

Diagrama de Fases de Átomos Bosónicos Sujetos a Confinamiento no Diagonal



Greis Julieth Cruz Reyes

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias
Departamento de Física
Bogotá, 2014

Diagrama de Fases de Átomos Bosónicos Sujetos a Confinamiento no Diagonal

Greis Julieth Cruz Reyes

Tesis de grado presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Física

Dirigido por:
Jereson Silva Valencia Ph. D

Grupo de Sistemas Correlacionados

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2014

Resumen

Los sistemas de muchas partículas conformados por bosones, se han estudiado de forma extensa gracias a los aportes significativos que se han hecho a la física de bajas temperaturas; el condensado de Bose-Einstein y la observación de una transición de fase cuántica son ejemplos experimentales de adelantos en este tema que han abierto nuevos campos de investigación.

La física de bosones confinados está descrita por el modelo de Bose-Hubbard, donde el Hamiltoniano contiene el término de energía cinética caracterizado por el parámetro de salto t y el término de interacción local entre dos cuerpos descrito por el parámetro U . La competencia entre la energía cinética y la energía de interacción, da lugar a dos posibles fases: la fase aislante de Mott, la cual se caracteriza por una densidad entera y un gap de energía y la fase superfluida.

Experimentalmente el sistema se confina en un lugar finito del espacio por medio de un potencial externo y este término se incluye en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard. Sin embargo, los estudios que se han realizado no revelan una fase aislante de Mott pura. Este resultado inesperado fue motivación suficiente para que en el año 2010 [2] Rousseau y colaboradores sugirieran el confinamiento no diagonal sobre el cual ha sido posible obtener la fase aislante de Mott.

Adicionalmente, se ha demostrado que la interacción entre más de dos partículas puede modificar el parámetro de salto y llevar el sistema a nuevas fases [3]. Por consiguiente, en este trabajo se elaboran y exploran los diagramas de fases del estado base de sistemas bosónicos unidimensionales, confinados en potenciales periódicos con interacción local entre dos y/o tres cuerpos sujetos a confinamiento no-diagonal. Tales diagramas se construyen utilizando el Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad.

Los diagramas de fases de sistemas bosónicos revelan que los puntos críticos toman valores más grandes del parámetro de salto con el aumento en la interacción entre tres cuerpos. Adicionalmente se observa, por medio del cálculo de la densidad y la compresibilidad local, la distribución de las partículas bajo el confinamiento no diagonal a partir del cual se obtiene la fase de coexistencia entre el aislante de Mott y el superfluido

Abstract

The significant contributions proposed to the low temperature physics by the study of bosonic systems, have been extensively studied.

The Bose-Einstein condensate and the observation of a quantum phase transition are experimental examples of new advances in this research.

The confined bosons physics is describe by the Bose-Hubbard Model, where the Hamiltonian has the kinetic energy term which is characterized by the hopping parameter t and the local interaction term U . The competition between the kinetic energy and interaction energy goes to two possible phases: the Mott insulator phase characterized by an entire density and an energy gap, and the superfluid phase.

Experimentally, the system is confined into a finite place by an external potential, with an additional term in the Bose-Hubbard Hamiltonian. However, the studies than have been realized do not reveal a pure Mott insulator. This unexpected result was a motivation in 2010 [2] in which Rousseau et al. suggested the off-diagonal confinement. This confinement be able to obtain the pure mott insulator.

Adicionally, the change of the hopping parameter by the interaction between more than two particles have been demonstrated [3]. Therefore, we develop and examine the ground-state phase diagrams of unidimensional bosonic systems, they are confined in periodic potential with local interaction between two and/or three particles under off-diagonal confinement. The diagrams are constructed by Density Matrix Renormalization Group.

The phase diagrams reveal than the critical points take larger values as well as the local interaction between three particles increases. Adicionally, the distribution of the particles of the system under off-diagonal confinement is observed. Consequently, we obtain coexistence regions between Mott insulator and superfluid.

A mi madre.

Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer enormemente al profesor Jereson Silva por brindarme la oportunidad de ser parte del grupo de sistemas correlacionados el cual dirige. La orientación, enseñanzas y correcciones que dedicó en el trabajo fueron indispensables para mi crecimiento académico y personal.

Un especial agradecimiento a los miembros del grupo y a mis amigos por su cariño e invaluables consejos.

A la Universidad Nacional de Colombia por proporcionarme una excelente formación académica y por último quiero agradecer a mi familia, sin su apoyo y paciencia este trabajo no sería posible.

Contenido

Lista de Figuras	IV
1. Introducción	1
2. Modelo de Bose-Hubbard	4
2.1. Modelo de Hubbard	4
2.2. Modelo de Bose-Hubbard	6
2.2.1. Hamiltoniano de Bose-Hubbard	7
2.3. Sistemas Experimentales	11
2.3.1. Uniones Josephson	11
2.3.2. Helio Superfluido en un medio poroso	12
3. Gases bosónicos confinados en redes ópticas.	13
3.1. Confinamiento de átomos.	13
3.1.1. Redes ópticas	13
3.1.2. Confinamiento armónico.	16
3.1.3. Confinamiento No-Diagonal. [2]	19
3.1.4. El condensado de Bose-Einstein como superfluido. [23]	21
3.1.5. De superfluido a aislante de Mott.	24
4. Interacción multi-cuerpos.	27
4.1. Estado coherente.	27
4.2. Dinámica de una onda de materia.	28
4.3. Evidencia de la interacción entre muchos cuerpos.	30
5. Resultados y discusión.	34
5.1. Diagramas de fases de una red homogénea.	36
5.1.1. Interacción entre dos cuerpos.	36
5.1.2. Interacción entre tres cuerpos.	40
5.1.3. Interacción local entre dos y tres cuerpos.	44
5.2. Diagramas de fases con confinamiento no diagonal.	46
5.2.1. Interacción entre dos cuerpos.	47

5.2.2. Interacción entre tres cuerpos.	51
5.2.3. Interacción entre dos y tres cuerpos.	54
6. Conclusiones	56
7. Apéndice	58
7.1. Density Matrix Renormalization Group	58
7.1.1. Método de sistema infinito.	59
7.1.2. Método de sistema finito.	61
7.2. Transición de fase cuántica	62
7.2.1. Definición de Transición de Fase Cuántica.	62
Bibliografía	64

Lista de Figuras

2-1. Electrones en un cristal.	4
2-2. Ilustrando el modelo de Hubbard.	6
2-3. Diagrama de fase del Modelo de Bose-Hubbard.	10
2-4. Medida de $\frac{C_v}{T}$ del 4He con la Temperatura.	12
3-1. Redes ópticas y Geometría de la red.	14
3-2. Diagrama del modelo de Bose-Hubbard de un sistema bosónico en un red óptica con potencial externo.	16
3-3. Densidad del aislante de Mott con confinamiento diagonal.	17
3-4. Evolución de la densidad y compresibilidad local en función de la posición y el número de bosones.	18
3-5. Ilustrando el confinamiento DC y ODC	19
3-6. Densidad como función del potencial químico.	20
3-7. Imágenes de absorción del condensado de Bose-Einstein.	23
3-8. Imágenes de absorción de múltiples patrones de interferencia de ondas de materia.	25
4-1. Dinámica Cuántica de un estado Coherente	29
4-2. Imágenes de Absorción de la evolución dinámica de una onda de materia.	30
4-3. Interacción entre muchos cuerpos evidenciada a través de restauraciones de la fase cuántica.	31
4-4. Resultados experimentales de la evolución de la fase cuántica multiorbital.	33
5-1. Gap de un aislante de Mott.	35
5-2. Potencial químico contra el tamaño de la red ($t/U = 0.10$ y $\rho = 1$).	37
5-3. Potencial químico contra el tamaño de la red, ($t/U = 0.305$, $\rho = 1$).	38
5-4. Diagrama de fases de un sistema de bosones con interacción de dos cuerpos.	39
5-5. Lóbulo $\rho = 1$ destacando el comportamiento reentrante de la fase aislante.	40
5-6. Comportamiento del potencial químico con el tamaño de la red, considerando interacción entre tres cuerpos y $t/W = 0.05$	41
5-7. Comportamiento del potencial químico con el tamaño de la red e interacción entre tres cuerpos y $t/W = 0.17$	42

5-8. Diagrama de fases de un sistema de bosones ultrafríos con interacciones entre tres cuerpos.	43
5-9. Lóbulo $\rho = 1$ con interacción entre dos y tres cuerpos.	44
5-10. Diagrama del lóbulo aislante de Mott $\rho = 2$ para un sistema de bosones con diferentes valores de W/U	45
5-11. Perfiles de densidad y compresibilidad local de bosones con interacción entre dos cuerpos y confinamiento no diagonal.	48
5-12. Diagrama de fases de un sistema de bosones de tamaño $L = 80$ sitios con interacción entre dos cuerpos y confinamiento no diagonal.	49
5-13. Potencial químico contra el tamaño de la red para un sistema con interacción entre dos cuerpos y ODC, con $t/U = 0.05$	50
5-14. Perfiles de densidad para sistemas de bosones con interacción entre tres cuerpos y confinamiento no diagonal.	51
5-15. Diagrama de fases para un sistema de tamaño $L = 80$ sitios, interacción entre tres cuerpos y confinamiento no diagonal.	52
5-16. Potencial químico contra el tamaño del sistema con interacción entre tres cuerpos y ODC con $t/W = 0.05$	53
5-17. Diagrama de fases del modelo ODC con interacción entre dos y tres cuerpos para un sistema con $L = 80$ sitios ($U = 1$ y $W = 3$).	54
7-1. Resultado de unir dos bloques en el problema de la partícula en una caja.	59
7-2. Procedimiento esquemático para el algoritmo DMRG.	61
7-3. Energía en función del parámetro de acople.	62

1 Introducción

La física de sistemas bosónicos ha sido ampliamente estudiada a causa de los aportes que se han hecho al estado sólido y a la física de bajas temperaturas. En el año 1920, basado en la distribución de los bosones planteada por Satyendra Nath Bose, Einstein predijo el condensado de Bose-Einstein el cual fue observado experimentalmente hasta el año 1995[4]. El experimento se produjo con vapor de átomos de ^{87}Rb , enfriado con técnicas de evaporación y confinado con campos magnéticos; el condensado se reveló cuando apareció un pico de densidad que evidenciaba una fracción condensada de átomos ¹ la cual aumentaba cuando la temperatura (alrededor de 170 nK) disminuía. Este fenómeno es trascendental por su significado físico, en él se manifiesta la naturaleza cuántica de las partículas y el comportamiento de los sistemas cerca al cero absoluto.

A medida que la temperatura disminuye, la energía de las partículas desciende hasta la energía del estado base; en este punto se presentan las fluctuaciones cuánticas las cuales son descritas por el principio de incertidumbre de Heisenberg y dan lugar a las transiciones de fase. La primera transición de fase cuántica se observó en el año 2002 por Greiner et al. [5] con átomos de ^{87}Rb en una trampa magnética y sujetos a una red óptica. Allí se mostró el paso de la fase superfluida a la fase aislante de Mott la cual se caracteriza por ser incompresible.

Los bosones se mueven a través de la red mediante tunelamiento cuántico en donde la energía cinética se caracteriza por el parámetro de salto t , además se considera la interacción entre dos cuerpos cuya descripción en el Hamiltoniano se manifiesta por medio del término proporcional al parámetro U . De manera que si U es menor que t los bosones son libres de moverse a través de la red y se obtiene la fase superfluida. Por el contrario, si U es mayor que t , los bosones se localizan en los sitios de la red, creando un aislante de Mott el cual se caracteriza por tener un gap de energía.

Experimentalmente se confinan los átomos en una región finita del espacio, mediante un potencial de confinamiento armónico, el cual modifica el Hamiltoniano en un término. Por consiguiente el Hamiltoniano incluirá un potencial químico que cambia sitio a sitio

¹ $2,5 \times 10^{12}$ átomos $\times \text{cm}^3$

en forma de parábola, lo cual hace que el sistema no muestre estados aislantes de Mott incompresibles. En el 2010, Rousseau y colaboradores [2] proponen un nuevo tipo de confinamiento, llamado el confinamiento no diagonal (ODC)² el cual se basa en cambiar el parámetro de salto t en lugar del potencial químico μ , de tal forma que los bosones no tengan la posibilidad de salir del sistema porque el parámetro de salto es cero en los extremos y máximo en el centro.

Debido a que se ha demostrado experimentalmente que la interacción entre más de dos partículas es relevante, se estudia el modelo de Bose-Hubbard con interacción entre dos y/o tres cuerpos. En [3], Will y colaboradores muestran experimentalmente que la función de onda local depende del número de partículas que se encuentren en ese sitio y en consecuencia el parámetro de salto se ve modificado. Por el motivo que se acaba de señalar, es posible encontrar nuevas fases de sistemas de muchos cuerpos.

Por consiguiente, en este trabajo se estudia teóricamente el modelo de Bose-Hubbard por medio de la construcción de los diagramas de fases para un sistema que se encuentra sin confinamiento externo y con confinamiento no-diagonal. Adicionalmente, se considera la interacción entre más de dos cuerpos, lo cual modifica el Hamiltoniano en el término de interacción para incluir la interacción entre tres bosones, de tal forma que sea posible responder: ¿cuáles serían los cambios en el diagrama de fases de un sistema de bosones al considerar confinamiento no diagonal con el modelo de Bose-Hubbard?, ¿qué tan relevante es considerar la interacción entre más de dos partículas sin confinamiento externo o con ODC?, ¿cómo cambian los puntos críticos en el diagrama de fases bajo estas consideraciones? y ¿cómo se distribuyen las partículas en una red finita bajo ODC y con interacción entre dos o tres cuerpos?.

El espacio de Hilbert de sistemas de muchos cuerpos crece de forma exponencial al aumentar el tamaño del mismo, por tanto es necesario truncar el número de estados de la base escogiendo los más importantes. Así, el método matemático que se utiliza en el presente trabajo es el Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad como técnica de cálculo para encontrar las energías del estado base y así calcular el potencial químico.

El trabajo está organizado de la siguiente manera: en el capítulo 2 se exponen los fundamentos físicos como el modelo de Hubbard y el modelo de Bose-Hubbard, en donde se presenta el diagrama de fases de un sistema de bosones ultrafrío con interacción entre dos cuerpos sin potencial externo. Además se introducen algunos sistemas experimentales que se describen por este modelo. En el capítulo 3, se presenta la física del confinamiento

²Off-Diagonal Confinement

de sistemas: las redes ópticas, el confinamiento diagonal y el confinamiento no-diagonal; además se introduce el condensado de Bose-Einstein como un superfluido. En el capítulo 4 se exponen algunos resultados experimentales que dan cuenta de la importancia que tiene considerar interacción entre más de dos cuerpos. En el capítulo 5 se presentan los diagramas de fases con interacción entre dos o tres cuerpos y el confinamiento no diagonal. Por último, en el capítulo 6 se presentan las conclusiones.

2 Modelo de Bose-Hubbard

El modelo de Bose-Hubbard describe la física de sistemas compuestos por bosones que se encuentran confinados en un potencial periódico. En esta sección se presenta el modelo de Bose-Hubbard, desde el modelo matemático original propuesto por Hubbard para describir el comportamiento de electrones en un cristal, hasta adaptarlo a un sistema de bosones; donde los potenciales de interacción atómica pasan a ser pozos de potencial periódicos sin la restricción que rige a las partículas de espín semientero.

Adicionalmente se describe el diagrama de fases cualitativo del modelo de Bose-Hubbard; en él se resaltan las características más importantes como el gap de energía presente en la fase aislante de Mott o la posición de los puntos críticos.

2.1. Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard fue introducido por Hubbard, Gutzwiller y Kanamori ([6], [7]) y tiene como objetivo describir un sistema conformado por electrones en un cristal considerando estados de baja energía; en consecuencia, se recurre a un Hamiltoniano efectivo capaz de explicar las características principales de un fluido electrónico [8].

Inicialmente, se supone una red de átomos en la cual los electrones se encuentran localizados en orbitales atómicos, por tanto el Hamiltoniano del sistema está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{1}{2} \hat{V}_{int}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad (2-1)$$

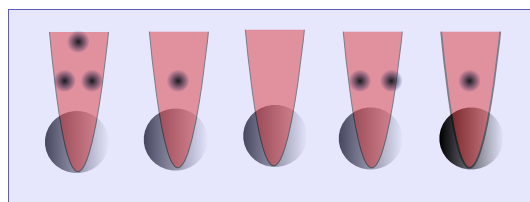


Figura 2-1: Ilustrando un cristal donde los electrones pasan a través de la red entre potenciales interatómicos.

donde $\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ describe la energía cinética de los electrones y $\hat{V}_{int}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ es el potencial a través del cual se mueven, producido por las partículas que conforman la red.

En forma de segunda cuantización el Hamiltoniano resulta:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \hat{H}_0 \Psi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \hat{V}_{int}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}'), \quad (2-2)$$

siendo $\Psi(\mathbf{r})$ el operador campo de fermiones. Por tanto el Hamiltoniano que describe el movimiento y las interacciones de los electrones a través de un cristal resulta:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} H_{ij}^{(0)} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{l,m,n,p} V_{lmnp} \hat{a}_{l\sigma}^\dagger \hat{a}_{m\sigma'}^\dagger \hat{a}_{n\sigma} \hat{a}_{p\sigma}, \quad (2-3)$$

donde $H_{ij}^{(0)}$ es el elemento de matriz de una partícula que se encuentra en los sitios i o j , $\hat{a}_{j\sigma}$ es el operador que aniquila una partícula en el sitio j con espín σ y V_{lmnp} son los elementos de la matriz de interacción entre dos partículas en los estados $|lm\rangle$ o $|pn\rangle$.

Además, se asume que la amplitud para que las partículas “salten” entre diferentes sitios de la red decae exponencialmente con la distancia, por tanto se considera que los electrones pasan únicamente a los vecinos más cercanos. Así, los elementos de la matriz que gobiernan el movimiento de los electrones en un cristal son:

$$H_{ij}^{(0)} = \begin{cases} \epsilon & i = j, \\ -t & i, j \text{ para los vecinos más cercanos,} \\ 0 & \text{en otros casos,} \end{cases} \quad (2-4)$$

donde ϵ es la energía que posee un electrón en un orbital atómico y t el parámetro de salto o parámetro de hopping. El elemento de matriz de salto entre sitios vecinos, generalmente esta dado por una integral de solapamiento de las funciones de onda con un potencial característico de la red. Cuando se considera interacción local entre dos electrones, el elemento de matriz de interacción esta dado por:

$$V_{lmnp} = \begin{cases} U & l = p = m = n, \\ 0 & \text{de otra forma.} \end{cases} \quad (2-5)$$

Así, el término de interacción se simplifica teniendo en cuenta la condición impuesta por el principio de exclusión $a_{j\sigma}^2 = 0$, es decir, el término de interacción se desvanece a menos que σ y σ' sean espines opuestos. Entonces el modelo de Hubbard puede ser escrito como:

$$\hat{H} = -t \sum_{j,\sigma} [\hat{a}_{j+\sigma}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma} + H.c.] + \epsilon \sum_{j,\sigma} \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}, \quad (2-6)$$

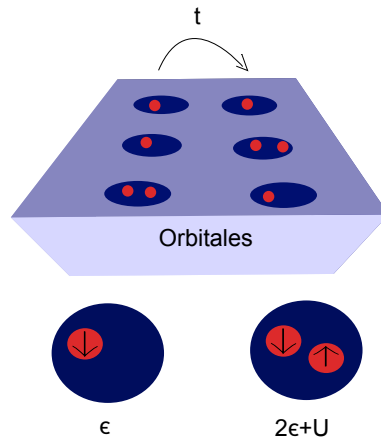


Figura 2-2: Ilustrando el modelo de Hubbard. La amplitud de salto de un electrón de un sitio a otro de la red es t , cuando dos electrones de espín opuesto comparten el mismo estado, su energía se ve incrementada en una cantidad U .

donde $\hat{n}_{j\sigma} = \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma}$ es el operador número de electrones de espín σ en el sitio j .

Este modelo predice, bajo grandes interacciones entre los electrones y aproximadamente un electrón por sitio una fase llamada aislante de Mott de la cual hablaremos más adelante. Hoy en día este modelo se utiliza para describir las transiciones de fase metal-aislante, superconductores en altas temperaturas entre otros.

2.2. Modelo de Bose-Hubbard

En la sección anterior se abordaron sistemas conformados por fermiones, pero es de nuestro interés los sistemas conformados por bosones. No es para menos que estos sistemas también sean un objetivo investigativo de gran impacto. Así como el Hamiltoniano de Hubbard modela a los electrones en movimiento a través de un cristal, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard describe los bosones bajo las mismas condiciones que los electrones sin la restricción que siguen las partículas de espín semientero. A partir de esto, es posible obtener las energías del estado base del sistema bosónico para estudiar las transiciones que pueden ocurrir.

Debido a que el espacio de Hilbert del sistema crece exponencialmente cuando el número de partículas aumenta, en el modelo de Bose-Hubbard se han utilizado diferentes técnicas de cálculo, tales técnicas involucran la simulación Monte-Carlo, aproximaciones de campo medio y teorías del Grupo de Renormalización. Este modelo se ha utilizado para describir sistemas del estado sólido como el comportamiento crítico del ^4He , las uniones Josephson y los átomos en redes ópticas.

