:n_steps
80     % RK4-stappen
81     k1 = drho_dt(rho);
82     k2 = drho_dt(rho + 0.5 * dt * k1);
83     k3 = drho_dt(rho + 0.5 * dt * k2);
84     k4 = drho_dt(rho + dt * k3);
85     % Update rho met de RK4-formule
86     rho = rho + (dt / 6) * (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4);
87     % Opslaan van trace(rho * ad * a) voor dit tijdstip
88     f(it) = (trace(rho * ad * a * ad * a))/(trace(rho*ad*a)^2);
89     f_values(it) = (trace(rho*ad*a*ad*a)-trace(rho*ad*a)^2)/...
90     (trace(rho*ad*a));
91     f_2_values(it) = ((angle(trace(a*a*rho)) - ...
92         angle(trace(a*rho))^2)/angle((trace(rho*a))));
93     a_values(it) = abs(trace(rho*a))^2;
94     n_values(it) = trace(real(rho*ad*a));
95 end
96 %
97 plot(time,a_values, 'LineWidth',2);
98 hold on
99 %ylim([0 10]);
100 %plot(time, f_2_values, 'LineWidth',2);
101 legend('U=0', 'U=1', 'U=2', 'U=5', 'U=10')
102 %yline((mu+sqrt(mu^2+4*U*T*f(end))+2*mu*U*f(end))/(2*U*f(end)),
103 % '--r', 'analytische waarde');
104 xlabel('U');
105 ylabel('Amplitude a');
106 title('Tijdsevolutie van amplitude in functie van U, J=2');
107 grid on;
108 % Laatste resultaat weergeven
109 disp(['a: ', num2str(f_values(end))]);

```



```

110 end
111 %%
112 imagesc((rho))
113 title('Imagesc diagram')
114 %%
115 plot(real(diag(rho)))
116 title('plot van diag(rho)')
117 %%
118 plot(diag(rho))
119 set(gca, 'YScale', 'log') % Zet de y-as op logaritmische schaal
120 title('Plot van diag(rho) op logscale')
121 xlabel('Index')
122 ylabel('diag(rho) (log schaal)')
123 grid on

1 % Symbolische variabelen
2 syms n mu E T m E2
3 % Definieer de functies correct (Fermi-Dirac vorm)
4 f = (2*n)/(1 + exp((E - mu)/T));
5 g = 2*(m + 1)*(1 - 1/(1 + exp((E2 - mu)/T)));
6 % Taylor-expansie rond E = 0 en E2 = 0 tot nde orde
7 % Numerieke parameters
8 n_val = 3;
9 m_val = 2;
10 U = 1;
11 T_val = 0.01;
12 % Substitueer evaluatiepunten
13 E_val_f = U * n_val - U; % = 4
14 E2_val_g = U * m_val; % = -4
15 % Exacte functies met parameters
16 f_exact = subs(f, [n, T, E], [n_val, T_val, E_val_f]);
17 g_exact = subs(g, [m, T, E2], [m_val, T_val, E2_val_g]);
18 % Waarden voor mu
19 mu_vals = linspace(0, 3, 100);
20 f_exact_vals = zeros(size(mu_vals));
21 g_exact_vals = zeros(size(mu_vals));
22 % Bereken voor elk mu
23 for i = 1:length(mu_vals)
24     mu_i = mu_vals(i);
25     % Exact
26     f_exact_vals(i) = double(subs(f_exact, mu, mu_i));
27     g_exact_vals(i) = double(subs(g_exact, mu, mu_i));
28 end
29 % Verhoudingen berekenen
30 ratio_fg_exact = f_exact_vals ./ g_exact_vals;
31 ratio_gf_exact = g_exact_vals ./ f_exact_vals;
32
33 % Filteren van extreme waarden voor stabiliteit
34 ratio_fg_exact(abs(ratio_fg_exact) > 1e3) = NaN;
35 ratio_gf_exact(abs(ratio_gf_exact) > 1e3) = NaN;
36
37 %
38 % Plotten
39 figure;
40 % Exact
41 plot(mu_vals, ratio_gf_exact, 'r-', 'LineWidth', 1.5, 'DisplayName', 'Exact: f/g');
42 hold on

```

```

43 % Lijn bij mu = U
44 %xline(U, 'k--', 'LineWidth', 1.2, 'DisplayName', '\mu = U');
45 xlabel('\mu');
46 ylabel('Verhouding rates');
47 grid on;% Symbolische variabelen
48 syms n mu E T m E2
49
50 % Fermi-Dirac achtige functies
51 f = (2*n)/(1 + exp((E - mu)/T));
52 g = 2*(m + 1)*(1 - 1/(1 + exp((E2 - mu)/T)));
53
54 % Parameters
55 n_val = 2;
56 m_val = 1;
57 U = 1;
58
59 % Evaluatiepunten
60 E_val_f = U * n_val - U;      % = 2
61 E2_val_g = U * m_val;      % = 2
62
63 % Waarden voor mu en T
64 mu_vals = linspace(0, 3, 100);
65 T_values = [0.01]; % Corrigeer '03' naar 0.3
66 colors = lines(length(T_values)); % Automatisch kleurenpalet
67
68 % Plot initialiseren
69
70 % Loop over T-waarden
71 for j = 1:length(T_values)
72     T_val = T_values(j);
73
74     % Vervang parameters in f en g
75     f_exact = subs(f, [n, T, E], [n_val, T_val, E_val_f]);
76     g_exact = subs(g, [m, T, E2], [m_val, T_val, E2_val_g]);
77
78     % Waarden berekenen
79     f_vals = zeros(size(mu_vals));
80     g_vals = zeros(size(mu_vals));
81
82     for i = 1:length(mu_vals)
83         mu_i = mu_vals(i);
84         f_vals(i) = double(subs(f_exact, mu, mu_i));
85         g_vals(i) = double(subs(g_exact, mu, mu_i));
86     end
87
88     % Ratio's
89     ratio_fg = f_vals ./ g_vals;
90     ratio_gf = g_vals ./ f_vals;
91
92     % Spiegel
93     mu_mirror = -mu_vals;
94     ratio_fg_mirror = fliplr(ratio_fg);
95     ratio_gf_mirror = fliplr(ratio_gf);
96
97     % Verwijder extreme waarden
98     ratio_fg(abs(ratio_fg) > 1e3) = NaN;
99     ratio_gf(abs(ratio_gf) > 1e3) = NaN;
100    ratio_fg_mirror(abs(ratio_fg_mirror) > 1e3) = NaN;

```

```

101     ratio_gf_mirror(abs(ratio_gf_mirror) > 1e3) = NaN;
102
103     % Plot originele curves
104     plot(mu_vals, ratio_fg, '-', 'LineWidth', 1.5, ...
105          'Color', colors(j,:), 'DisplayName', sprintf(' T = %.1f', T_val)
106         );end
107 % Extra plotinstellingen
108 ylim([-0.2 20]);
109 grid on;
110 % Grotere lettertypes
111 set(gca, 'FontSize', 14); % As-ticks
112 xlabel('\mu', 'FontSize', 16);
113 ylabel('Verhouding p_k/p_m', 'FontSize', 16);
114 legend('p2/p3', 'p2/p1', 'FontSize', 14, 'Location', 'best');

```