

Dynamical Mean-Field Theory for Bosons and Bose-Fermi Mixtures

Doctoral Thesis

Author(s):

Anders, Peter C.

Publication date:

2011

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-007146448>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 19974

DYNAMICAL MEAN-FIELD THEORY FOR BOSONS AND
BOSE-FERMI MIXTURES

A dissertation submitted to

ETH ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by

PETER CHRISTIAN ANDERS

MSc, KTH, Stockholm, Sweden

born 17.05.1980

citizen of Germany

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. M. Troyer, examiner

Prof. Dr. P. Werner, co-examiner

Prof. Dr. L. Pollet, co-examiner

2011

Abstract

The understanding of strongly correlated many-body systems is one of the fundamental goals in condensed matter physics. Even today, with the availability of extremely powerful computers, numerical simulation of such systems is still challenging. The main reason for this is that most standard methods, such as exact diagonalization, perturbative methods, and quantum Monte Carlo all have their limitations. Since most problems cannot be solved exactly, one needs to find approximate methods, which nevertheless capture the essential physics.

A computationally tractable approximate method to treat correlated fermions on a lattice is the so-called dynamical mean-field theory (DMFT), which maps the full many-body problem to an effective impurity problem coupled to a self-consistently determined bath. In this work we derive a similar dynamical mean-field theory for bosonic lattice problems (B-DMFT). The effective impurity action is derived in two different ways: as an approximation to the kinetic energy functional of the lattice problem and by using an effective medium approach based on adding a one-loop correction to the self-consistently defined condensate.

To solve the impurity problem, we develop a continuous-time Monte Carlo algorithm based on a sampling of a perturbation expansion in the hybridization function and the condensate wave function. The B-DMFT method is then used to investigate the Bose-Hubbard model on the 3d cubic and 2d square lattice in terms of phase diagrams, correlation functions, critical exponents and energies. Comparison to exact lattice Monte Carlo shows that B-DMFT gives excellent results in three dimensions, i.e. both ground state and finite temperature phase diagrams as well as dynamical quantities are reproduced at the 1-2% level. In two dimensions we still have good agreement with Monte Carlo, although the superfluid-to-normal transition is less accurately reproduced due to the Kosterlitz-Thouless nature of the phase transition.

The excellent agreement of B-DMFT with exact lattice Monte Carlo suggests to study more complicated models where other numerical methods fail. To this end we use a combined DMFT method for bosons and fermions to study a mixture of spin-1/2 fermions and spinless bosons. We focus on the effect of the bosons on the fermions by studying the fermionic phase diagram, determining the regions of s-wave pairing, charge density wave and antiferromagnetic order at half filling in the presence of interacting bosons. We find that the effect of the bosons

is to induce an effective hopping and interaction between the fermions. Even for non-interacting and repulsive fermions, the bosons can lead to an effective fermion-fermion attraction, and thus to s-wave pairing.

Zusammenfassung

Die Erforschung stark korrelierter Vielteilchensysteme ist eines der grundlegenden Ziele in der Physik kondensierter Materie. Trotz der heutigen enormen Leistungsfähigkeit von Computern bleibt die numerische Simulation solcher korrelierter Vielteilchensysteme immer noch eine Herausforderung. Der Hauptgrund dafür ist, dass die meisten Standardmethoden, wie beispielsweise exakte Diagonalisierung, Störungstheorie oder Quanten Monte Carlo, alle ihre Grenzen haben. Da die meisten Probleme nicht exakt lösbar sind, braucht man approximative Methoden, welche die wesentliche Physik des Problems erfassen.

Ein rechnerisch überschaubares Näherungsverfahren um korrelierte Fermionen auf dem Gitter zu untersuchen, ist die sogenannte dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT). In dieser Methode wird das gesamte Vielteilchenproblem auf ein Störstellenproblem und eine Selbstkonsistenzgleichung abgebildet.

In der vorliegenden Arbeit beschreiben wir eine ähnliche dynamische Molekularfeldtheorie für bosonische Gitterprobleme (B-DMFT). Die effektive Wirkung dieses Systems wird auf zwei unterschiedliche Arten hergeleitet: Als Näherung an das kinetische Energiefunktional und durch den Ansatz einer effektiven Umgebung, wobei zusätzlich zu dem selbskonsistenten Kondensat eine one-loop Korrektur hinzugefügt wird.

Zur Lösung des Störstellenproblems entwickeln wir einen Monte Carlo Algorithmus der keine Zeitdiskretisierung benötigt und auf einer Störungsentwicklung in der Hybridisierungsfunktion und der Kondensatwellenfunktion beruht. Diese Methode wird dann verwendet, um das Bose-Hubbard Modell auf dem 3d kubischen und 2d quadratischen Gitter anhand von Phasendiagrammen, Korrelationsfunktionen, kritischen Exponenten und Energien zu untersuchen. Vergleiche zur exakten Gitter Monte Carlo Methode zeigen, dass B-DMFT hervorragende Ergebnisse in drei Dimensionen liefert. Sowohl das Phasendiagramm im Grundzustand und bei endlicher Temperatur, sowie dynamische Größen werden mit einer Genauigkeit von 1-2% wiedergegeben. In zwei Dimensionen ist die Übereinstimmung mit Monte Carlo immer noch gut, obwohl der Übergang von der superflüssigen zur normalen Phase aufgrund der Art des Phasenübergangs (Kosterlitz-Thouless) nicht so genau wiedergegeben wird.

Durch die gute Übereinstimmung von B-DMFT mit der numerisch exakten Lösung (Gitter-Monte Carlo) liegt es nahe nun kompliziertere Modelle zu

studieren, bei denen andere numerische Methoden versagen. Zu diesem Zweck verwenden wir eine kombinierte DMFT Methode für Bosonen und Fermionen, um eine Mischung aus Spin-1/2 Fermionen und Spin-0 Bosonen zu simulieren. Wir konzentrieren uns hier auf den Effekt der Bosonen auf die Fermionen durch Berechnung des fermionischen Phasendiagramms, indem wir die Regionen mit s-Wellen-Paarung, Ladungsdichtewelle und antiferromagnetischer Ordnung bei halber Füllung in Gegenwart interagierender Bosonen bestimmen. Der Effekt der Bosonen liegt darin, ein effektives Hüpfen und eine effektive Wechselwirkung zwischen den Fermionen zu induzieren. Dies kann auch für nicht-interagierende und abstoßende Fermionen zu einer effektiven Anziehung, und somit zu s-Wellen-Paarung führen.