A continuación se aborda el Hamiltoniano de Bose-Hubbard y se introduce el diagrama de fases del modelo donde se muestran las fases aislante de Mott y superfluida cuya transición ha sido observada experimentalmente con átomos confinados en redes ópticas tridimensionales [5].

2.2.1. Hamiltoniano de Bose-Hubbard

Se introduce el Hamiltoniano de Bose-Hubbard en segunda cuantización el cual describe la física de átomos bosónicos en un potencial de atrapamiento externo. En el ensamble gran-canónico el Hamiltoniano resulta:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{lo}(\mathbf{r}) \right) \hat{\Phi}(\mathbf{r}) + (V(\mathbf{r}) - \mu) \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Phi}(\mathbf{r}) \quad (2-7)$$

$$+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}') V_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Phi}(\mathbf{r}) \hat{\Phi}(\mathbf{r}'),$$

donde $\hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r})$ es el operador de campo bosónico el cual crea un átomo en la posición \mathbf{r} , $V_{lo}(\mathbf{r})$ es el potencial de interacción local, $V(\mathbf{r})$ denota cualquier potencial externo (como una trampa magnética) que además varía lentamente con la red, μ es el potencial químico y $V_{at}(\mathbf{r})$ es el potencial de interacción entre las partículas.

La función de onda $\Phi(\mathbf{r})$ de un bosón que se encuentra en un sitio de la red, se describe por medio del teorema de Bloch el cual afirma que las funciones de onda deben ser funciones periódicas de la posición, moduladas por una onda plana porque dicha función debe describir un estado simultáneo del Hamiltoniano y el operador traslación.

Las funciones de onda de los bosones localizados presentan una “fuga” fuera de las dimensiones de los pozos de potencial dando lugar al tunelamiento de las partículas hacia otros sitios de la red. Por tanto, los elementos de la matriz del Hamiltoniano presentan valores diferentes de cero en la diagonal (los cuales se consideran iguales) y elementos $(-\Delta)$ fuera de la diagonal.

Los autovalores resultantes del Hamiltoniano forman una banda continua de energía de $E_0 - 2\Delta$ a $E_0 + 2\Delta$, llamada la zona de Brillouin, donde E_0 es el autovalor del autoket de energía en el sitio n . Con el objetivo de estudiar el estado base de un sistema de bosones, consideramos los orbitales de Wannier w_0 los cuales pertenecen a la banda de Bloch más baja:

$$\Psi(\mathbf{r}) \simeq \sum_{i=1}^L w_0(\mathbf{r} - ia) \hat{b}_i, \quad (2-8)$$

donde a es el parámetro de red. La renormalización en el modelo de Bose-Hubbard se lleva a cabo con la anterior aproximación en la cual no se consideran bandas energéticas más altas.

La interacción U es la superposición de dos funciones de onda con una amplitud que es una función complicada de la posición, sin embargo, es posible considerar que, al tratar bosones en el estado base en una red, la longitud de onda térmica de de Broglie es mucho más pequeña que la longitud efectiva de los potenciales interatómicos, de tal forma que la dispersión más relevante será cuando los bosones “ocupen” el orbital s . Así, el potencial interatómico se puede escribir como un potencial de contacto o un pseudopotencial dado por:

$$U_0(\mathbf{r}) \approx \frac{4\pi a_s \hbar}{m} \delta(\mathbf{r}), \quad (2-9)$$

con a_s la longitud de dispersión y m la masa de un átomo.

Para completar la forma general del Hamiltoniano de Bose-Hubbard, la ecuación 2-8 se introduce en el Hamiltoniano 2-7, donde se considera que las partículas se mueven únicamente a los sitios vecinos más cercanos:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i + \sum_i (V_i - \mu) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i, \quad (2-10)$$

con

$$t = - \int d\mathbf{r} w_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_{lat}(\mathbf{r}) \right) w_0(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{i+1}), \quad (2-11)$$

$$U = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d\mathbf{r} |w_0(\mathbf{r})|^4, \quad (2-12)$$

$$V_i = V(\mathbf{r}_i). \quad (2-13)$$

El primer término en el Hamiltoniano incluye el parámetro de salto t el cual indica una medida de la energía cinética del sistema. En este término la notación $\langle i, j \rangle$ indica la suma entre los vecinos más cercanos y \hat{b}_i es el operador que aniquila un bosón en el sitio i . El segundo término determina la energía de interacción del sistema la cual es proporcional al parámetro U y cuya función es describir la interacción local y repulsiva entre dos cuerpos. El tercer término en el Hamiltoniano tiene en cuenta la energía externa al sitio i debido a un potencial externo $V(\mathbf{r})$.

Cuando consideramos el Hamiltoniano en el ensamble canónico con interacción entre dos cuerpos sin potencial externo, la ecuación resulta:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (2-14)$$

la cual es la forma más simplificada del Hamiltoniano pero de la misma forma, predice las fases aislantes de Mott y superfluida.

Para estudiar el diagrama de fases del modelo de Bose-Hubbard a temperatura cero Kelvin mediante el Hamiltoniano 2-14, se considera una red de tamaño L ; cuando $t = 0$, la energía cinética de los bosones es cero y no tienen la posibilidad de pasar a otros sitios de la red; en consecuencia, las partículas se reorganizan de tal manera que n es el número de bosones por sitio necesarios para minimizar la energía [9], es decir:

$$\varepsilon(n) = \frac{1}{2} U n(n-1), \quad (2-15)$$

donde $\varepsilon(n)$ es la energía en un sitio de la red. Por tanto, la energía requerida para introducir una partícula se describe por medio del potencial químico de la siguiente forma:

$$\mu_p = \varepsilon(n+1) - \varepsilon(n) = \frac{1}{2} U n(n+1) - \frac{1}{2} U n(n-1) = U n, \quad (2-16)$$

donde μ_p es el potencial químico para agregar una partícula al sistema cuando $t = 0$, mientras que

$$\mu_h = \varepsilon(n) - \varepsilon(n-1) = \frac{1}{2} U n(n-1) - \frac{1}{2} U (n-1)(n-2) = U(n-1), \quad (2-17)$$

es el potencial químico para crear un agujero en el sistema.

Así, para cualquier valor de n diferente de cero, el potencial químico toma valores entre $n-1 < \mu/U < n$ y el sistema tiene exactamente n partículas por sitio en este intervalo. Además, el sistema con $n-1$ partículas es energéticamente idéntico al sistema con n partículas, en otras palabras, el sistema cuando $t = 0$ se encuentra en un estado degenerado.

Cuando t no es suficiente para superar la energía de interacción entre los bosones, existirá una región en forma de lóbulos en el plano $\mu-t$ con un número fijo de partículas por sitio (ver figura 2-3). La región en el interior de los lóbulos se llama la fase aislante de Mott y se caracteriza por poseer gaps de energía, compresibilidad cero ($\frac{d\rho}{d\mu} = 0$) y una densidad entera.

En la fase aislante de Mott se pueden encontrar tres tipos de excitación del sistema: la primera es añadir una partícula al sistema donde se requiere una energía $\delta E_p = \mu_p$; la segunda es remover una partícula del sistema, dicho proceso requiere una energía de $\delta E_h = \mu_h$ y la última consiste en retirar una partícula de un sitio de la red para dejarla en

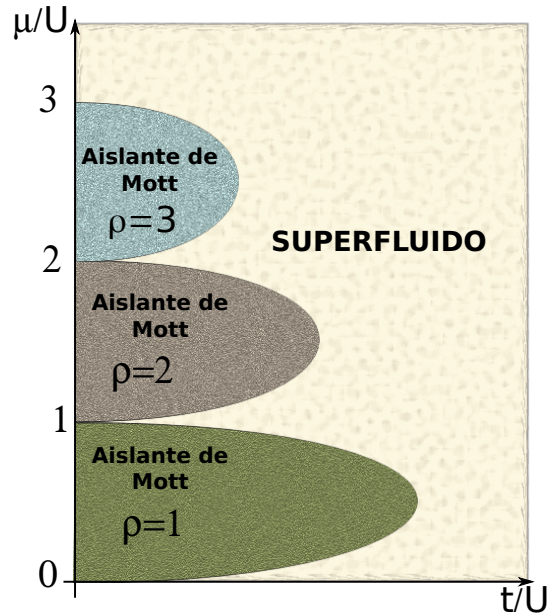


Figura 2-3: Diagrama de fase del Modelo de Bose-Hubbard.

otro sitio de la misma. Esta última está caracterizada por el gap $\Delta = \mu_p - \mu_h$, el cual es la energía necesaria para crear una excitación y es diferente de cero en la fase aislante de Mott e igual a cero en la fase superfluida.

En la fase superfluida, el parámetro de salto t es grande comparado con la energía de interacción local U , lo cual da lugar a que las partículas se muevan libremente a través de la red. Al mismo tiempo, el estado del sistema de muchos cuerpos se describe por medio de una función de onda coherente característica de un condensado de Bose-Einstein, donde los bosones ocupan la banda de Bloch más baja.

De este modo, el diagrama de fases del modelo de Bose-Hubbard describe la transición entre la fase aislante de Mott y la fase superfluida de tal forma que existen dos caminos para realizar la transición en un sistema de bosones confinados en una red, la primera es cambiar el número de partículas que lo componen gradualmente o que el valor del parámetro de salto t aumente para un valor fijo de la densidad.

2.3. Sistemas Experimentales

En esta sección se presentan sistemas reales compuestos por bosones cuya física ha sido descrita por el modelo de Bose-Hubbard. Dos de los más importantes son las uniones Josephson y el comportamiento del ${}^4\text{He}$ en nanoporos, los cuales se pueden modelar como un sistema de bosones en una red de potencial.

2.3.1. Uniones Josephson

Las uniones Josephson están compuestas por granos hechos de material superconductor. En un material superconductor, los electrones con espines opuestos forman pares de Cooper los cuales obedecen la estadística de Bose. Dos granos -de medida micrométrica- están separados por una barrera de material aislante. Cada grano tiene una fase superconductor bien definida θ_j . El operador que mide el número de pares de Cooper en el grano j esta dado por $\hat{N}_j = \hat{Q}_j/(2e)$ donde \hat{Q}_j mide el desequilibrio de la carga en el grano y $(2e)$ es la carga del par de Cooper [10]. La energía electrostática del grano cargado es $E_C \hat{N}_j^2/2 - \delta\mu \hat{N}_j$ siendo $E_C = 4e^2/C$ y $\delta\mu = V_g/2e$, donde C es la capacidad del grano y V_g la barrera de potencial. Este sistema puede ser descrito por el Hamiltoniano de la ecuación 2-10 utilizando la siguiente representación:

$$\hat{b}_j^\dagger = \sqrt{\hat{n}_j} e^{-i\hat{\theta}_j} \quad (2-18)$$

y

$$\hat{b}_j = \sqrt{\hat{n}_j} e^{i\hat{\theta}_j},$$

donde \hat{n}_j es el operador número de partículas en un sitio y $\hat{\theta}_j$ el operador fase de tal forma que es el conjugado canónico de \hat{n}_j , $[\hat{n}_j, \hat{\theta}_j] = i\delta_{ij}$. Por tanto, luego de cambiar la representación, el Hamiltoniano resultante es el llamado modelo de fase y esta dado por:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^L \left[-E_J \cos(\hat{\theta}_j - \hat{\theta}_{j+1}) + \frac{E_C}{2} \hat{N}_j^2 - \delta\mu \hat{N}_j \right], \quad (2-19)$$

donde $E_J = 2N_0 t$ y $E_C = U$. Este modelo exhibe la transición de fase aislante-superconductor a temperatura cero para el caso $V_g = 0$. El régimen aislante es el llamado bloqueo de Coulomb de tunelamiento de pares de Cooper (CBPCT), esta fase se da para un llenado conmesurado o un número entero de partículas por sitio, mientras que para llenados parciales (semienteros) se obtiene la fase superfluida.

2.3.2. Helio Superfluido en un medio poroso

Desde 1990 han existido los materiales porosos con poros de diámetros de 1 a 5 nanómetros. Estos son sintetizados de silicato y forman grandes cadenas de poros en una red de panel. Átomos de ^4He son confinados en dirección transversal a la red y los poros pueden interactuar con otros poros por la superficie libre. Para temperaturas que son bajas comparadas a la escala de energía del confinamiento transversal, se espera que los átomos de ^4He presenten las propiedades de un sistema bosónico unidimensional[10]. Con una velocidad de fonones del orden de 200m/s y poros de diámetro $d = (18 \pm 2)\text{\AA}$ la cadena de bosones empezará a aparecer a una temperatura de aproximadamente 1K .

Wada et al. [11] midió el calor específico del ^4He en nanoporos de 18\AA de diámetro, en donde se nota una contribución lineal para temperaturas menores que 0.35K , (ver Figura 2-4).

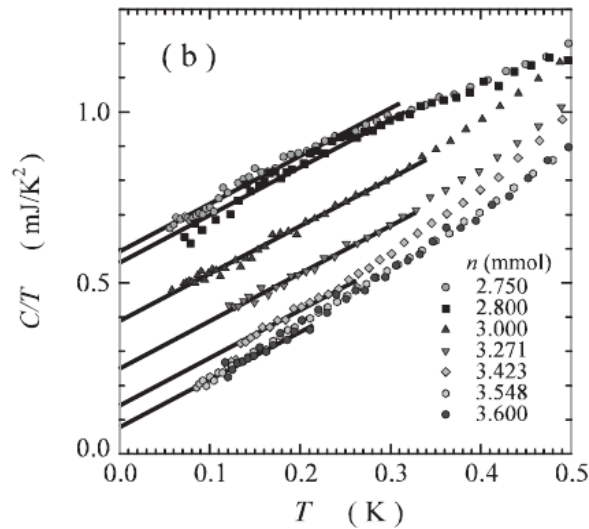


Figura 2-4: Medida del calor específico sobre la temperatura del ^4He en nanoporos de 18\AA de diámetro

Uno de los resultados que se resaltan de estas mediciones es que para altas densidades, la velocidad de los fonones es encontrada divergente, lo cual corresponde a una alta interacción entre los átomos de ^4He resultando en un fase aislante de Mott unidimensional. También se ha conocido experimentalmente que estos sistemas presentan la fase superfluida para temperaturas aproximadas de 1K [12].

3 Gases bosónicos confinados en redes ópticas.

3.1. Confinamiento de átomos.

Cuando se enfría un sistema de átomos, la velocidad de estos disminuye. Esto ha sido de gran utilidad porque para muchos fines investigativos, el estudio de átomos con poca energía cinética es una ventaja experimental.

Para enfriar átomos es necesario confinarlos y esto se lleva a cabo aplicando un campo magnético fuerte generado por dos bobinas, de tal forma que en el centro del montaje el campo magnético se desvanece permitiendo que las partículas más energéticas escapen. Luego el sistema se ilumina con luz láser de tal forma que los rayos interfieren entre sí creando una red de potencial.

Las dos técnicas anteriores hacen que la energía de los átomos dependa de la posición en la que se encuentran y lo anterior se ve reflejado en el Hamiltoniano que describe el estado del sistema; además con los procedimientos anteriores, se ha logrado el régimen de muy bajas temperaturas ($\approx nK$). A continuación se introduce la física básica de las redes ópticas, el confinamiento armónico y el confinamiento no-diagonal.

3.1.1. Redes ópticas

Las redes ópticas son arreglos microscópicos de potenciales debido a la interferencia de varios rayos de luz con la materia. Estas eran usadas inicialmente en la observación de difracción atómica [13] [14] y la interferometría atómica [15]. Mientras que lo anterior sucedía en el contexto de la física atómica, otros estaban explorando el enfriamiento de átomos en trampas magnéticas anhelando el cero absoluto.

El primer experimento en el cual los átomos fueron enfriados por medio de redes ópticas fue realizado por Hemmerich [16] [17]. Sin embargo, se dieron cuenta que enfriar átomos únicamente con redes ópticas era una técnica difícil, por tanto se adoptó el método en el cual se enfría el sistema en una trampa magnética para luego cargarlo a una red óptica.

Este procedimiento experimental de enfriamiento fue de gran utilidad porque la dinámica de un átomo en una red óptica es muy similar a la dinámica de un electrón en cristales,

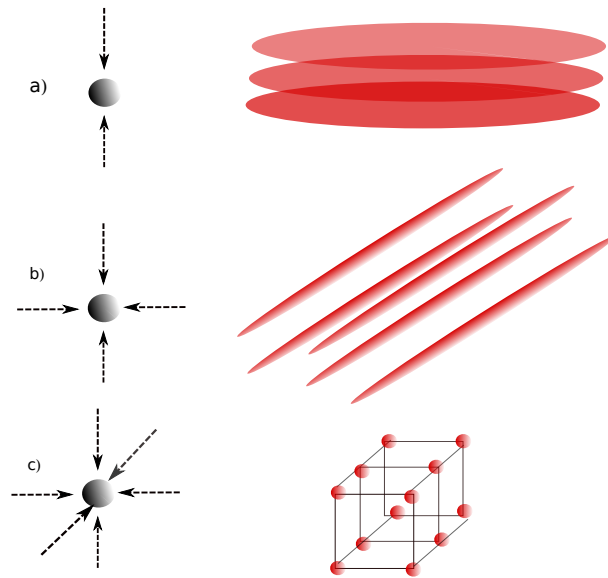


Figura 3-1: Redes ópticas y Geometría de la red. Las flechas negras indican la dirección de los rayos láser. a) Red unidimensional con geometría en dos dimensiones. b) Red bidimensional con geometría en una dimensión y c) Red en tres dimensiones con geometría cero dimensional.

además presenta ventajas adicionales como la ausencia de defectos de red y el alto grado de control experimental. Muchos experimentos han sido desarrollados sobre estos potenciales mostrando características esenciales de los cristales como la estructura de bandas [18][19], la dispersión de Bragg, oscilaciones de Bloch, interferometría de ondas de materia, superfluidez y caos cuántico.

Los conceptos básicos que permiten crear redes ópticas vienen del estudio del cambio en la energía de un átomo en presencia de un campo electromagnético. Para átomos neutros, hay dos formas de que éste interactúe con la luz: la forma conservativa y la disipativa. La primera tiene que ver con la interacción entre el momento dipolar inducido del átomo y el campo externo, el cual produce un cambio en la energía potencial llamado cambio ac-Stark. La interacción disipativa conlleva a la absorción de fotones para su consecuente emisión espontánea.

Cuando los tiempos de emisión son suficientemente grandes, es posible despreciar este proceso y considerar que los cambios en la energía de los átomos formarán potenciales periódicos.

Cambio AC-Stark [20]

Se considera un átomo como un sistema de dos niveles, uno base $|g\rangle$ y otro excitado $|e\rangle$ con una diferencia entre estos estados de $\hbar\omega_0$, en un volumen V e interactuando con

un campo electromagnético monocromático de frecuencia $\omega = 2\pi\nu$. Se considera que la observación se realiza en un tiempo suficientemente corto de tal forma que la emisión espontánea se puede despreciar.

El Hamiltoniano no acoplado está dado por:

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega_0|e\rangle\langle e| + \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2), \quad (3-1)$$

donde \hat{a} es el operador aniquilación, en este caso de fotones. Si consideramos que $\gamma = \omega - \omega_0$ es $|\gamma| \ll \omega_0$, entonces el estado de un átomo en $|g\rangle$ y N fotones en el campo tiene una energía similar al sistema conformado por $N - 1$ fotones y un átomo en $|e\rangle$. Por tanto la diferencia de energías resulta: $E_1 - E_0 = -\hbar\gamma$. Llamaremos $|0\rangle = |g, N\rangle$ y $|1\rangle = |e, N - 1\rangle$. Bajo la aproximación dipolar, se asume que la variación espacial del campo electromagnético es pequeño comparado con la función de onda atómica. Así, el Hamiltoniano de acoplamiento, denotado por \hat{H}_1 es:

$$\hat{H}_1 = -\vec{d} \cdot \vec{E} = (|e\rangle\langle g|e^{i\omega_0 t} + |g\rangle\langle e|e^{-i\omega_0 t}) \left(\frac{\hbar\Omega^*(\vec{x})}{2} \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} + \frac{\hbar\Omega(\vec{x})}{2} \hat{a} e^{-i\omega t} \right), \quad (3-2)$$

donde $\Omega(x) = -2\sqrt{\frac{\hbar\omega\langle N \rangle}{2\hbar V}} u(\vec{x}) \vec{\epsilon} \cdot \vec{d}$ es la frecuencia de Rabi, con $\vec{\epsilon}$ siendo el vector de polarización unitario del campo, \vec{d} el momento dipolar del átomo y $u(\vec{x})$ el módulo del campo evaluado en la posición x . En la aproximación de onda rotante, válida en el límite $|\gamma| \ll \omega_0$, no se considera el proceso con una fase rápidamente oscilante, $e^{\pm i(\omega_0 + \omega)t}$ y únicamente se tienen en cuenta las frecuencias cercanas a la resonancia. Entonces el Hamiltoniano de interacción es reducido a:

$$\hat{H}_1 \approx \left(\frac{\hbar\Omega(\vec{x})}{2} |e\rangle\langle g| \hat{a} e^{i\gamma t} + \frac{\hbar\Omega^*(\vec{x})}{2} |g\rangle\langle e| \hat{a}^\dagger e^{-i\gamma t} \right). \quad (3-3)$$

Físicamente, los procesos de resonancia tienen que ver con la absorción o emisión de un fotón. Cuando $|\gamma|$ es grande, $|\gamma| \gg \Omega$, el efecto de las interacciones sobre los estados, $|0\rangle$ y $|1\rangle$, puede ser determinado con teoría de perturbaciones de segundo orden. En este caso el cambio de energía $E_{0,1}^2$ es dado por:

$$E_{0,1}^2 = \pm \frac{|\langle 1|\hat{H}_{int}|0\rangle|^2}{\hbar\gamma} = \pm \hbar \frac{|\Omega(\vec{x})|^2}{4\gamma}, \quad (3-4)$$

donde los signos más y menos son para los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ respectivamente. Este es el cambio ac-Stark. Cuando los átomos se encuentran en el estado base, la energía de los átomos cambia de acuerdo al cambio Stark $\hbar \frac{|\Omega(\vec{x})|^2}{4\gamma}$, el cual define el potencial óptico. Adicionalmente, si en lugar de interactuar con un campo eléctrico monocromático, los átomos son iluminados con una superposición de rayos láser, los rayos interfieren y el patrón resulta en un potencial periódico o en una red óptica.

3.1.2. Confinamiento armónico.

Los experimentos que han sido desarrollados sobre sistemas bosónicos se realizan sujetos a un confinamiento externo debido a la necesidad de tener atrapado el sistema. En muchos experimentos se han trabajado trampas magnéticas, las cuales se introducen en el Hamiltoniano como una modificación cuadrática del potencial químico, es decir, μ es una función de la posición que describe una parábola. De aquí el nombre de confinamiento armónico.

Jaksch y colaboradores [21] hicieron el estudio de la transición de fase de aislante de Mott a superfluido considerando en el Hamiltoniano un término que describe el confinamiento armónico externo:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (3-5)$$

donde los operadores $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ cuentan el número de bosones en el sitio i de la red; de nuevo usamos U como la amplitud de la interacción por sitio entre dos partículas y t el parámetro de salto entre sitios adyacentes i, j . Adicionalmente $\epsilon_i = \int d^3x V_T(\mathbf{r}) |w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^2 \approx V_T(\mathbf{r}_i)$ describe la energía externa de cada sitio i la cual varía lentamente a través del sistema (ver figura 3-2).

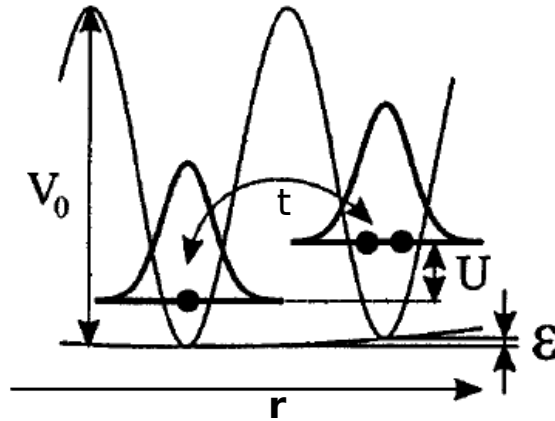


Figura 3-2: Diagrama del modelo de Bose-Hubbard de un sistema bosónico en un red óptica con potencial externo. Tomado de [21].

Los resultados que son de relevancia en el trabajo de Jaksch se hicieron por medio de cálculos de campo-medio para una configuración 2D. Para identificar el aislante de Mott se calculó la densidad o el número de ocupación $\rho_i = \langle \hat{n}_i \rangle$ por sitio.

La figura 3-3 muestra la densidad $\rho(x, y)$ de un sistema de bosones en una red óptica con un potencial armónico 2D dado por $V_T(x, y) = t(x^2 + y^2)/a^2$. Para los parámetros $U = 35t$ y $\mu = 50t$ se encontró un aislante de Mott; este muestra una fase con dos átomos por sitio en el centro de la trampa rodeado por una fase superfluida y luego un anillo de fase aislante $\rho = 1$. Cuando ϵ_i tiende a ser mayor, es posible observar la fase aislante con densidad global $\rho = 2$, cuyo resultado ya es conocido para una red que no presenta confinamiento externo.

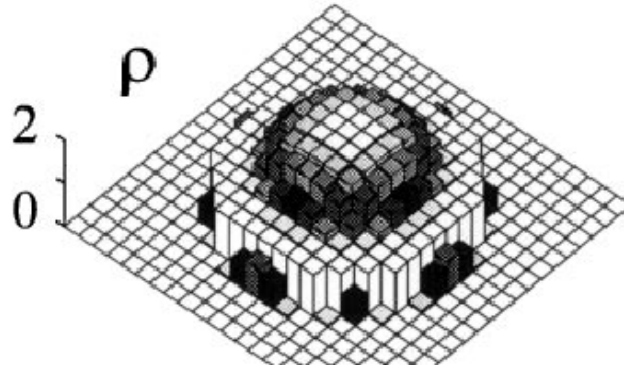


Figura 3-3: Densidad del aislante de Mott con confinamiento diagonal. Tomado de [21]

Una investigación posterior fue realizada por el equipo de Batrouni y Rousseau [22] para un sistema unidimensional de bosones en un potencial cuadrático externo, cuyos resultados muestran de nuevo una fase en la cual la densidad local cambia de sitio en sitio. El Hamiltoniano que emplearon resultó:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + V_c \sum_i (i - L/2)^2 \hat{n}_i, \quad (3-6)$$

donde el último término del Hamiltoniano describe un potencial cuadrático proporcional a V_c , cuyo valor es la curvatura de la parábola de tal forma que los bosones no pueden escapar a las barreras en los extremos de la red. En este artículo se trabajó por medio de simulación Monte-Carlo cuántico en el ensamble canónico. El potencial químico se obtuvo derivando la energía con respecto al número de partículas $\frac{\partial E}{\partial N}$ y debido a la presencia del potencial de confinamiento se hizo necesario medir la densidad local ρ_i y la compresibilidad local $k_i = \frac{\partial \rho_i}{\partial \mu_i} = \beta [\langle \hat{\rho}_i^2 \rangle - \langle \hat{\rho}_i \rangle^2]$. La figura 3-4 muestra la evolución de la densidad local ρ_i como una función de la posición y del número de bosones donde la curvatura de la trampa es $V_c = 0.008$, el tamaño de la red es $L = 100$ sitios.

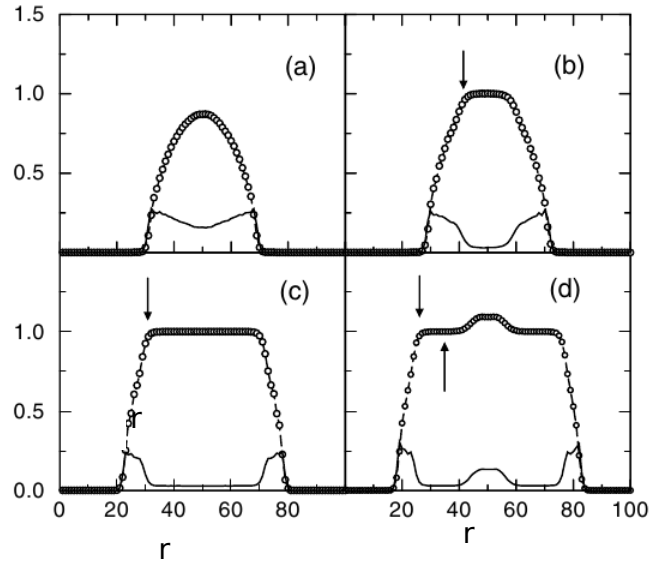


Figura 3-4: Evolución de la densidad local en función de la posición y el número de bosones. Los círculos indican la densidad local mientras que la línea sólida indica la compresibilidad local, los valores de llenado son: a) 25, b) 33, c) 50 y d) 60. Tomado de [22].

El potencial externo redistribuye las partículas de tal modo que para un llenado pequeño estas se mueven hacia el centro de la red creando una perfil superfluido. Como es de esperar, a medida que aumenta el número de partículas se forma un aislante de Mott en el centro de la red donde la compresibilidad toma un valor muy pequeño; pero con un valor más grande del llenado, la fase aislante inicialmente creada en el centro de la red, toma valores de la compresibilidad diferentes de cero y evidentemente no se forma la fase aislante de Mott pura con 100 bosones.

Los anteriores estudios demuestran que un confinamiento de tipo diagonal¹ o con un potencial armónico externo no presenta la fase aislante de Mott global ni las características

¹Como se observa en las ecuaciones 3-5 y 3-6, los elementos de la matriz del Hamiltoniano que corresponden al confinamiento armónico se ubican únicamente en la diagonal de la matriz; los elementos fuera de la diagonal, en este caso interesan únicamente al término de la energía cinética que describe el tunelamiento de las partículas. Por esta razón al confinamiento armónico también se le conoce como confinamiento diagonal o DC.

que esto conlleva como la densidad entera en todo el sistema, la compresibilidad local cero y la presencia del gap de energía.

3.1.3. Confinamiento No-Diagonal. [2]

En la sección anterior se estudió el confinamiento armónico cuyo Hamiltoniano de Bose-Hubbard se ve alterado como en las ecuaciones 3-5 ó 3-6 y cuyos resultados no reproducen la física del modelo de Bose-Hubbard, es decir, con el modelo DC la fase aislante de Mott es compresible sin el gap de energía característico (ver figura 3-5).

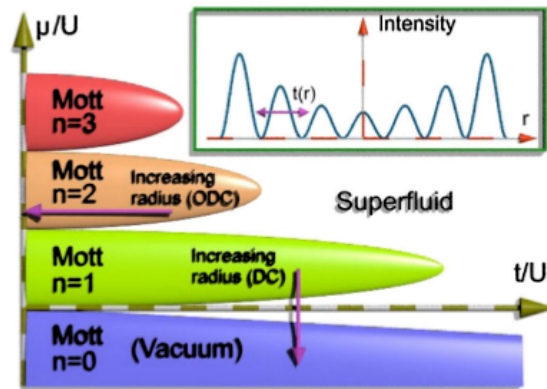


Figura 3-5: Las flechas muestran dos posibles formas de confinamiento del sistema. El confinamiento DC disminuye el potencial químico μ lo cual hace pasar el sistema a través de las dos fases. El confinamiento no diagonal (ODC) es creado disminuyendo el parámetro de salto t y manteniendo el sistema en un lóbulo de fase aislante. El pequeño cuadro en la gráfica muestra una propuesta experimental para obtener un parámetro de salto decreciente t por medio del crecimiento en la intensidad de la red óptica cuando se mueve desde el centro de la red hasta el exterior. Tomado de [2].

Con el confinamiento DC, el cambio espacial del potencial químico hace que el sistema se encuentre simultáneamente en varias fases como se observa en la figura 3-5, donde una línea vertical a lo largo del diagrama muestra la variación de μ pasando de fase aislante a fase superfluida para un parámetro de salto fijo. Por tanto, Rousseau y colaboradores en [2] proponen un nuevo confinamiento no diagonal ODC (Off-Diagonal Confinement) el cual es espacialmente inhomogéneo. En [2], para confinar los átomos se utiliza el parámetro de hopping, el cual es de esperar que se anule en los extremos del sistema. Esto lleva a pensar en la posibilidad de crear un tipo de confinamiento con t inhomogéneo que se anule en los extremos.

Así, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard se verá modificado de la siguiente forma:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} [(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + H.c.)] + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1). \quad (3-7)$$

Donde la suma se realiza sobre el intervalo $[0; L - 1]$, con L el número de sitios en la red y la notación $\langle i, j \rangle$ se restringe a los primeros vecinos. Además el parámetro de salto esta dado por:

$$t_{ij} = t(i + j + 1)(2L - i - j - 1)/L^2, \quad (3-8)$$

con un valor máximo de t en el centro de la red ($t_{L/2-1, L/2} = t$) y el cual se desvanece en los extremos ($t_{-1,0} = t_{L-1,L} = 0$). En dicho trabajo, se solucionó el modelo por medio de simulaciones de Monte-Carlo cuánticas, en este se considera un sistema de tamaño finito y se asume como parámetro de control el potencial químico μ , es decir, se trabajó en el ensamble gran-canónico. Para hacer una comparación con el modelo DC, en la figura 3-6 se muestran los resultados aplicando ODC y DC. Para este último se utilizó como confinamiento armónico la función $B \sum_i (i - L/2)^2 n_i$ con $B=0.008$ en un sistema de tamaño $L = 100$ sitios.

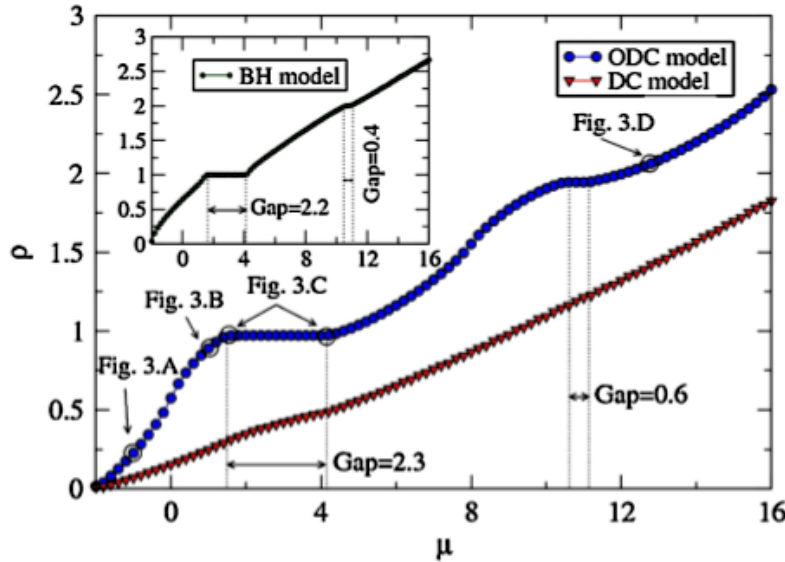


Figura 3-6: Densidad como función del potencial químico para $U = 8$ y $B=0.008$. El modelo con ODC, expone los gaps de Mott en llenados conmesurados como en el modelo original. Los resultados aplicando DC no muestran una densidad entera ni un gap de energía para entrar y salir de esta fase. Tomado de [2].

La figura 3-6 presenta los resultados obtenidos por Rousseau para la densidad y el potencial químico de una cadena de bosones con ODC. Los resultados obtenidos por el DC

exponen un aumento en la densidad con el aumento en el potencial químico sin presentar una fase aislante de Mott; evidentemente la compresibilidad local no toma el valor cero. A diferencia de lo anterior, los resultados con ODC son muy similares al modelo sin potencial externo, en estos se observan los gaps de energía y el valor entero en la densidad. Adicionalmente, los gaps disminuyen si la densidad aumenta: para densidad $\rho = 1$ el gap de la fase aislante es $2.3U$ mientras que para la densidad $\rho = 2$ el gap de energía toma un valor de $0.6U$. El anterior resultado refleja lo expuesto por el diagrama de fases para una red homogénea de bosones, el cual se caracteriza por la disminución de la región aislante de Mott cuanto la densidad del sistema aumenta.

3.1.4. El condensado de Bose-Einstein como superfluido. [23]

El fenómeno de la condensación de Bose-Einstein fue predicho por Einstein en 1925 basándose en el método para derivar el espectro del cuerpo negro introducido por Satyendra Nath Bose. El trabajo de Einstein fue proponer que una cierta fracción de átomos de un sistema de bosones, enfriado bajo cierta temperatura crítica T_c , ocuparía el estado cuántico más bajo. Los átomos con temperatura T y masa m pueden ser considerados como un paquete de ondas mecánico-cuántico que tiene una extensión espacial del orden de la longitud de onda de de Broglie $\lambda_{dB} = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$. Cuando la distancia entre los átomos es comparable con λ_{dB} , los paquetes de onda de cada partícula se sobrelapan [24].

No fue sino hasta el 29 de septiembre de 1995, que el equipo de trabajo dirigido por Eric Cornell y Carl Wieman (entre otros grupos), obtuvo experimentalmente el condensado de Bose-Einstein, [4].

El principal obstáculo para obtener el condensado de Bose era el proceso de enfriamiento. Varios grupos de investigación aplicaron técnicas como evaporación por radio frecuencia y trampas magnéticas para obtener temperaturas entre milikelvin y nanokelvin. Además usaron átomos de diversos elementos lo cual les permitió apreciar que para algunos sistemas fuertemente interactuantes, como el 4He , es muy difícil obtener el condensado de Bose-Einstein. Utilizando átomos de ^{87}Rb y ^{23}Na el equipo obtuvo la primera evidencia experimental del condensado de Bose-Einstein.

El parámetro de orden con el cual se describe el condensado de Bose es la función de onda:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n_0(\mathbf{r}, t)} e^{iS(\mathbf{r}, t)}, \quad (3-9)$$

donde S denota la fase y $n_0 = |\phi_0|^2$ es la densidad condensada, es decir, el número de partículas que se encuentran en esta fase. Por tanto, en el estado base la densidad total se puede escribir como:

$$n^*(\mathbf{r}, t) = n_0(\mathbf{r}, t) + n(\mathbf{r}, t) \quad (3-10)$$

donde $n(\mathbf{r}, t)$ es la densidad del gas, la cual es despreciable para bajas temperaturas y baja interacción entre partículas ².

Cuando el sistema se encuentra atrapado en un potencial armónico: $V_{ext} = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$, se ha encontrado que la temperatura crítica cumple la siguiente relación: $k_B T_c = 0.94 \hbar \omega_{ho} N^{1/3}$, con $\omega_{ho} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ y N el número de partículas, por consiguiente la fracción condensada obedece³:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right), \quad (3-11)$$

para $T < T_c$.

La ecuación de Gross-Pitaevskii y el rol de la fase

Para estudiar un poco más el comportamiento del BEC, es muy útil la matriz densidad:

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \rangle, \quad (3-12)$$

donde la función $\Psi(\mathbf{r})$ esta escrita en términos de los operadores creación y destrucción: $\Psi(\mathbf{r}) = \hat{a}_0 \varphi_0(\mathbf{r}) + \sum_{i \neq 0} \hat{a}_i \varphi_i(\mathbf{r})$, de tal forma que en $T \sim 0$, $\Psi(\mathbf{r}) = \hat{a}_0 \varphi_0(\mathbf{r})$ y todas las partículas ocupan el mismo estado φ_0 determinado por la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano de una partícula $-\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V_{ext}$, por tanto la matriz densidad resulta: $n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N \varphi_0^* \varphi_0$.

Para temperaturas finitas existirá el término adicional $\sum_{i \neq 0} n_i \varphi_i^* \varphi_i$ donde $n_i = (\exp \beta(\epsilon_i - \mu) - 1)^{-1}$ es el número de ocupación y ϵ_i son las energías de excitación de cada partícula en el estado excitado φ_i .

Así, la ecuación del parámetro de orden puede ser derivada de la ecuación de Heisenberg para el operador campo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] = \left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (3-13)$$

²El condensado de Bose ocurre para gases diluidos o en ausencia de fuerzas atractivas. Por lo anterior, es muy difícil obtener un condensado de Bose-Einstein con helio superfluido, porque este sistema es altamente interactuante.

³Las anteriores estimaciones son realizadas para gases ideales, pero estas han guiado a los experimentalistas para manejar el rango de temperatura ($T \approx \mu K$), las frecuencias de atrapamiento del orden de $\omega \approx nK$ y el número de partículas $N \approx 10^4 - 10^7$

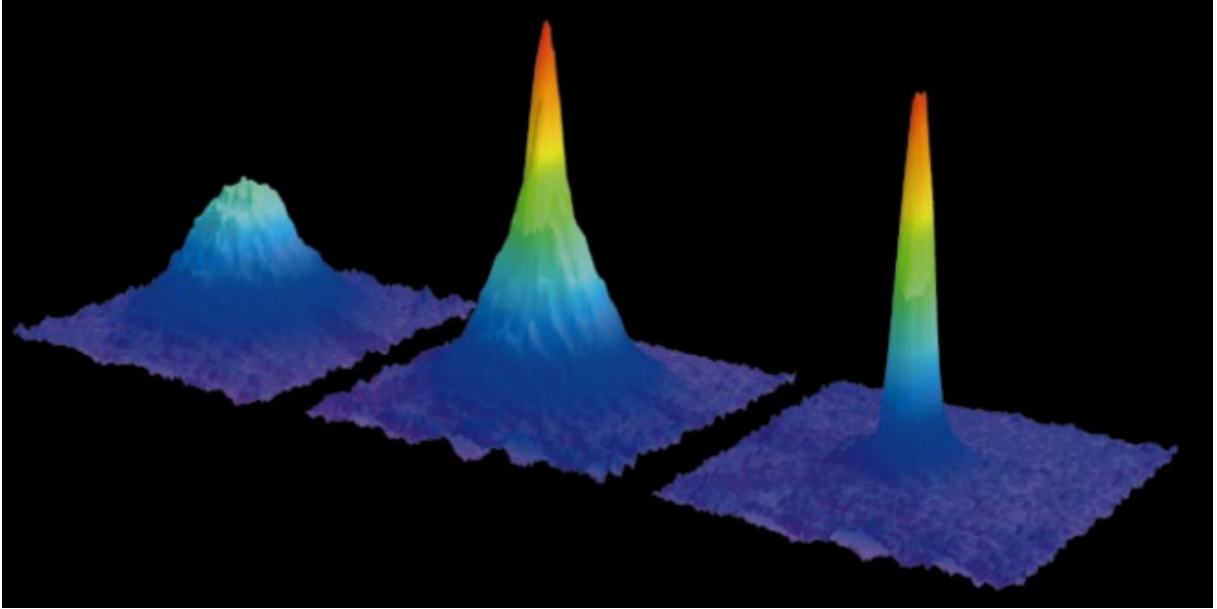


Figura 3-7: Imágenes de absorción del condensado de Bose-Einstein. Esta imagen muestra la absorción vs dos dimensiones espaciales, las imágenes muestran una transición a un condensado, con un número de átomos en la transición aproximadamente de 7×10^5 y la temperatura de transición de $2\mu K$. Tomado de [24].

Es posible reemplazar el operador de campo $\hat{\Psi}$ con el campo clásico Ψ_0 únicamente si se aplican varias condiciones:

1. La temperatura debe ser muy pequeña comparada con la temperatura crítica del BEC, de tal forma que las fluctuaciones del operador campo sean muy pequeñas.
2. El sistema debe ser altamente diluido de tal forma que las fluctuaciones del operador campo sean despreciables, es decir, la distancia promedio entre las partículas sea mucho más grande que la longitud de dispersión.
3. La interacción $V(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ debe ser reemplazada por el pseudopotencial $g4\pi\hbar^2(a/m)\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ donde a es la longitud de dispersión para la onda s o lo que es lo mismo, únicamente serán exploradas las bajas energías.
4. El número de átomos N debe ser suficientemente grande, así es posible considerar que $\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger \equiv \sqrt{N_0}$. Lo anterior es conocido como la prescripción de Bogoliubov, de tal forma que $\Psi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{N_0}\varphi_0(\mathbf{r})$.

En consecuencia, se obtiene la famosa ecuación de Gross-Pitaevskii:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi_0(\mathbf{r}, t), \quad (3-14)$$

para el campo clásico Ψ_0 . Desde este punto de vista el BEC puede ser considerado como una onda de materia clásica. La solución para la ecuación no lineal 3-14 esta dada por, ecuación 3-9:

$$\Psi_0(\mathbf{r}, t) = |\Psi_0(\mathbf{r}, t)| e^{imr^2/2\hbar t}, \quad (3-15)$$

donde la velocidad del campo es: $\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla S$. Luego, una característica implícita en la solución 3-15, es la irrotacionalidad del flujo, donde la fase juega el papel de potencial de la velocidad. De lo anterior es posible hacer la conexión entre el superfluido y el BEC: las ecuaciones básicas para la descripción del movimiento de un superfluido son las ecuaciones de la hidrodinámica irrotacional.

3.1.5. De superfluido a aislante de Mott.

El comportamiento de bosones a temperaturas muy bajas se puede estudiar desde dos puntos de vista según la ecuación:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (3-16)$$

Si el parámetro t es más pequeño que el parámetro U el sistema se encuentra en la fase aislante de Mott, mientras que si t es grande comparado con U entonces la energía cinética aumenta y las partículas pasan a otros sitios de la red, consecuentemente el sistema presenta propiedades de la fase superfluida.

En la fase superfluida, la función de onda del sistema puede ser escrita como la superposición de estados de partículas individuales debido a que las partículas no se encuentran localizadas presentando un patrón de interferencia con una fase bien definida. Si los átomos se encuentran en una red de potencial y la profundidad de cada pozo empieza a crecer, la energía cinética se igualará a la energía potencial y las partículas se localizan en los sitios de la red con un número entero por sitio y un gap de energía, es decir, el sistema pasa a la fase aislante de Mott.

En el 2002, Greiner y colaboradores [5], cargaron un sistema de átomos de ^{87}Rb como un condensado de Bose-Einstein de tal forma que lograron tener de 1 a 3 partículas por sitio en un potencial óptico. Para crear el condensado de Bose-Einstein, se usó la técnica de

evaporación con radio-frecuencia con 2×10^5 átomos y en la construcción de una red óptica de tres dimensiones, se utilizaron tres rayos que se cruzaban ortogonalmente entre sí, justo en el BEC. Por consiguiente, al aumentar la profundidad de los pozos de potencial, el patrón de interferencia cambia, dando lugar a la fase aislante de Mott (ver Fig. 3-8).

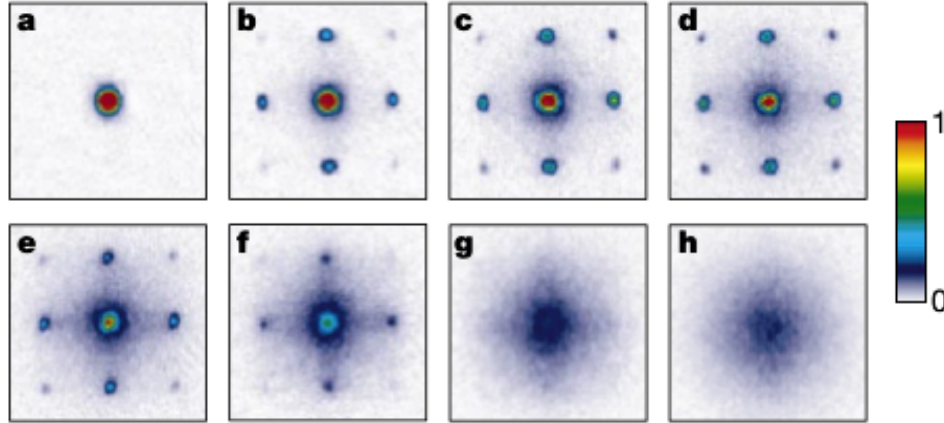


Figura 3-8: Imágenes de absorción de múltiples patrones de interferencia de ondas de materia. En un tiempo de $15ms$ se tomaron estas imágenes con profundidades de los potenciales de (a) $0E_r$, (b) $3E_r$, (c) $7E_r$, (d) $10E_r$, (e) $13E_r$, (f) $14E_r$, (g) $16E_r$ y (h) $20E_r$. Tomado de [5].

En la figura 3-8a) se observa un condensado de Bose-Einstein, el potencial óptico es cero y las partículas se encuentran ocupando el mismo estado. A medida que aumenta el potencial de la red óptica, 3-8b), c) y d), se observan patrones de interferencia de partículas que se empiezan a localizar en diferentes sitios de la red, es decir, en algunos sitios de la red se forman condensados de Bose-Einstein muy pequeños mientras que el patrón central disminuye. Luego en 3-8e), f), g) y h) se observa que los patrones de interferencia desaparecen mostrando así que las funciones de onda ya no se sobrelapan porque las partículas se han repartido en todos los sitios de la red formando la fase aislante de Mott.

Los resultados muestran que el punto crítico de la transición de aislante de Mott a superfluido se logró en potenciales de $V_0 = (12 - 13)E_r^4$. El equipo de Greiner comparó sus medidas experimentales con el valor crítico teórico $U/t = z \times 5,8$, donde z es el número de partículas vecinas que depende de la estructura de la red; considerando una estructura de red cúbica simple, claramente son seis vecinos los que rodean un sitio de la red. Por consiguiente se obtuvo un valor de $U/t \approx 36$ para una profundidad de los potenciales de

⁴ E_r es llamada la energía de retroceso y es equivalente a $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Para átomos de ^{87}Rb la energía se encuentra en el rango de los KHz .

$13E_r$, lo cual estuvo en buen acuerdo con el valor medido.

Este experimento logró enmarcar la importancia que tienen los sistemas fuertemente correlacionados de tal forma que se logró identificar y manejar los parámetros de control, por ejemplo los elementos de la matriz de tunelamiento t . Además se reconoce la fase aislante de Mott como un nuevo estado de la materia en gases atómicos. Las propiedades únicas que presenta esta fase, tales como la desaparición de las fluctuaciones locales en el número de partículas y una fase local bien definida, podrían contribuir a la construcción de nuevos materiales y dispositivos de medida más precisos.

4 Interacción multi-cuerpos.

Las interacciones entre partículas juegan un papel importante en los sistemas de muchos cuerpos. Generalmente se considera interacción entre dos cuerpos, pero se ha demostrado experimentalmente en sistemas de átomos ultrafríos que los efectos de la interacción entre muchos cuerpos es significativo. Por tanto, introduciremos los estudios de Will et al. [3] sobre la dinámica del estado coherente de un sistema de muchos cuerpos en una red de potencial periódico.

Para profundizar un poco más en el significado de los experimentos que han remarcado el papel de las interacciones entre más de dos partículas en un sistema de bosones, introduciremos algunos conceptos básicos como la definición de estado coherente y la dinámica de una onda de materia.

4.1. Estado coherente.

Los estados coherentes se caracterizan por tener un número indefinido de partículas lo cual permite tener una fase definida más precisa y se cumple la premisa que el producto de la incertidumbre de la amplitud y la fase es el mínimo permitido por el principio de incertidumbre de Heisenberg[25].

Para generar un estado coherente es común utilizar el operador desplazamiento $\hat{D}(\alpha) = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})$ donde α es un número complejo arbitrario y se cumple $\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha$. Este operador lo podemos escribir como: $\hat{D}(\alpha) = e^{2\alpha^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\hat{a}}$ de tal forma que el estado coherente $|\alpha\rangle$ es generado por el operador desplazamiento actuando sobre el estado vacío

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle. \quad (4-1)$$

Los estados coherentes son autoestados del operador aniquilación \hat{a} , esto puede ser probado como sigue:

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)|0\rangle = (\hat{a} + \alpha)|0\rangle = \alpha|0\rangle, \quad (4-2)$$

donde la ecuación de los autovalores resulta:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (4-3)$$

Realizando operaciones sobre la anterior ecuación, podemos obtener la forma general de los coeficientes de $\langle n|\alpha\rangle$ dada por:

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{n!^{1/2}} \langle 0|\alpha\rangle. \quad (4-4)$$

Normalizando el estado $|\alpha\rangle$ por medio de $|\langle\alpha|\alpha\rangle|^2 = 1$, el estado coherente resulta:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!^{1/2}} |n\rangle. \quad (4-5)$$

Lo anterior muestra que la distribución de probabilidad de los fotones (para el caso óptico) o bosones (para el caso del condensado) en el estado coherente es una distribución de Poisson.

4.2. Dinámica de una onda de materia.

La función de onda de un sistema de partículas que se encuentra en un estado coherente define un campo estable. Sin embargo, el condensado esta formado por la superposición de diferentes estados de número de átomos y por lo tanto se puede observar la evolución en el tiempo de los estados individuales y de las fases relativas. De lo anterior se ha demostrado experimentalmente que el campo de onda de un condensado de Bose-Einstein sufre una serie periódica de colapsos y restauraciones a medida que transcurre el tiempo [26].

Para estudiar la evolución del estado de un sistema de muchos cuerpos, se considera que las partículas se encuentran en el estado base e interactúan entre pares. Así, la evolución temporal de la función de onda se analiza en la parte del Hamiltoniano que describe la interacción dada por:

$$\hat{H}_i = \frac{1}{2} U \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (4-6)$$

donde \hat{n}_i es el operador densidad local el cual cuenta el número de átomos en el potencial de confinamiento y U caracteriza la energía de repulsión por sitio. Los autoestados del Hamiltoniano son los estados de Fock $|n\rangle$ con autovalores $E_n = Un(n-1)/2$, por lo tanto la evolución en el tiempo de este estado es dado por $|n\rangle(t) = |n\rangle(0) \times e^{-iE_n t/\hbar}$.

Ahora, se considera el estado $|\alpha\rangle$, el cual se introdujo en la sección anterior. Tales estados tienen una amplitud compleja α y un número promedio de átomos $\bar{n} = |\alpha|^2$. Por lo tanto, el sistema evolucionará en el tiempo de la siguiente forma:

$$|\alpha\rangle(t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\frac{1}{2}Un(n-1)t/\hbar} |n\rangle. \quad (4-7)$$

Derivamos el campo $\psi = \langle \alpha(t) | \hat{a} | \alpha(t) \rangle$ llamado la visibilidad. La evolución en el tiempo de este campo, el cual depende de la fase, llevará al colapso de ψ ($\psi \approx 0$). Sin embargo, para múltiplos enteros de $t_{rev} = h/U$, con una fase total de 2π , el campo se restaura perfectamente. La figura 4-1, muestra la evolución temporal del producto de dos estados $|\beta\rangle$ y $|\alpha\rangle(t)$; se observa que en principio evoluciona de forma continua donde en la Fig. 4-1(d), el campo macroscópico colapsa. Luego, el sistema ha evolucionado en un estado de “gato de Schrödinger” de dos estados coherentes. Estos dos estados están 180° desfasados lo que conlleva a un colapso en el campo ψ . Finalmente el estado coherente se restaura para $t = h/U$ en donde se observa claramente el patrón de interferencia en el cual la parte roja indica el máximo superrelapamiento.

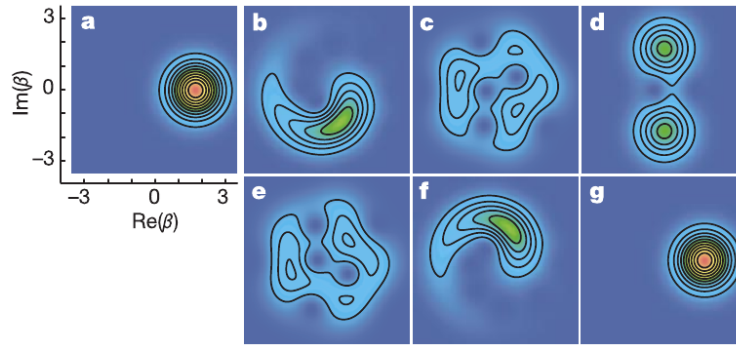


Figura 4-1: Dinámica cuántica de un estado coherente, las imágenes muestran el superrelapamiento de $|\langle \beta | \alpha(t) \rangle|^2$ donde $|\beta\rangle$ es un estado coherente arbitrario con amplitud compleja β y $|\alpha\rangle(t)$ un estado con un número promedio de $|\alpha|^2 = 3$ átomos en diferentes tiempos: a) $t = 0h/U$, b) $t = 0.1h/U$ c) $t = 0.4h/U$ d) $t = 0.5h/U$ e) $t = 0.6h/U$ f) $t = 0.9h/U$ y g) $t = h/U$. Tomado de [26].

Experimentalmente, Greiner y colaboradores probaron la evolución de la onda de materia de un condensado de Bose-Einstein. El experimento consistió en cargar un condensado de Bose-Einstein en una red óptica tridimensional con 2×10^5 átomos de ^{87}Rb . La evolución temporal de la onda de materia se registró en los patrones de interferencia observados después de saltar desde un potencial de $V_A = 8E_r$ a un potencial de $V_B = 22E_r$, para luego esperar un tiempo adecuado de tal forma que el sistema se estabilice. Después de ese tiempo, los pozos de potencial se apagan repentinamente y se registran las imágenes de absorción por un tiempo de $16ms$ mientras que el sistema evoluciona.

En la figura 4-2 se presenta el patrón de interferencia obtenido de la evolución temporal del campo de bosones. En los recuadros (a) y (b) se muestran los patrones de interferencia de varias ondas de materia formadas en la red, estos desaparecen a medida que transcurre el tiempo logrando así el patrón característico de un aislante de Mott (recuadro (d)), $500\mu s$ después el patrón de interferencia de las ondas de materia se restaura. Estos resultados

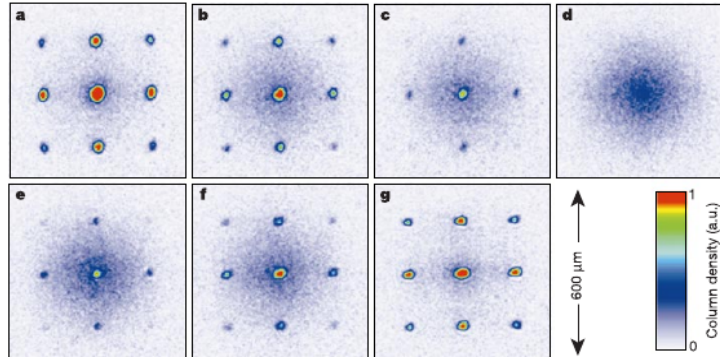


Figura 4-2: Evolución dinámica del patrón de interferencia de una onda de materia de un BEC. Los tiempos en los que se tomaron estas imágenes fueron: a) $0\mu s$ b) $100\mu s$ c) $150\mu s$ d) $250\mu s$ e) $350\mu s$ f) $400\mu s$ g) $500\mu s$. Tomada de [26].

son una prueba directa de la cuantización de los campos de Bose y también llevan una fase coherente la cual tiene explícito el término $Un(n-1)t/\hbar$. Lo anterior da cuenta del tipo de interacción que es posible considerar en un sistema bosónico.

4.3. Evidencia de la interacción entre muchos cuerpos.

En el 2010, Sebastian Will [3] y colaboradores resaltaron la importancia de las interacciones de muchos cuerpos. En las aproximaciones que se hicieron en el experimento de Greiner, se consideraba el estado más bajo de energía, cuyo autovalor era $E_n = Un(n-1)$ de tal forma que U fuera independiente del llenado n en el sitio de la red i ; diferente a esto, en el reporte de Will se consideró que debido a las interacciones átomo-átomo, es posible que las partículas ocupen estados más energéticos. La mezcla de estos orbitales excitados modifica la forma de la función de onda espacial y da lugar a energías de interacción dependientes del número de átomos (ver figura 4-3).

Los experimentos que habían sido realizados sobre la dinámica del campo de una onda de materia lograron registrar pocas restauraciones de la fase cuántica y por lo tanto no se habían podido revelar las consecuencias de los efectos de la interacción entre muchos cuerpos. Debido a lo anterior, en [3] se da una solución aproximada del término de interacción por medio de una expansión para las autoenergías del correspondiente Hamiltoniano:

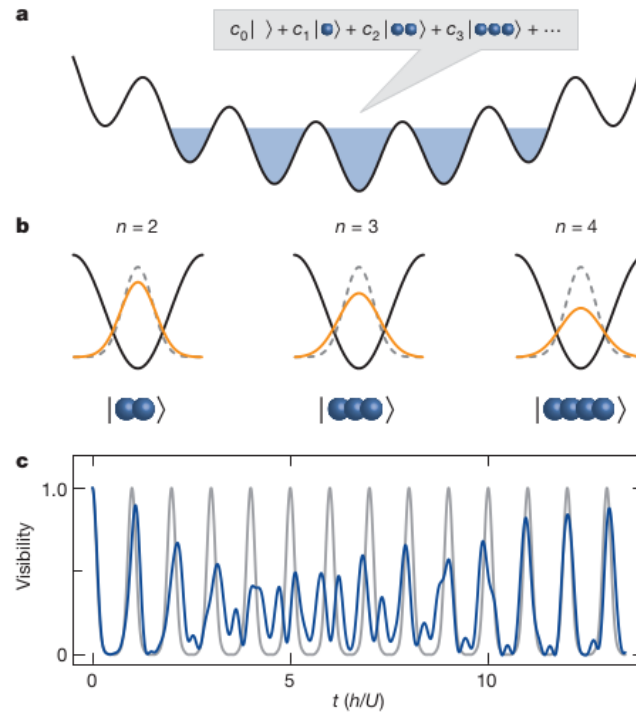


Figura 4-3: Interacción entre muchos cuerpos evidenciada a través de restauraciones de la fase cuántica. a) Un BEC en una red óptica forma un superfluido. El estado cuántico en cada sitio puede ser expresado como la superposición de los estados de Fock $|n\rangle$ con amplitudes c_n . El número de esferas azules en cada estado indica el número de átomos n . b) Para interacciones repulsivas, es posible que se realicen transiciones a estados energéticos más altos, lo cual hace que la función de onda local del estado base sea más amplia y dependa del número de átomos (línea sólida naranja) comparado con la función de onda de un sistema no interactuante (línea azul). c) Se muestran las restauraciones de la fase cuántica de un estado coherente de átomos interactuando en un sistema con varios estados (línea sólida azul). La dinámica es muy diferente cuando la interacción es de dos cuerpos (Línea gris sólida). Tomado de [3].

$$E_n^{MO} = \frac{U_2}{2}n(n-1) + \frac{U_3}{6}n(n-1)(n-2) + \frac{U_4}{24}n(n-1)(n-2)(n-3) + \dots \quad (4-8)$$

La expansión pone en evidencia todas las formas en las que es posible que los bosones interactúen en un sistema de átomos como el condensado de Bose-Einstein. Para probar experimentalmente la hipótesis anterior se monitoreó la dinámica fuera del equilibrio de un estado, como la superposición de diferentes estados. Por lo tanto, el estado es una superposición de estados de Fock $|n\rangle$, donde este puede ser expresado (como se vió en la

sección 4.1) por $|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$; aquí c_n denota la amplitud de probabilidad y E_n denota los autovalores de la energía de los estados de Fock $|n\rangle$. De nuevo, se analizó el patrón de interferencia por medio de la cantidad $|\langle\psi(t)|\hat{a}|\psi(t)\rangle|^2$, es decir:

$$|\langle\psi(t)|\hat{a}|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\hat{a}(t)\rangle|^2 = \sum_{m,n=0}^{\infty} \sqrt{m+1}\sqrt{n+1} c_m c_{m+1}^* c_n^* c_{n+1} e^{i(E_{m+1}-E_m-E_{n+1}+E_n)t/\hbar}, \quad (4-9)$$

considerando como estado inicial un estado coherente $|\psi(t=0)\rangle$. Los efectos multi-orbitales se dan a conocer debido a que $|\langle\hat{a}(t)\rangle|^2$ contiene múltiples frecuencias enteras de U_n .

El montaje experimental realizado por el equipo de Will consistió de un BEC de átomos de ^{87}Rb en una red óptica tridimensional. La profundidad de los pozos de potencial están entre $V_L = 3E_r$ y $V_L = 13E_r$, para estos potenciales el sistema es superfluido. Repentinamente el potencial de la red aumenta desde V_L a V_H , donde V_H está en el rango de $25E_r$ a $41E_r$, en este proceso, rápidamente se suprime la constante de tunelamiento y los átomos quedan “congelados” en los sitios de la red. Consecuentemente se apagan todas las trampas de potencial y el sistema evoluciona en el tiempo registrando la imagen de absorción del patrón de interferencia de la onda de materia.

Asumiendo interacciones repulsivas, se esperaron encontrar frecuencias del orden de U/h dadas por

$$E_2/h > (E_3 - 2E_2)/h > (E_4 - 2E_3 + E_2)/h > (E_5 - 2E_4 + E_3)/h > \dots \quad (4-10)$$

Algunos resultados se muestran en la figura 4-4:

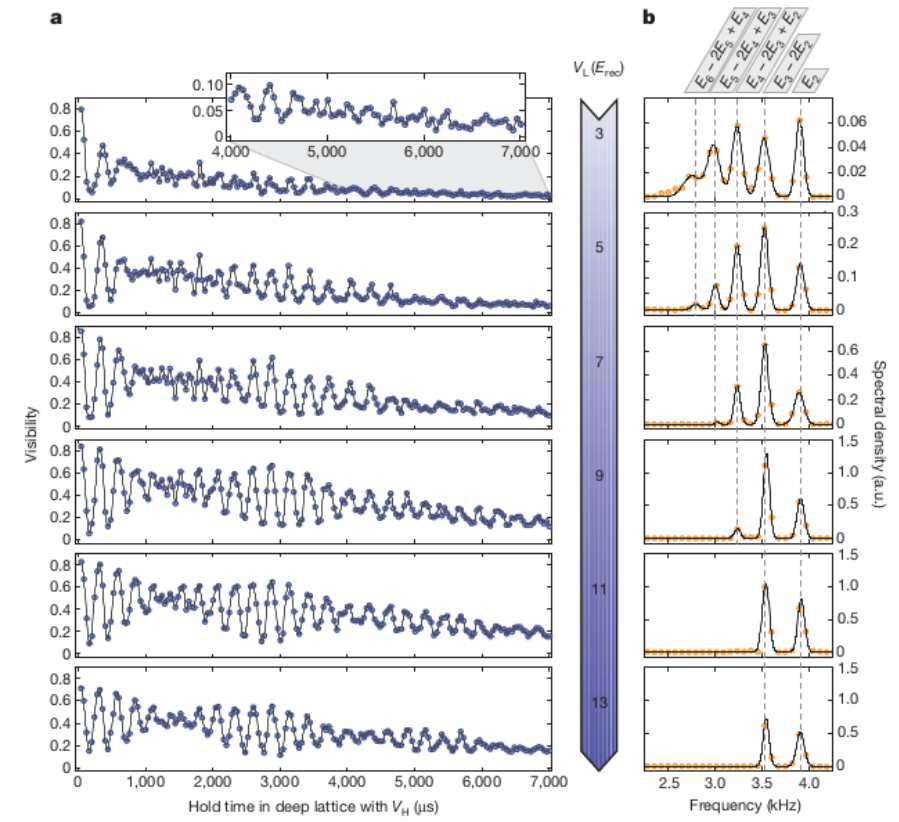


Figura 4-4: Resultados experimentales de la evolución de la fase cuántica multiorbital. a) Restauración de la fase cuántica multiorbital en un pozo de $V_H = 40E_r$ después de cargar aproximadamente 3.3×10^5 átomos de ^{87}Rb en redes de profundidad de $V_L = 3E_r$ hasta $V_L = 13E_r$. b) El correspondiente espectro de Fourier revela contribuciones en la frecuencia de los estados de Fock con seis átomos.

Estos resultados muestran interacciones entre dos a seis átomos, lo cual prueba la importancia que tienen los efectos multi-orbitales. Además, debido al cambio en la función de onda como producto de considerar dichas interacciones es posible encontrar fases cuánticas novedosas con propiedades particulares.

En el presente trabajo se considera la interacción entre dos y/o tres cuerpos y los cambios que expondrían las fases características de un sistema de bosones en el estado base.

5 Resultados y discusión.

Luego de examinar el Hamiltoniano de Bose-Hubbard aplicado a un sistema de bosones en el estado base, a continuación se determinan los diagramas de fases bajo diferentes interacciones y potenciales de confinamiento para estudiar las fases aislante de Mott y superfluida.

Como se estudió en la sección anterior, el Hamiltoniano se puede dividir en dos partes: la primera describe la energía cinética del sistema la cual esta caracterizada por el parámetro t , mientras la segunda parte describe la interacción local entre las partículas donde la amplitud de la misma esta dada por el parámetro U , para el caso de interacción entre dos cuerpos y por el parámetro W cuando se considera interacción entre tres cuerpos. Cuando la temperatura es $T = 0K$ las fluctuaciones térmicas desaparecen, en consecuencia, las transiciones de fase dependen de la competencia entre energía cinética y energía de interacción repulsiva entre los bosones.

El diagrama de fases de un sistema de bosones en el estado base se puede representar mediante una gráfica del potencial químico μ contra el parámetro de salto t . Los potenciales químicos se obtienen cambiando el número de partículas del sistema para un valor fijo de t y estos valores dependen de las consideraciones que se hagan sobre la interacción entre las partículas y el confinamiento del sistema.

Para determinar el potencial químico, se calcula la energía en el ensamble canónico para un número determinado de partículas, de tal forma que:

$$\mu_p = \frac{dE}{dN} \approx \frac{\Delta E}{\Delta N} = \frac{E(N+1) - E(N)}{(N+1) - N} = E(N+1) - E(N), \quad (5-1)$$

donde μ_p es el potencial químico para aumentar el número de partículas del sistema en uno, $E(N)$ es la energía que posee el sistema con N partículas y tamaño de red L , además:

$$\mu_h = \frac{dE}{dN} \approx \frac{\Delta E}{\Delta N} = \frac{E(N) - E(N-1)}{N - (N-1)} = E(N) - E(N-1), \quad (5-2)$$

es la energía necesaria para disminuir el número de partículas del sistema en uno o lo que es lo mismo, crear un hueco en el sistema.

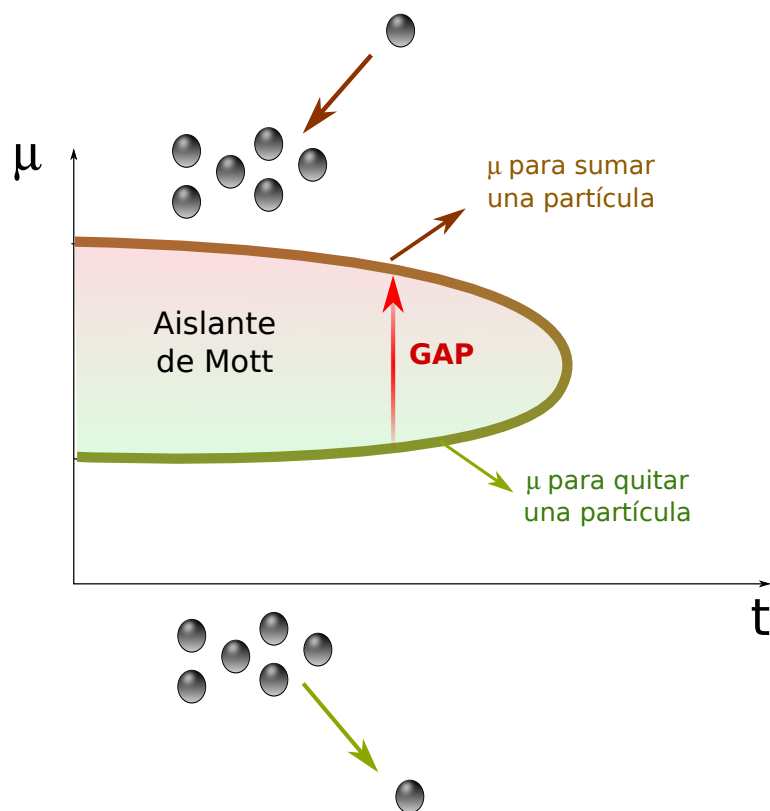


Figura 5-1: Gap de un aislante de Mott. El gap es la diferencia de energía entre el potencial químico para colocar una partícula y el potencial químico para quitarla. Cuando el gap se hace cero, hemos pasado a la fase superfluida.

Para obtener el diagrama de fases, se calcula la energía del sistema la cual depende del número de partículas N , cuyo valor está de acuerdo con el valor de densidad considerado (si se calcula la energía para una red de tamaño L y se considera $\rho = 2$ entonces $N = 2L$); luego, el sistema se lleva al límite termodinámico extrapolando los valores del potencial químico para $1/L = 0$. Este proceso se realiza por medio de un ajuste cuadrático¹ a una red de tamaño infinito (límite termodinámico $L \rightarrow \infty$), donde se tiene presente que N -el número de partículas- y L -el tamaño de la red- tomen valores más grandes manteniendo constante la relación $\rho = N/L$.

A medida que se calculan los potenciales químicos es necesaria una herramienta para determinar la fase en la que se encuentra el sistema, por lo tanto se evalúa el gap de energía para un valor fijo de t , ver Fig. 5-1. Esta cantidad está dada por:

¹En [27] se considera que los estados aislantes presentan comportamientos cuadráticos de μ contra el tamaño del sistema, debido a que el potencial químico empieza a ser independiente del tamaño de la red al acercarse al límite termodinámico.

$$\Delta = \mu_p - \mu_h. \quad (5-3)$$

De tal forma que si el resultado de Δ es cero para un número fijo de partículas, los bosones no requieren energía adicional para moverse a través de la red, lo cual indica que hemos salido de la fase aislante y podremos determinar el parámetro de salto t para el cual esto sucede. Debido a que es imposible obtener un cero exacto cuando se calcula el gap de energía del sistema, se considera un error de 10^{-3} en todos los valores del gap².

Se utiliza el Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG) para calcular las energías del sistema, en donde el método trunca el número de estados del sistema a un número fijo (en este trabajo se fijan los 200 estados más importantes) produciendo un error de 10^{-8} , (ver apéndice 7).

En este trabajo se presentan los diagramas de fases para sistemas en los cuales se considera interacción entre dos y/o tres partículas sin confinamiento externo, y también los diagramas de fases para sistemas con interacción entre dos y/o tres partículas con confinamiento no diagonal.

5.1. Diagramas de fases de una red homogénea.

5.1.1. Interacción entre dos cuerpos.

El primer caso que se estudia es una cadena de bosones en una red de potencial en la cual las partículas tienen interacción local entre dos cuerpos. El proceso para obtener el diagrama de fases, empieza con el cálculo de los potenciales químicos para redes de tamaño finito con una densidad fija; por tanto se supone una red con densidad global de una partícula por sitio ($\rho = 1$) y se calcula la energía del sistema con N partículas usando el Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (5-4)$$

donde el primer término determina la energía cinética mientras que el segundo término corresponde a la interacción entre dos cuerpos, cuyo parámetro U toma el valor 1 para este caso. Consecuentemente se calcula la energía del sistema con $N + 1$ partículas y $N - 1$ partículas y finalmente se utilizan las ecuaciones 5-1 y 5-2 para calcular los potenciales químicos y extrapolar los resultados para $1/L = 0$. En la figura 5-2 los cálculos se muestran para un sistema con parámetro de hopping $t/U = 0.10$ y densidad igual a $\rho = 1$, en esta se presenta el comportamiento del potencial químico -la curva superior es el potencial

²Las unidades del gap dependen de la escala de energía y esta última esta vinculada con la consideración que se haga sobre la interacción entre las partículas.

químico necesario para adicionar una partícula mientras que la curva inferior indica el potencial químico necesario para quitar una partícula del sistema- al cambiar el tamaño de la red para un sistema de bosones y se puede observar que en el límite termodinámico existe el gap de energía.

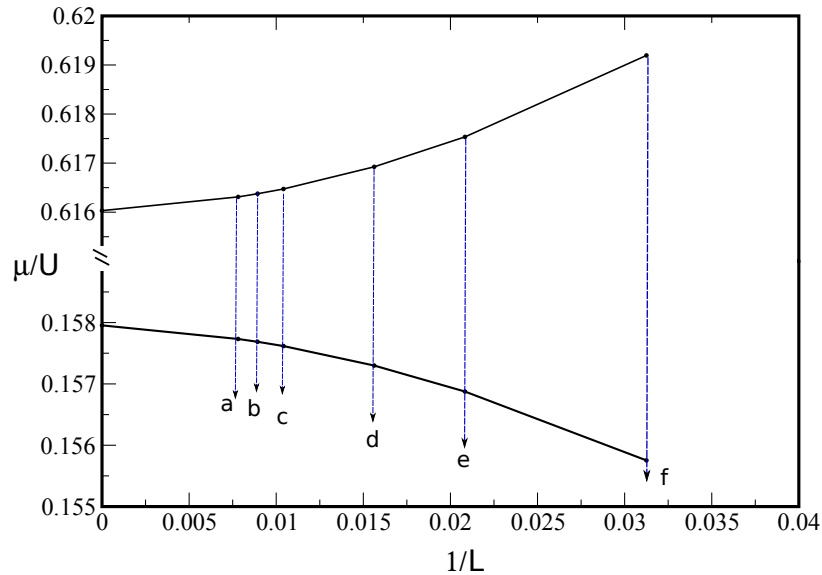


Figura 5-2: Potencial químico contra el tamaño de la red, ($t/U = 0.10$ y $\rho = 1$). En esta gráfica se observa un gap de energía $\Delta/U = 0.458$ en el límite termodinámico ($L \rightarrow \infty$), este comportamiento es típico de la fase aislante de Mott. Los puntos señalados con líneas verticales indican los tamaños de las redes consideradas que son: a) $L = 128$, b) $L = 112$, c) $L = 96$, d) $L = 64$, e) $L = 48$ y f) $L = 32$.

Como se observa en la figura 5-2, el potencial químico para adicionar una partícula en la red disminuye cuando el tamaño de la red toma valores más grandes de tal forma que presenta variaciones cada vez más pequeñas al acercarse al límite termodinámico. Por el contrario, el potencial químico necesario para crear un agujero en el sistema de bosones aumenta cuando el tamaño de la red toma valores más grandes, mostrando el mismo comportamiento del potencial químico para una partícula en el límite termodinámico.

Por lo tanto, el ajuste cuadrático para μ_p resultó $0.616 + 0.013(1/L) + 2.809(1/L)^2$, mientras que el ajuste para $\mu_h = 0.158 - 0.013(1/L) - 1.815(1/L)^2$. Estos resultados indican que para $L \rightarrow \infty$ el gap de energía es $\Delta/U = 0.458$ cuya presencia hace referencia a la fase aislante de Mott.

En la figura 5-3, se muestran los valores que toma el potencial químico cambiando el tamaño de la red, luego se extrapolan los resultados al límite termodinámico. En esta gráfica se observa que en el límite termodinámico los valores de μ_p y μ_h son iguales y el gap es cero, por consiguiente el sistema está en una fase superfluida.

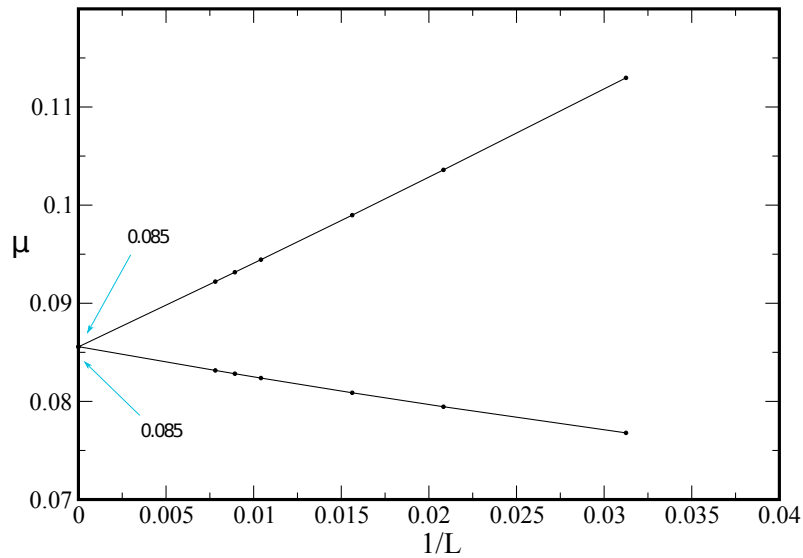


Figura 5-3: Potencial químico contra el tamaño de la red, ($t/U = 0.305$, $\rho = 1$). En la fase superfluida los valores del potencial químico en el límite termodinámico están muy cercanos. El sistema se encuentra en la fase superfluida con $\Delta/U = 0$.

Luego, con los potenciales químicos necesarios para cambiar el número de partículas del sistema, donde cada uno está calculado para un parámetro de salto diferente, se construye el diagrama de fases. En la figura 5-4 se presenta el diagrama de fases en el límite termodinámico, los puntos críticos resultan: lóbulo $\rho = 1$, $t/U = 0.305$, mientras que en el lóbulo $\rho = 2$, $t/U = 0.17$. Adicionalmente, es notable que el punto crítico disminuye con el aumento en la densidad del sistema.

En la figura 5-4 se pueden observar los lóbulos de la fase aislante rodeados por una fase superfluida. El lóbulo de densidad $\rho = 1$ toma valores del potencial químico entre 0 y 1 mientras que el lóbulo con densidad $\rho = 2$ toma valores del potencial químico entre 1 y 2, además presenta una región más pequeña comparada con el lóbulo de densidad $\rho = 1$.

Finalmente se resalta el comportamiento reentrante del lóbulo de densidad $\rho = 1$. En [27]

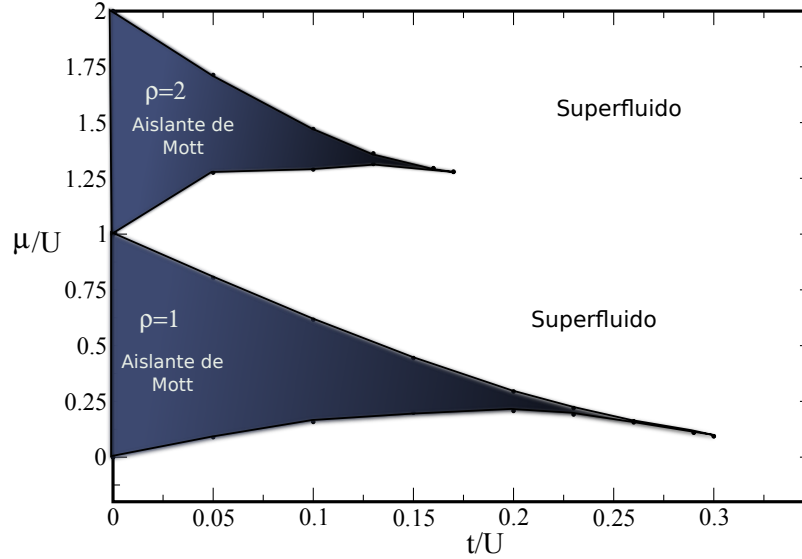


Figura 5-4: Diagrama de fases de un sistema de bosones en una red de potencial con interacción local de dos cuerpos. Los puntos críticos calculados son: para $\rho = 1$, $t_c/U = 0.305$, mientras que $\rho = 2$, $t_c/U = 0.17$.

Kühner y colaboradores destacan este comportamiento de los lóbulos de la fase aislante, cuyos argumentos centran la importancia en el cambio de la densidad del sistema para un valor fijo del potencial químico. Si se considera una línea horizontal del potencial químico en esta región, se obtiene inicialmente una fase aislante de Mott con densidad entera, luego el sistema entra a la fase superfluida (con densidad local menor que uno) y de nuevo se obtiene la fase aislante.

Por medio de los cálculos realizados por el DMRG, se reafirma una característica importante de las transiciones de fase para redes unidimensionales: a diferencia de sistemas en dos o más dimensiones, las transiciones de aislante a superfluido sobre una línea de densidad constante son transiciones de Kosterlitz-Thouless.³

³El sistema se encuentra en la clase de universalidad del modelo XY y la transición es Kosterlitz-Thouless, donde el gap de excitación se puede estimar como:

$$\Delta = \mu_p - \mu_h \sim \exp\left(\frac{\text{const}}{\sqrt{t_c - t}}\right)$$

con t_c el punto crítico.

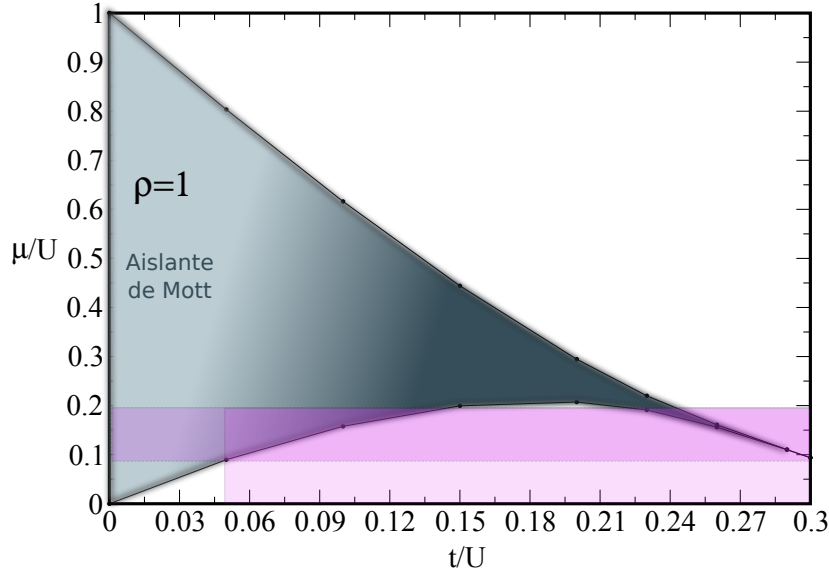


Figura 5-5: Lóbulo $\rho = 1$ destacando el comportamiento reentrante de la fase aislante. El comportamiento reentrante se puede observar desde $t/U \approx 0.05$ al punto crítico $t/U \approx 0.3$.

5.1.2. Interacción entre tres cuerpos.

Basados en la importancia expuesta por el artículo de S. Will y colaboradores (sección 4), donde se destaca la importancia de considerar interacciones entre más de dos cuerpos, en esta sección se exploran las fases en el estado base del sistema de bosones confinados en redes periódicas y se asume que el sistema posee interacción local entre tres cuerpos.

El Hamiltoniano que se utilizó para calcular la energía de N partículas está dado por:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{6} W \sum_{i=1} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2), \quad (5-5)$$

donde W es el parámetro que describe la interacción entre tres cuerpos. En esta ocasión se asume $W = 1$ como la escala de energía.

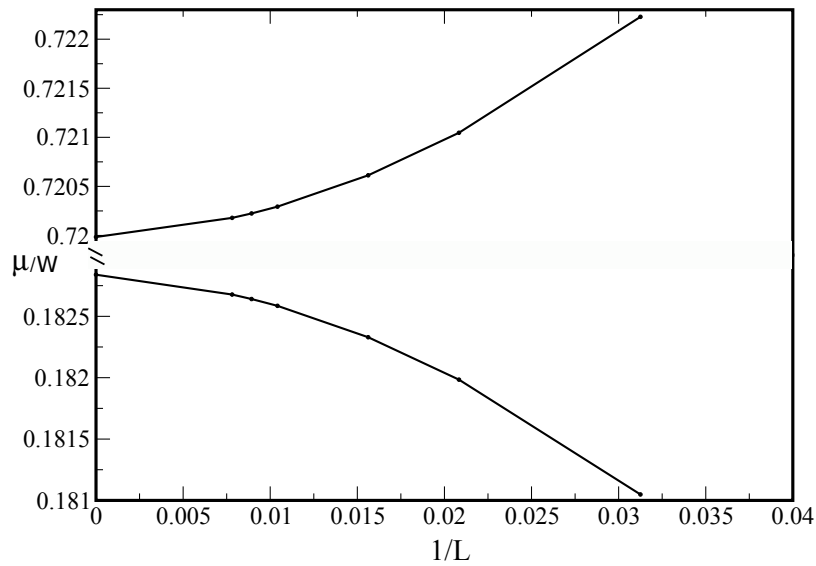


Figura 5-6: Comportamiento del potencial químico con el tamaño de la red considerando interacción entre tres cuerpos, $t/W = 0.05$ y $\rho = 2$. Debido a que en el límite termodinámico existe un gap de energía, el sistema se encuentra en la fase aislante de Mott.

Por tanto se presenta el comportamiento del potencial químico contra el tamaño de la red de un sistema con densidad $\rho = 2$ y parámetro de salto $t/W = 0.05$, el cual es mostrado en la gráfica 5-6. Los ajustes cuadráticos realizados sobre los datos del potencial químico para encontrar el valor en el límite termodinámico resultan: $\mu_p = 0.720 + 0.009(1/L) + 2.013(1/L)^2$ y $\mu_h = 0.182 - 0.008(1/L) - 1.574(1/L)^2$, de tal forma que se encuentra un gap de $\Delta/W = 0.537$ cuando $L \rightarrow \infty$ para $t/W = 0.05$.

Lo anterior indica que el sistema se encuentra en la fase aislante de Mott. A diferencia de la gráfica 5-6 en la que se evidencia un aislante, en la gráfica 5-7 se observa que el gap es cero para $t/W = 0.17$, por tanto el sistema se encuentra en fase superfluida.

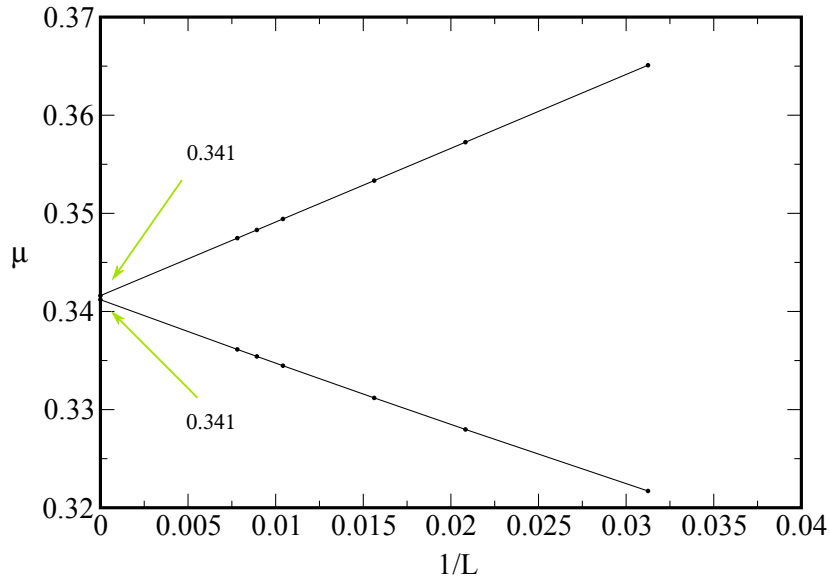


Figura 5-7: Comportamiento del potencial químico con el tamaño de la red con interacción entre tres cuerpos para $t/W = 0.17$ y $\rho = 2$.

Tomando los valores del potencial químico obtenidos en el proceso de extrapolación para un valor determinado de t , se construye el diagrama de fases del estado base de un sistema de bosones con interacción entre tres cuerpos, (Figura 5-8).

Podemos observar que el lóbulo aislante de Mott para $\rho = 1$ no aparece en el diagrama de fases y en su lugar se presentan los lóbulos de densidad $\rho = 2$ y $\rho = 3$. Al parecer, la densidad $\rho = 1$ es lo suficientemente baja para que las interacciones repulsivas entre tres bosones completen la función de localizarlos en los sitios de la red.

Comparando los resultados con los obtenidos en la sección anterior, podemos observar que mientras el valor de los puntos críticos de t/U disminuye a medida que la densidad del sistema aumenta para sistemas con interacción entre dos cuerpos, los puntos críticos en la gráfica 5-8 aumentan con el crecimiento de la densidad.

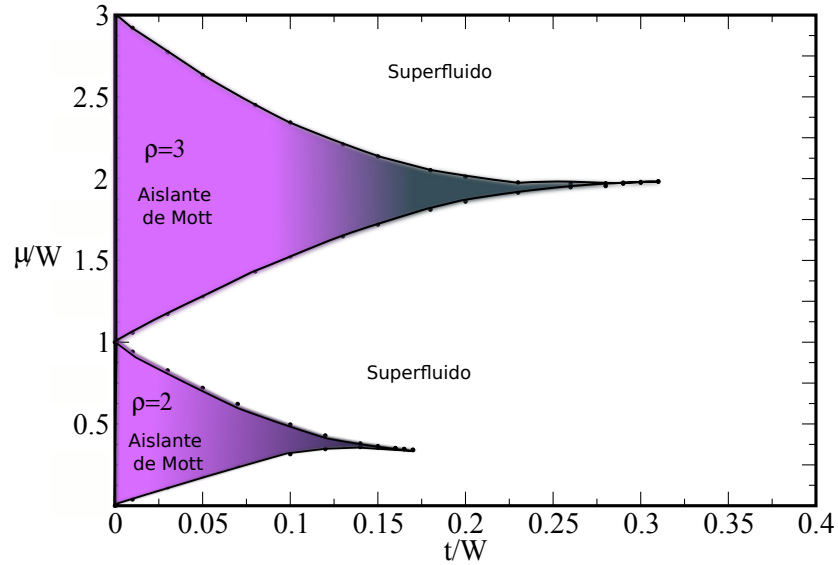


Figura 5-8: Diagrama de fases de un sistema de bosones ultrafríos con interacciones entre tres cuerpos. Los puntos críticos encontrados son: para el lóbulo $\rho = 2$, el parámetro de salto toma un valor de $t_c/W = 0.17$, para el lóbulo de densidad $\rho = 3$ el parámetro de salto toma el valor de $t_c/W = 0.31$ [28].

Además se observa el comportamiento reentrante en el lóbulo de densidad $\rho = 3$. Al igual que en el caso de interacción entre dos cuerpos para el primer lóbulo del diagrama de fases, en este caso también se obtiene el comportamiento reentrante en la región a lo largo de una línea de potencial químico fijo, de tal forma que se observa una fase aislante de Mott en t/W pequeños, luego la fase superfluida y por último se observa la fase aislante de Mott.

Tomas Sowiński realizó la diagonalización exacta del Hamiltoniano de Bose-Hubbard unidimensional con interacción local entre tres cuerpos [29]. En su reporte se presenta el cálculo del potencial químico por medio de la energía para un sistema de bosones conformado con 5,...,8 partículas. Luego aplica sobre el sistema el límite termodinámico por medio de un ajuste lineal para calcular los potenciales químicos de un sistema infinito.

Se presenta un buen acuerdo con los valores obtenidos por medio del DMRG a pesar de que el ajuste fue lineal. Lo anterior se podría explicar por la pequeña diferencia encontrada de los puntos críticos en el mismo reporte para ajustes polinomiales de $1/L$ de orden cuadrático y cúbico, es decir, se halló que la diferencia entre los gaps de energía obtenidos

por diferentes ajustes polinomiales se diferencian en 2% para $\rho = 1$ y en 10% para $\rho = 2$.

5.1.3. Interacción local entre dos y tres cuerpos.

Luego de explorar los diagramas de fases de sistemas bosónicos con interacción entre dos cuerpos o interacción entre tres cuerpos, en esta sección se presenta un estudio en el cual se consideran las dos interacciones en el mismo sistema; por tanto, el Hamiltoniano con el cual se calcula la energía, se verá modificado de la siguiente forma:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_{i=1} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{1}{6} W \sum_{i=1} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2), \quad (5-6)$$

de nuevo, los parámetros U y W corresponden a la interacción entre dos partículas y tres partículas respectivamente, en este caso se considera $U = 1$.

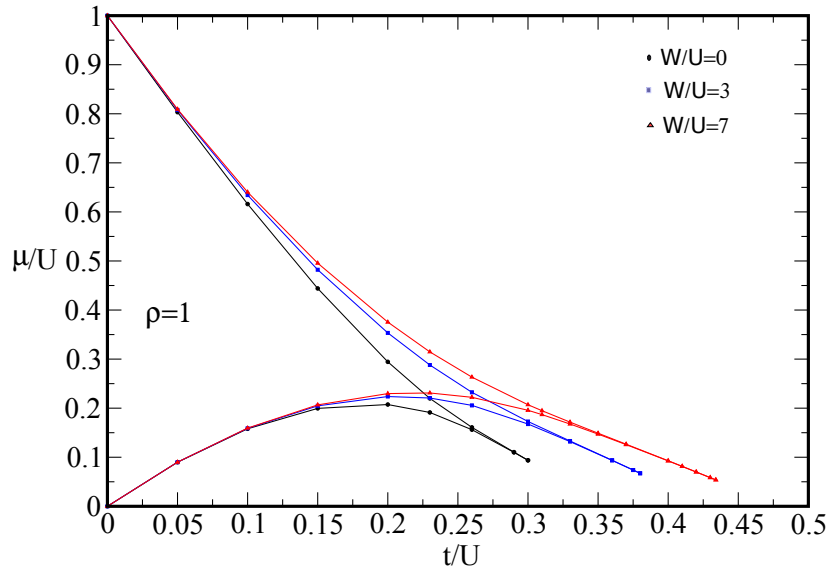


Figura 5-9: Lóbulo $\rho = 1$ con interacción entre dos y tres cuerpos para diferentes valores de $W/U = 0$, $W/U = 3$ y $W/U = 7$. [31]

El procedimiento de nuevo trata sobre el cálculo de los potenciales químicos para un valor fijo del parámetro de salto t en sistemas de tamaño finito para luego extrapolar los resultados a una cadena infinita. Los resultados que se muestran en la figura 5-9 exponen el comportamiento del potencial químico en función del parámetro de salto cuando se

consideran los casos $W/U = 0$, $W/U = 3$ y $W/U = 7$ para un sistema en el límite termodinámico y el lóbulo aislante de Mott con densidad $\rho = 1$.

Se observa la fase aislante de Mott rodeada por la fase superfluida en donde, para el caso $W/U = 0$ se reproducen los resultados del modelo de Bose-Hubbard con interacción entre dos cuerpos. Cuando W/U aumenta, las regiones aislantes aumentan moviendo la punta del aislante de Mott hacia valores más grandes. Este resultado es esperado porque la combinación en las interacciones permite que las partículas se localicen aún más en los sitios de la red y es necesario t/U más grandes para superar la energía de interacción.

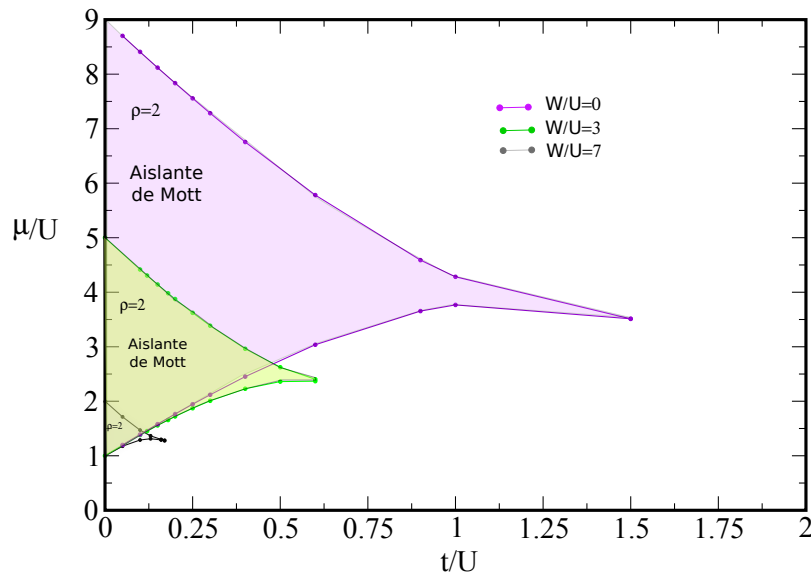


Figura 5-10: Diagrama del lóbulo aislante de Mott $\rho = 2$ para un sistema de bosones con diferentes valores de W/U .

En la figura 5-10 se muestran los resultados para el lóbulo aislante de Mott $\rho = 2$ con valores de interacción entre tres cuerpos de $W/U = 0$, $W/U = 3$ y $W/U = 7$. Los puntos críticos para el lóbulo aislante de Mott $\rho = 2$ de una red de bosones en el límite termodinámico resultaron: considerando el parámetro $W/U = 7$ el punto crítico resultó $t_c/U = 1.5$, para $W/U = 3$ el punto crítico toma el valor $t_c/U = 0.6$ y para $W/U = 0$, $t_c/U = 0.17$. En este gráfica se observa que las regiones aislantes de Mott aumentan en la medida en que la amplitud de la interacción aumenta y por tanto los puntos críticos toman valores más grandes de t/U . Lo anterior se debe a que la energía cinética de los bosones debe aumentar

para superar la energía de interacción entre dos y tres cuerpos.

Adicionalmente se observa que el potencial químico de los puntos críticos crece cuando la amplitud de la interacción entre tres cuerpos también crece. Lo anterior es explicado por el aumento en las regiones aislantes de Mott y un cambio mayor en la energía del sistema, necesario para modificar el número de partículas.

Para $t/U = 0$ los potenciales químicos cambian significativamente con la amplitud de la interacción entre tres cuerpos, para μ_h/U los valores siempre toman $\mu/U = 1$ mientras que μ_p/U cumple la relación $2U + W$. Esta situación es diferente para el lóbulo $\rho = 1$ donde μ_p/U siempre es igual a 1 sin importar la amplitud de W/U .

En [30], Ejima y colaboradores determinaron el diagrama de fases y los puntos críticos en el estado base de una red de bosones de tamaño $L = 128$ sitios aplicando DMRG y mediante la entropía de entanglement de Von Neumann. Ellos consideraron interacciones entre dos y tres partículas con interacciones $W/U = 0$, $W/U = 1/2$ y $W/U = 1$. Sus resultados muestran un aumento en los puntos críticos de cada uno de los lóbulos del diagrama de fases con el aumento en la interacción entre tres cuerpos, representado además en el crecimiento de las regiones aislantes de Mott, lo cual está de acuerdo con los resultados obtenidos en la presente sección.

5.2. Diagramas de fases con confinamiento no diagonal.

Con el fin de estudiar sistemas que se equiparan un poco más a los sistemas reales o a los experimentos donde se contiene el sistema de bosones en una región finita, se explora el diagrama de fases para átomos bosónicos sujetos a confinamiento no-diagonal y se considera interacción entre dos cuerpos y/o tres cuerpos.

En esta sección se estudian sistemas unidimensionales finitos, por tanto la metodología para calcular los potenciales químicos cambia, ya que no se extrapolan los valores en el límite termodinámico sino se calculan los potenciales químicos necesarios para cambiar la fase en un sistema con un tamaño fijo. Además, se obtienen los resultados de densidad y compresibilidad local, lo cual permite identificar el tipo de fase en el que se encuentra el sistema y además nos permite estudiar cómo se distribuyen las partículas en la red. Los cálculos se realizan por medio del DMRG fijando 200 estados y obteniendo un error aproximado de 10^{-8} .

5.2.1. Interacción entre dos cuerpos.

En esta sección se estudia la red de bosones con interacción local entre dos cuerpos y considerando que el sistema se encuentra en un confinamiento externo de tipo no diagonal; lo anterior se realiza por medio del diagrama de fases que se construye a partir de la propuesta realizada por Rousseau, (ver sección 3.1.3).

Por consiguiente el Hamiltoniano del sistema se ve modificado en el parámetro de salto t , el cual se hace dependiente de los sitios de la red resultando:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j) + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (5-7)$$

con $U = 1$ como la escala de energía y t_{ij} dado por:

$$t_{ij} = t(i + j + 1)(2L - i - j - 1)/L^2, \quad (5-8)$$

Debido a que el confinamiento depende espacialmente de la red y que las partículas tienen un parámetro de salto distinto de acuerdo al sitio que se encuentren ocupando, se estudia la forma en que las partículas se distribuyen a través de la misma, lo cual se muestra en la gráfica 5-11. Esta expone los perfiles de densidad ρ_i y la compresibilidad local $k_i = \frac{\partial \rho_i}{\partial \mu_i}$ de un sistema con $L = 80$ sitios y $t/U = 0.05$.

En 5-11a) el sistema tiene $N = 5$ partículas, se observa que la compresibilidad local y la densidad son cero en los extremos de la red mientras que en el centro se forma un superfluido gracias a que el parámetro de salto es grande en esos sitios y se muestra que la densidad y la compresibilidad local en el centro de la red es diferente de cero, por tanto se tiene una fase de coexistencia entre aislante de banda y superfluido.

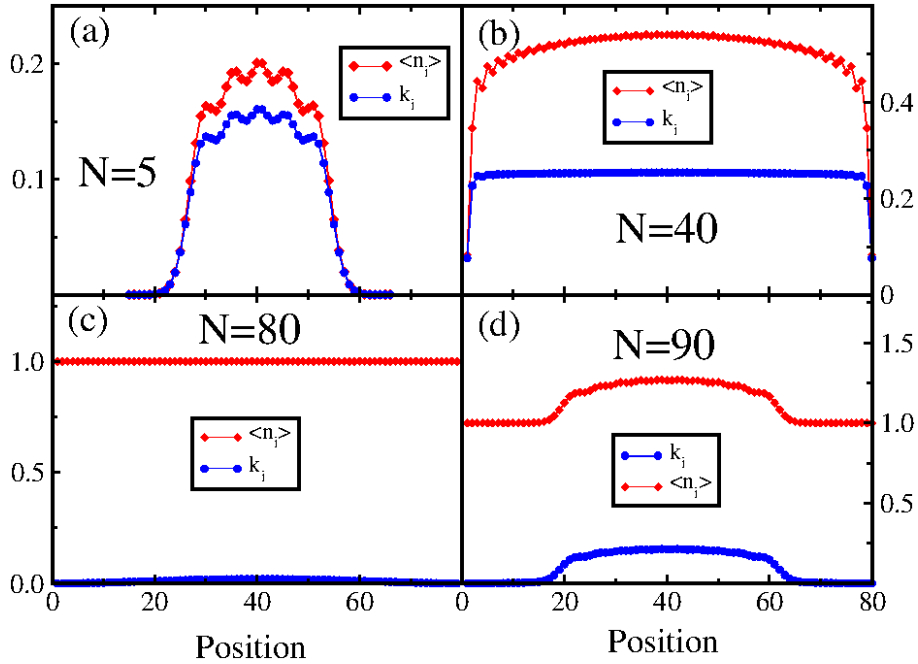


Figura 5-11: Perfiles de densidad y compresibilidad local de bosones con interacción entre dos cuerpos y confinamiento no diagonal para un sistema de tamaño $L = 80$ sitios y $t/U = 0.05$. El número de partículas utilizado en el sistema es: en a) $N = 5$, b) $N = 40$, c) $N = 80$ y d) $N = 90$.

En el recuadro 5-11b) el sistema tiene $N = 40$ partículas, se observa que la compresibilidad local es diferente de cero y disminuye en los extremos por efectos de tamaño finito, esto indica que el sistema está en la fase superfluida. En 5-11c) la densidad local toma el valor $\rho = 1$ y la compresibilidad es cero, dando lugar a una fase incompresible globalmente o a la fase aislante de Mott. Por último en 5-11d) se observa que la densidad y la compresibilidad en los extremos es 1 y 0 respectivamente mientras que en el centro de la red se forma un superfluido, es decir, el sistema se encuentra en la fase de coexistencia entre aislante de Mott y superfluido. De acuerdo con la distribución de las partículas mostrada en la figura 5-11, se observa un cambio de estado a medida que aumenta el número de partículas, por lo tanto se espera un diagrama de fases más significativo comparado con el diagrama sin confinamiento externo.

A continuación presentamos el diagrama de fases para la red con $L = 80$ sitios, interacción entre dos cuerpos y sujeta a confinamiento no diagonal. La figura 5-12 muestra los lóbulos aislantes de Mott rodeados por la fase de coexistencia entre el aislante de Mott y superfluido, además se observan las regiones de fase superfluida. También se muestra que las regiones aislantes de Mott disminuyen con la densidad del sistema y la posición de los puntos críticos se desplaza a valores menores. El punto crítico para $\rho = 1$ resul-

ta $t_c/U = 0.25$, lo cual indica una disminución del valor crítico comparado con el lóbulo $\rho = 1$ para la red sin confinamiento externo, mientras que para el lóbulo $\rho = 2$ del diagrama de fases con ODC, se obtiene un punto crítico de $t_c/U = 0.15$, cuyo valor crítico también disminuye comparado con el sistema sin confinamiento externo. La observación anterior da cuenta de que el tamaño de la red de cierta forma influye en el valor de los puntos críticos.

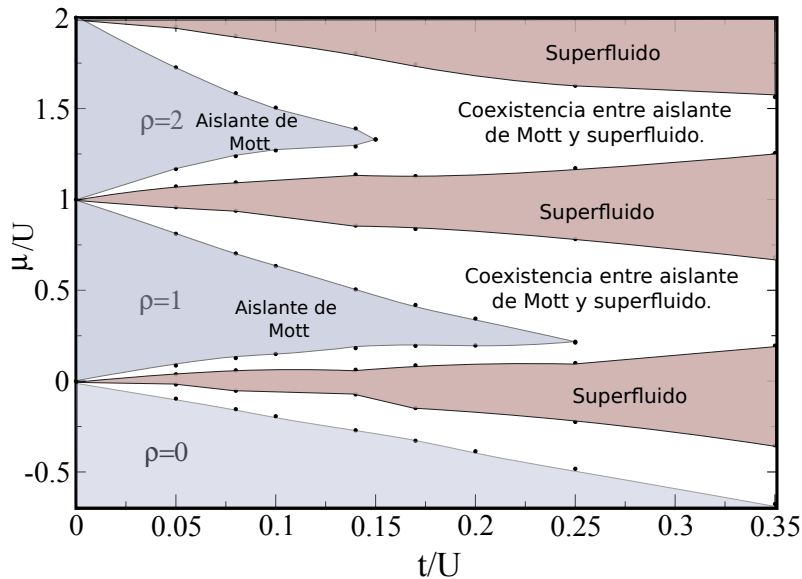


Figura 5-12: Diagrama de fases de un sistema de bosones de tamaño $L = 80$ sitios con interacción entre dos cuerpos y confinamiento no diagonal.

Adicionalmente, se observa que los resultados para los lóbulos aislantes de Mott, cuyos potenciales químicos fueron calculados por el DMRG, están de acuerdo con los lóbulos aislantes calculados por simulación Monte-Carlo en [2], aunque las regiones de superfluido son más grandes en los resultados presentados, comparados con los expuestos por Rousseau y colaboradores en el mismo artículo.

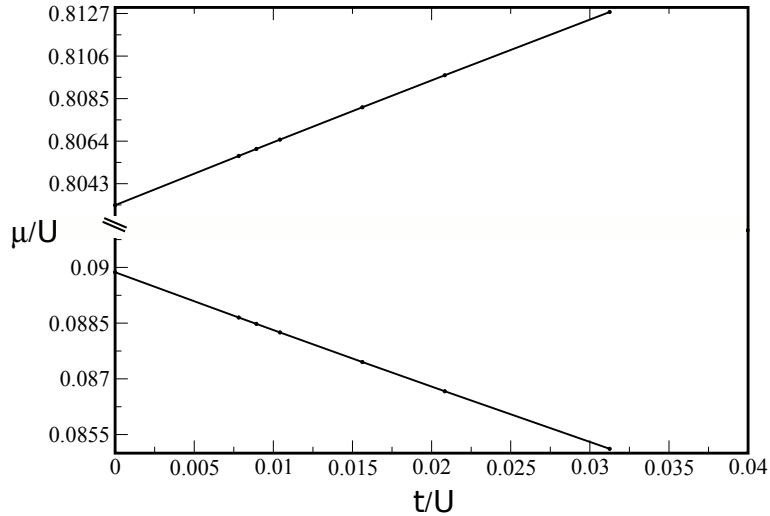


Figura 5-13: Potencial químico contra el tamaño de la red para un sistema con interacción entre dos cuerpos y ODC, con $t/U = 0.05$. En esta gráfica el gap de la fase aislante es $\Delta/U = 0.713$.

Por último se realizó la gráfica de la medida de μ/U con respecto al tamaño del sistema para verificar la existencia del gap de energía en el límite termodinámico cuando consideramos ODC. En la figura 5-13 se muestra que el gap sigue existiendo para una cadena infinita, donde el gap en el lóbulo $\rho = 2$, es el mismo mientras que para el lóbulo $\rho = 1$ el gap disminuye con ODC.

Los resultados presentados en esta sección, muestran que es posible obtener fases aislantes de Mott incompresibles para sistemas bosónicos confinados en un potencial externo de tipo no diagonal; contrario a lo que sucedía con un confinamiento externo de tipo armónico, en el cual no era posible obtener la fase aislante de Mott pura. Además de la obtención de los lóbulos aislantes de Mott en el diagrama de fases con ODC, se obtienen nuevas fases de coexistencia entre aislante de Mott y superfluido, una característica adicional del diagrama de fases causada por la distribución de las partículas a través de la red.

5.2.2. Interacción entre tres cuerpos.

En los casos donde el número de partículas del sistema es grande de tal forma que es posible ubicar más de una partícula por sitio, se considera relevante la interacción entre tres cuerpos, por tanto en esta sección se estudia el Hamiltoniano de Bose-Hubbard unidimensional considerando interacción local entre tres bosones y con confinamiento no diagonal.

Dicho Hamiltoniano permite calcular las energías del estado base en el ensamble canónico con el mismo procedimiento para sistemas finitos aplicado en la sección anterior pero se modifica cambiando la interacción de dos cuerpos por la interacción local entre tres cuerpos, cuyo resultado es:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j) + \frac{1}{6} W \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2) \quad (5-9)$$

con t_{ij} dado por la ecuación 3-8.

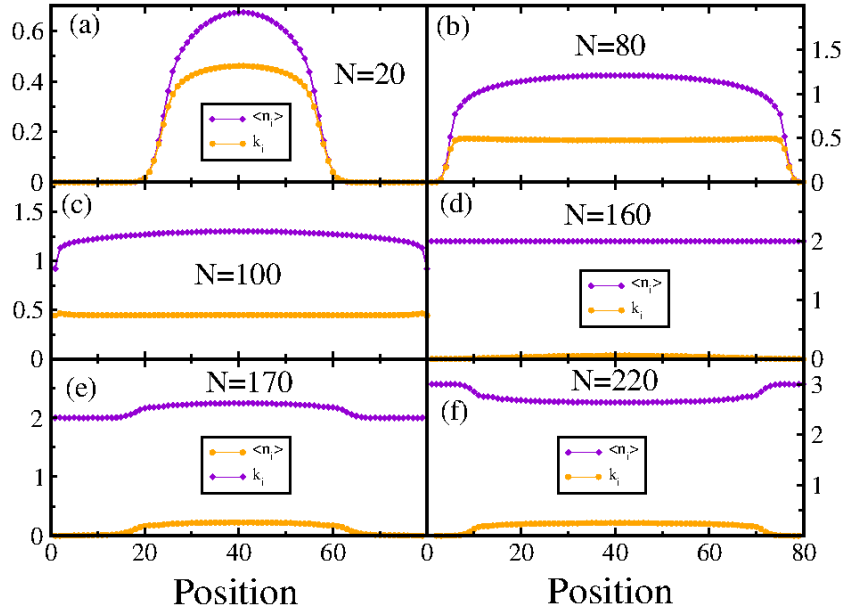


Figura 5-14: Perfiles de densidad para sistemas de bosones con interacción entre tres cuerpos y confinamiento no diagonal en un sistema de $L = 80$ sitios. a) Sistema con $N = 20$ partículas, b) $N = 80$, c) $N = 100$, d) $N = 160$, e) $N = 170$ f) $N = 220$. El parámetro de salto es $t/W = 0.05$.

En la figura 5-14 se muestran los perfiles de densidad y la compresibilidad local. Para el recuadro 5-14a), el sistema posee $N = 20$ partículas y se encuentra que la compresibilidad es cero en los extremos y diferente de cero en el centro de la red lo que corresponde a la

fase de coexistencia entre aislante de banda y superfluido, para 5-14b) con $N = 80$ se observa que la densidad es $\rho = 1$, las fluctuaciones no son lo suficientemente grandes para pasar a la fase aislante de Mott y la compresibilidad toma valores diferentes de cero, por tanto el sistema se encuentra en fase superfluida. Para 5-14c) con $N = 100$ partículas el sistema posee una compresibilidad más pequeña pero diferente de cero, así el sistema de bosones es superfluido. En 5-14d) con $N = 160$ partículas se observa una ocupación entera de $\rho = 2$, con dos átomos por sitio y la compresibilidad es cero, esto indica que el sistema se encuentra en la fase aislante de Mott. En 5-14e) con $N = 170$ partículas se observa que en los extremos de la red la compresibilidad es cero, la densidad entera y en el centro de la red encontramos la fase superfluida, lo cual corresponde a la fase de coexistencia entre el aislante de Mott y el superfluido. Finalmente en 5-14f) con $N = 220$ partículas se muestra la formación del aislante de Mott en los extremos con densidad $\rho = 3$ y superfluido en el centro, lo cual indica otro perfil de coexistencia entre el aislante y superfluido.

A continuación se presenta el diagrama de fases para una red con $L = 80$ sitios, interacción entre tres cuerpos y se considera ODC, Fig. 5-15.

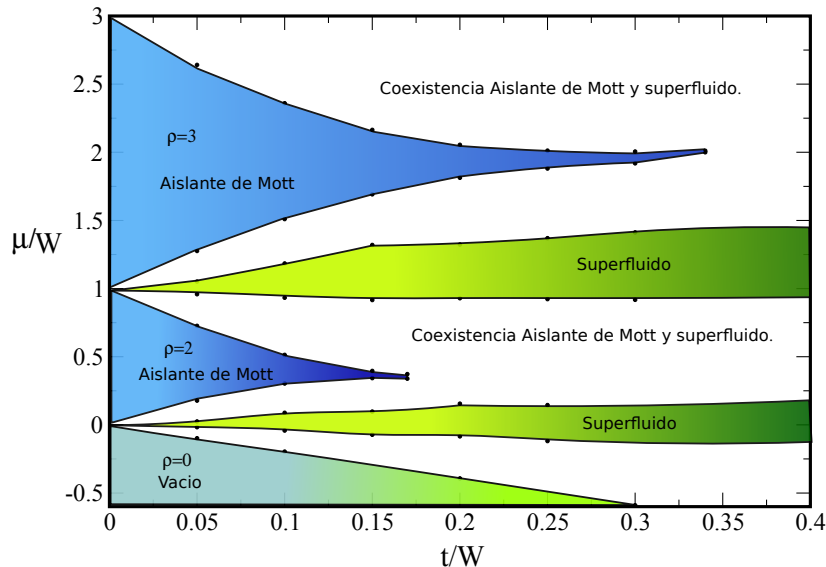


Figura 5-15: Diagrama de fases para un sistema de tamaño $L = 80$ sitios, interacción entre tres cuerpos y confinamiento no diagonal.

Se observan los lóbulos aislantes de Mott rodeados por la fase de coexistencia entre el

aislante de Mott y el superfluido. Además se observan las regiones de superfluido. Igual que los resultados obtenidos para el diagrama de fases considerando interacción entre tres cuerpos sin confinamiento externo, el lóbulo aislante de Mott con densidad $\rho = 1$ no aparece en el diagrama, el lóbulo con densidad $\rho = 2$ toma valores del potencial químico entre 0 y 1 y el lóbulo con densidad $\rho = 3$ esta en el intervalo de potencial químico entre 1 y 3. Los resultados del punto crítico para sistemas con interacción local entre tres cuerpos sin confinamiento externo (Figura 5-8), resultaron: para el lóbulo con densidad $\rho = 2$ el punto crítico es $t_c/W = 0.17$ mientras que para el lóbulo $\rho = 3$ el parámetro de salto resulta $t_c/W = 0.31$; los puntos críticos en una red de bosones con interacción entre tres cuerpos y confinamiento no diagonal resultan: para $\rho = 2$, $t_c/W = 0.17$ y para $\rho = 3$, $t_c/W = 0.35$; esto indica un aumento en el punto crítico para el lóbulo $\rho = 3$ de un sistema de bosones confinados con ODC.

Para un sistema con interacción entre tres cuerpos y confinamiento no diagonal en el límite termodinámico, se obtiene la figura 5-16 en la cual se muestra el gap de energía, por tanto, al igual que para redes finitas, la fase aislante de Mott también se obtiene para sistemas de bosones en redes en el límite termodinámico.

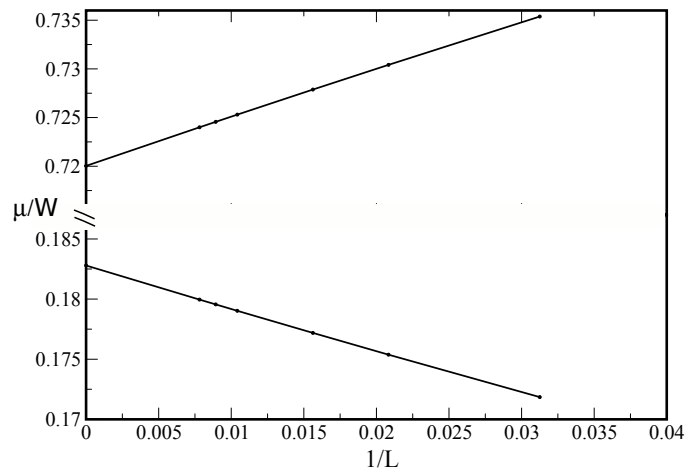


Figura 5-16: Potencial químico contra el tamaño del sistema considerando interacción entre tres cuerpos y ODC con $t/W = 0.05$. En el límite termodinámico se presenta un gap de $\Delta/W = 0.537$ para el lóbulo de densidad $\rho = 2$.

5.2.3. Interacción entre dos y tres cuerpos.

Para estudiar los efectos que se producen cuando se considera interacción repulsiva local entre dos y tres cuerpos, con las áreas aislantes de Mott o con los puntos críticos en la transición de fase, en esta sección se presenta el diagrama de fases para un sistema de tamaño $L = 80$ sitios, con interacción entre dos y tres cuerpos y confinamiento no diagonal. El Hamiltoniano se verá modificado de la siguiente forma:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + U \frac{1}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + W \frac{1}{6} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2), \quad (5-10)$$

donde el segundo y tercer término del Hamiltoniano describen la interacción entre dos y tres cuerpos respectivamente, el término t_{ij} esta dado por la ecuación 3-8 y se considera la escala de energía $U = 1$.

En la gráfica 5-17 se observan los lóbulos aislantes de Mott $\rho = 1$ y $\rho = 2$ rodeados por la fase de coexistencia entre el aislante de Mott y el superfluido. El punto crítico y las áreas aislantes de Mott aumentan con el crecimiento de la densidad, (para $\rho = 1$, $t_c/U = 0.39$ y para $\rho = 2$, $t_c/U = 0.9$).

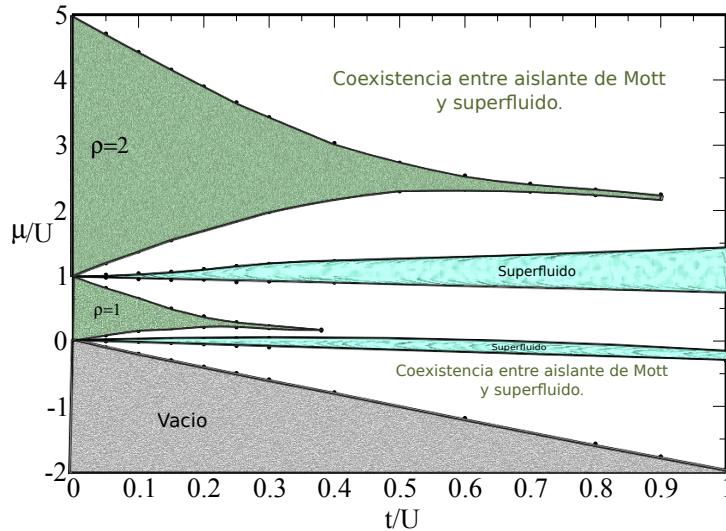


Figura 5-17: Diagrama de fases del modelo ODC con interacción entre dos y tres cuerpos para un sistema con $L = 80$ sitios y $W/U = 3$.

Adicionalmente se observa que la interacción entre tres cuerpos afecta el punto crítico de la transición del lóbulo $\rho = 1$, comparado con el mismo lóbulo presentado en el diagrama

de fases para un sistema con interacción entre dos cuerpos, ya que se esperaba que este lóbulo no cambie por su baja densidad, pero observamos un aumento en el punto crítico de $t_c/U = 0.25$ a $t_c/U = 0.39$. Se observa que el potencial químico μ_p/U cuando $t/U = 0$ cumple la relación $2U + W$ en el lóbulo $\rho = 2$ lo cual indica un aumento en el gap para interacciones entre tres cuerpos. Y por último se observa que las regiones de superfluido son más pequeñas comparadas con las regiones en los diagramas de fases hasta ahora expuestos.

6 Conclusiones

1. Se realizó el diagrama de fases de sistemas bosónicos considerando interacción entre dos cuerpos para una red en el límite termodinámico (ver figura 5-4), en este se observan lóbulos aislantes de Mott rodeados por la fase superfluida. Se encuentran los lóbulos aislantes con densidad $\rho = 1$ y $\rho = 2$ en donde el punto crítico para la transición a la fase superfluida disminuye con el aumento en la densidad y el lóbulo aislante $\rho = 1$ presenta un comportamiento reentrante.
2. El diagrama de fases para un sistema en el límite termodinámico considerando interacción entre tres cuerpos (ver figura 5-8), presenta los lóbulos aislantes de Mott $\rho = 2$ y $\rho = 3$ rodeados por la fase superfluida; aquí se destaca la ausencia del lóbulo aislante de Mott con densidad $\rho = 1$, la cual advierte que la interacción entre tres cuerpos requiere al menos una densidad global de dos bosones por sitio. Se encuentra que el lóbulo aislante de Mott $\rho = 3$ presenta el comportamiento reentrante y para $t/W = 0$ toma valores del potencial químico μ/W en el intervalo $[1, 3]$.
3. En sistemas con interacción entre dos y tres cuerpos ($W/U = 0$, $W/U = 3$ y $W/U = 7$) se calcularon los lóbulos $\rho = 1$ y $\rho = 2$ en el límite termodinámico (ver figuras 5-9 y 5-10) respectivamente. Para el lóbulo $\rho = 1$ se observa que los potenciales químicos toman valores en el intervalo $[0, 1]$ cuando $t/U = 0$ para cualquier amplitud de W/U , mientras que los puntos críticos aumentan con el incremento de la interacción entre tres cuerpos. Los resultados cambian para el lóbulo $\rho = 2$ en el intervalo del potencial químico, cuando $t/U = 0$ el potencial químico aumenta con el crecimiento del parámetro W/U en la forma $2U + W$.
4. Considerando el sistema de bosones en una red de $L = 80$ sitios bajo el confinamiento no diagonal, donde las partículas interactúan entre dos cuerpos, se realizó el diagrama de fases (ver figura 5-12) el cual expone los lóbulos aislantes de Mott puros rodeados por una fase de coexistencia entre el aislante de Mott y el superfluido; adicionalmente, se obtienen las regiones de superfluido. En el diagrama de fases los puntos críticos disminuyen con el aumento de la densidad. Si comparamos el diagrama de fases obtenido para el sistema con interacción entre dos cuerpos sin confinamiento externo, observamos que los puntos críticos para el lóbulo de densi-

dad $\rho = 1$ presentan un cambio: sin ODC resulta $t/U = 0.3$ mientras que con ODC se obtiene $t/U = 0.25$.

5. El diagrama de fases de un sistema con $L = 80$ sitios (ver figura 5-15), ODC e interacción entre tres partículas presenta las fases aislante de Mott, superfluida y la fase de coexistencia entre aislante de Mott y superfluido. Aparecen los lóbulos aislantes con densidad $\rho = 2$ y $\rho = 3$ cuyos puntos críticos aumentan con la densidad y comparado con los resultados para una red en el límite termodinámico sin confinamiento externo, los puntos críticos no presentan un cambio significativo.
6. Finalmente para un sistema con $L = 80$ sitios en el cual consideramos interacción entre dos y tres cuerpos con una amplitud de $W/U = 3$, (ver figura 5-17), encontramos lóbulos aislantes de Mott $\rho = 1$ y $\rho = 2$ rodeados por la fase de coexistencia entre el aislante de Mott y el superfluido, además encontramos las áreas de fase superfluida. Observamos un aumento significativo en las regiones aislantes de Mott en la medida en que aumenta la densidad, este incremento se ve reflejado en los valores que toma el potencial químico para el lóbulo $\rho = 2$, $([1, 5])$, cuando el parámetro de salto es $t/W = 0$. Adicionalmente los puntos críticos aumentan con la densidad y presentan valores grandes comparados con otras consideraciones de interacción y ODC.

7 Apéndice

7.1. Density Matrix Renormalization Group

El método del Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG) fue desarrollado por White[35], con la idea de solventar las limitaciones numéricas que aparecían en sistemas fuertemente correlacionados en 1D, cuando se aplicaba el grupo de renormalización (RG) numérico estándar de Wilson [36].

En los acercamientos de RG para modelos unidimensionales, la primera iteración empieza partiendo el sistema en bloques idénticos de tamaño finito, en general, se procura que cada bloque esté constituido por un sólo sitio. Para cada bloque \mathbf{B} se tiene un Hamiltoniano H_B . Se aíslan un par de bloques \mathbf{BB} y se obtiene el respectivo Hamiltoniano H_{BB} . El anterior Hamiltoniano se diagonaliza obteniendo los m estados más bajos $|u_\alpha\rangle$. De las representaciones matriciales de los operadores importantes para \mathbf{B} se obtienen las correspondientes representaciones para el bloque \mathbf{BB} . Se realiza un cambio de base a los $|u_\alpha\rangle$ usando la transformación $H'_B = OH_{BB}O^\dagger$, con $O_{i1i2} = u_{i1i2}$. Se reemplaza \mathbf{B} por \mathbf{B}' y se sigue la iteración hasta que se alcanza la longitud deseada.

Cuando se obtienen los autovalores del Hamiltoniano se escogen los m valores más bajos como estados representativos para el bloque \mathbf{BB} . Ya que no existe conexión entre este bloque y el resto de la red, sus autoestados poseen comportamientos no deseados como nodos en los extremos del bloque. Un ejemplo en el cual el método de Wilson falla es el caso de la partícula en un pozo (ver figura 7-1).

Para analizar cuales estados deben tomarse en cuenta, el bloque debe estar inmerso en algún ambiente imitando un baño estadístico que permita determinar el límite termodinámico del bloque \mathbf{B} . Debe entonces tomarse un bloque, (el superbloque) que incluya el bloque \mathbf{BB} , diagonalizar este Hamiltoniano y de alguna manera proyectar los estados más importantes sobre \mathbf{BB} .

El DMRG propone la matriz densidad como la manera más óptima de proyectar los mejores estados sobre una parte del superbloque, evitando comportamientos no esperados en los bloques que lo forman. La notación $\mathbf{B}(l,m)$ indica un bloque \mathbf{B} compuesto de l si-

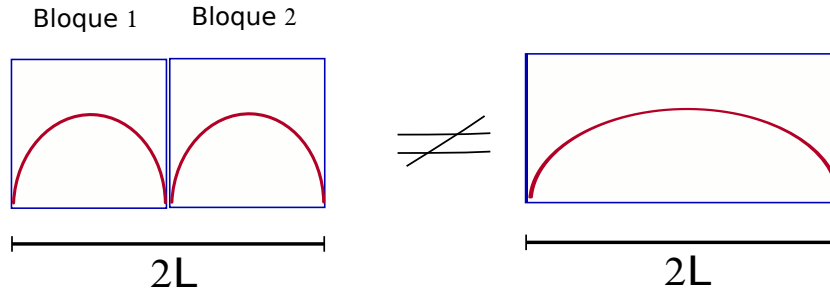


Figura 7-1: Resultado de unir dos bloques en el problema de la partícula en una caja: la función de onda del estado base de una partícula en una caja es diferente a lo que se obtendría si uniéramos dos cajas (bloques) de longitud L cada una.

tios en un espacio de Hilbert m -dimensional y \mathbf{a} representa un solo sitio. Por lo tanto el superbloque está representado por $[\mathbf{B}(l,m)\mathbf{a}\mathbf{B}(l',m)]$ donde su longitud total es $l + l' + 2$.

El universo (superbloque) está compuesto de dos partes: el sistema, compuesto de un bloque-sitio y el ambiente constituido por un sitio-bloque. El límite termodinámico es ahora imitado introduciendo el sistema en un ambiente de igual longitud. El objetivo final es, en general, el estado base del superbloque pero el algoritmo depende del tamaño del sistema, por tanto a continuación se introducen los procedimientos para sistemas infinitos y finitos.

7.1.1. Método de sistema infinito.

Se consideran sistemas unidimensionales con interacción entre los vecinos más cercanos donde cada sitio se caracteriza por vivir en un espacio de Hilbert de D dimensiones. El procedimiento que se realiza tiene el objetivo de encontrar un estado base aproximado para un sistema infinito, el algoritmo se aplica varias veces hasta conseguir las propiedades del estado base con valores que convergen (por ejemplo la energía por sitio).

El algoritmo empieza con un bloque compuesto de un sitio, $\mathbf{B}(1,D)$ cuyo Hamiltoniano está dado por \hat{H}_B , este Hamiltoniano incluye únicamente términos locales. Para construir el sistema se suma un sitio (\mathbf{a}) al bloque anterior a la derecha del mismo $[\mathbf{B}(1,D)\mathbf{a}]$, el Hamiltoniano es igual a la suma de los Hamiltonianos del bloque y del sitio más un término de interacción:

$$\hat{H}_E = \hat{H}_B + \hat{H}_a + \hat{H}_{Ba}, \quad (7-1)$$

el sistema se acopla con otro bloque que tenga simetría de reflexión cuyo Hamiltoniano es $\hat{H}_{E'}$. Así, para construir el Hamiltoniano del superbloque se suman los Hamiltonianos

del sistema y el ambiente más el Hamiltoniano adicional de interacción:

$$\hat{H}_{supB} = \hat{H}_E + \hat{H}_{E'} + \hat{H}_{aa'}, \quad (7-2)$$

Luego de obtener el Hamiltoniano, este se diagonaliza para obtener el estado base $|\phi_G\rangle = \phi_{a\alpha\beta b}$, donde los índices latinos estan sumando sobre los bloque y los índices griegos estan sumando sobre los sitios. Luego se evalúa la matriz densidad reducida de $|\phi_G\rangle$ del sistema izquierdo por medio de la traza del derecho:

$$\hat{\rho}_L = Tr_R |\phi_G\rangle\langle\phi_G| = \phi_{a\alpha\beta b} \phi_{a'\alpha'\beta b} |a\alpha\rangle\langle a'\alpha'|. \quad (7-3)$$

Se prosigue con la idea de renormalizar el sistema, cuya finalidad es encontrar una representación en términos de una base reducida con máximo m elementos. Estos m elementos estarán representados por m_{l+1} ($l+1$ indica el tamaño del sistema) y esta dado por: $m_{l+1} = \min(m_l D, m)$. Si m es más grande que D^2 entonces no se trunca la base en el primer paso. El truncamiento empieza cuando tenemos $m < D^l$. Así, se forma la matriz de truncamiento $m_l D \times m_{l+1} = \hat{O}_{l \rightarrow l+1}$. EL resultado en el proceso de renormalización es un sistema truncado en un bloque $\mathbf{B}(l+1, m_{l+1})$, el cual coincide con un nuevo bloque de inicio para la próxima iteración DMRG.

El Hamiltoniano del nuevo bloque resultla:

$$\hat{H}_{B'} = \hat{O}_{l \rightarrow l+1}^\dagger \hat{H}_E \hat{O}_{l \rightarrow l+1}, \quad (7-4)$$

y los operadores locales que aparecen en el Hamiltoniano se reescriben de la siguiente forma:

$$\hat{S}'_{l+1} = \hat{O}_{l \rightarrow l+1}^\dagger \hat{S}_{l+1} \hat{O}_{l \rightarrow l+1}, \quad (7-5)$$

escritos en la nueva base. Se puede observar que el procedimiento garantiza aumentar el tamaño de nuestro sistema sin aumentar el número de estados, operando iterativamente el procedimiento anterior.

Adicionalmente, por cada paso del DMRG se introduce un error de truncamiento dado por:

$$\epsilon_{tr} = \sum_{i>m} w_i, \quad (7-6)$$

donde los w_i son los autovalores de la matriz densidad reducida en orden decreciente. Por tanto, para realizar una simulación confiable del DMRG el parámetro m debe ser elegido tal que ϵ_{tr} permanezca pequeño.

7.1.2. Método de sistema finito.

La idea del sistema finito es detener el procedimiento para un sistema infinito en alguna longitud del superbloque de longitud fija l_{max} . Para llevar a cabo lo anterior y permitir que el procedimiento continúe sin aumentar la longitud l_{max} del superbloque, la medida de un bloque debe aumentar mientras que la medida del reflejado disminuye. La transformación de la base se lleva únicamente a cabo para el bloque que crece.

Inicialmente el sistema se forma con dos bloques: $\mathbf{B}(l_{max}/2 - 1, m)$ y dos sitios libres. La convergencia de los valores mejora por el procedimiento de barrido.

Después del primer paso, el superbloque resultante es:

$$\mathbf{B}(l_{max}/2, m) \mathbf{a} \mathbf{a} \mathbf{B}(l_{max}/2 - 2, m),$$

luego el bloque de la izquierda va creciendo hasta llegar al bloque con $\mathbf{B}(l_{max} - 3, m)$ y el bloque de la derecha con $\mathbf{B}(1, D)$. Finalmente, el rol del bloque derecho cambia por el rol del bloque izquierdo hasta que se obtiene convergencia en los autovalores de los parámetros del estado base.

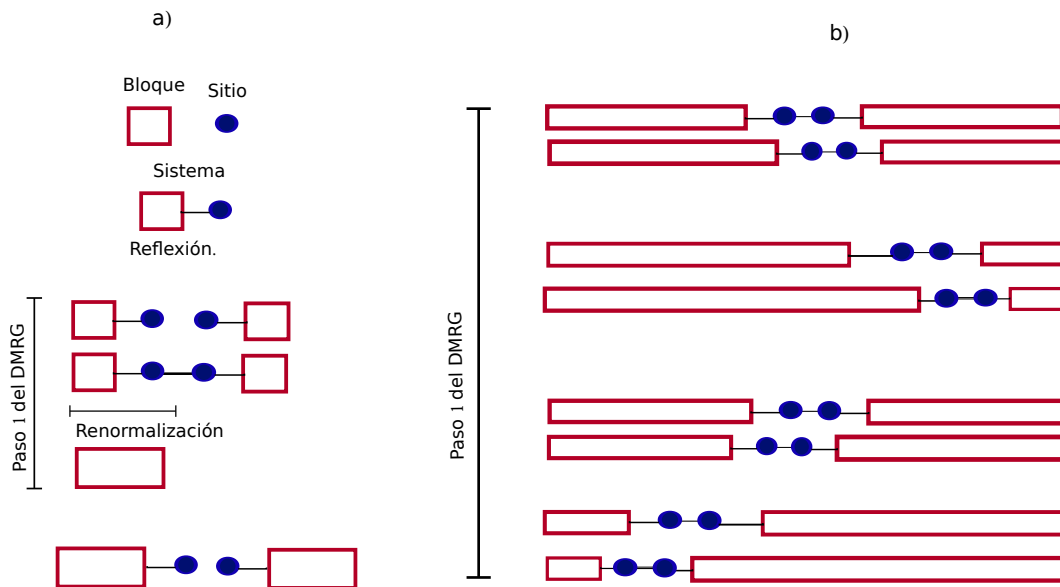


Figura 7-2: Procedimiento esquemático para el algoritmo DMRG. a) Se muestra una iteración del algoritmo DMRG para un sistema infinito y en b) se observa un paso completo del algoritmo DMRG para un sistema finito.

7.2. Transición de fase cuántica

7.2.1. Definición de Transición de Fase Cuántica.

Una transición de fase cuántica consiste de un punto de no analiticidad en la gráfica de energía en función de un parámetro de acople g . Cuando el Hamiltoniano tiene la forma general $\hat{H}(g) = \hat{H}_0 + g\hat{H}_1$, donde \hat{H}_0 y \hat{H}_1 conmutan, es decir, pueden ser diagonalizados simultáneamente, las auto-funciones son independientes de g , pero los autovalores depende estrictamente de este parámetro. Por tanto, se puede obtener el caso en el que dos rectas pertenecientes al mismo estado se crucen en $g = g_c$, donde g_c es un punto de no analiticidad donde ocurrirá una transición de fase cuántica.[34].

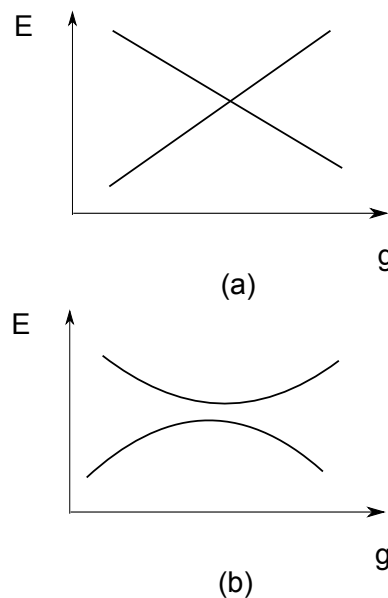


Figura 7-3: Energía en función del parámetro de acople. Los valores de energía de un sistema en el estado base como función de alguna constante de acople adimensional g para una red finita, en la cual, dos comportamientos distintos del mismo estado se encuentran en un punto de no analiticidad $g = g_c$. (a) Niveles de energía que se cruzan, (b) Tomado de [34]

Como se muestra en la Fig 7-3, se pueden obtener dos tipos de no analiticidad, en el caso de 7-3(a) las rectas de energía en el mismo estado de un sistema se cruzan, mientras que en 7-3(b) es posible que las gráficas de energía en función de g se eviten. El comportamiento en 7-3(a) es un comportamiento típico de las transiciones de fase de segundo orden, las cuales describen la mayoría de las transiciones cuánticas. En esta clase de transiciones, las fluctuaciones de los parámetros que guían el sistema al punto crítico, disminuyen gradualmente a medida que g se acerca a g_c y es posible describir el paso por

el punto crítico a través de funciones de exponentes críticos y longitudes de correlación.

A diferencia de las transiciones de fase termodinámicas, donde las fluctuaciones y los parámetros que guían las transición son parámetros térmicos, las fluctuaciones en las transiciones cuánticas se deben a parámetros no termodinámicos -número de partículas, potenciales químicos, etc- y las fluctuaciones cuánticas crecen a medida que disminuye la temperatura hasta el cero absoluto. Por esto las transiciones cuánticas se definen únicamente en temperaturas de cero absoluto, de tal forma que no habrán fluctuaciones de carácter térmico.

Las fluctuaciones cuánticas están regidas por el principio de incertidumbre de Heisenberg, el entendimiento de estas fluctuaciones fue el fundamento para explicar fenómenos como las propiedades del ${}^4\text{He}$ a temperaturas bajas, donde el tamaño y la energía de enlace del átomo daban cuenta de la energía del punto cero, para luego estudiar otras propiedades de este líquido cuántico¹.

Así, para sistemas en el cero absoluto, todas las fluctuaciones térmicas desaparecen y las fluctuaciones cuánticas prevalecen. Estas fluctuaciones cuánticas microscópicas pueden inducir transiciones de fase macroscópicas en el estado base de un sistema de muchos cuerpos.

¹Para explicar porqué el Helio no se congela cuando la temperatura tiende al cero absoluto-fenómeno ampliamente interesante- se calcula el aumento en la energía cinética de los átomos, los cuales ven su región espacial más reducida: cuando $T = 0$ su densidad constituye $0,145\text{g/cm}^3$, y su masa atómica, 4. A cada átomo le corresponde un volumen de $V = M/\rho N \approx 4 \times 10^{-23}\text{cm}^3$. Por tanto, el diámetro de la región ocupada por el átomo, $d = (6V/\pi)^{1/3} \approx 4.5 \times 10^{-10}$, por consiguiente como $p \cdot d \approx h$, la energía de las oscilaciones nulas de los átomos del ${}^4\text{He}$ es del orden de $E_0 \approx p^2/2Md^2 \approx 1.4 \times 10^{-22}\text{J}$. En la escala de temperatura corresponde a 10K, el cambio en la energía cinética con el enfriamiento es muy pequeño.[33]

Bibliografía

- [1] G. J. CRUZ, R. FRANCO y J. SILVA-VALENCIA. Bose-Hubbard model with local two- and three-body interaction under off-diagonal confinement. *J. Phys.: Conf. Ser.* **480** 012003, 2014.
- [2] V. G. ROUSSEAU, G. G. BATROUNI, D. E. SHEEHY, J. MORENO y M. JARRRELL. Pure Mott Phases in Confined Ultracold Atomic Systems. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 167201. 2010.
- [3] S. WILL, T. BEST, U. SCHNEIDER, L. HACKERMÜLLER, D. LÜHMANN y I. BLOCH. Time-resolved observation of coherent multi-body interactions in quantum phase revivals. *Nature* **465** 09036. 2010.
- [4] M.H. ANDERSON, J. R. ENSSHER, M.R MATHEWS, C..E WIEMAN, y E. A. CORNELL. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science* **269**, 1995.
- [5] M. GREINER, O. MANDEL, T. ESSLINGER, T. W. HANS y I. BLOCH, Quantum Phase Transition From a Superfluid to a Mott insulator in a Gas of Ultracold Atoms, *Nature* **415**, 2002.
- [6] J. HUBBARD. Electron Correlations in Narrow Energy Bands, *Proc. R. Soc, London. Ser. A.* **276**. 1963.
- [7] M. C. GUTZILLER. Effect of correlation on the ferromagnetism of Transition Metals. *Progress of Theoretical Physics* **30**, no.3. 1963.
- [8] C. PIERS. *Introduction to Many Body Physics*. 2011.
- [9] P. A. FISHER, P. A. WEICHMAN, G. GRINSTEIN, S. FISHER. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev B.* **40** 1. 1989
- [10] M. A. CAZALILLA, R. CITRO, T. GIAMARCHI, E, ORIGNAC, M, RIGROL. One dimensional Bosons: From condensed matter system to ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1405–1466. 2011.

-
- [11] N. WADA, J. TANIGUCHI, H. IKEGAMI, S. INAGAKI y Y. FUKUSHIMA. Helium-4 Bose Fluids Formed in One-Dimensional 180 Diameter Pores. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4322, 2001.
- [12] J. TANIGUCHI, Y. AOKI, y M. SUZUKI. Superfluidity of liquid ^4He confined to one-dimensional straight nanochannel structures. *Phys. Rev. B* **82**,104509. 2010.
- [13] P. L. GOULD, G. A. RUFF y D. E. PRITCHARD, Diffraction of atoms by light: The near-resonant Kapitza-Dirac effect. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 827. 1988.
- [14] P. J. MARTIN, B. G. OLDAKER, A. H. MIKLICH, y D. E. PRITCHARD. Bragg scattering of atoms from a standing light wave. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 515. 1988.
- [15] C. S. ADAMS, M. SIEGEL y J. MLYNEK, *Phys. Rep* **240**, 143. 1994.
- [16] A. HEMMERICH, and T. W. HÄNSCH, Two-dimesional atomic crystal bound by light. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 410. 1993.
- [17] M. WEIDMLLER, A. HEMMERICH, A. GORLITZZ, T. ESSLINGER, and T. W. HÄNSCH, Bragg Diffraction in an Atomic Lattice Bound by Light. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4583. 1995.
- [18] S. PEIL, et. al. Patterned loading of a Bose-Einstein condensate into an optical lattice. *Phys. Rev. A* **67**, 051603 2003.
- [19] J. H. DENSCHLAG, et.al. *J. Phys. B* **35**, 3095 2002.
- [20] A. M. REY. Ultracold Bosonics Atoms in Optical Lattices, University of Maryland at College Park, 2004.
- [21] D. JAKSCH, C. BRUDER, J.I. CIRAC, W. GARDINER. y P. ZOLLER. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett* **81**, 3108. 1998
- [22] G. G. BATROUNI y V. ROUSSEAU. Mott Domains of Bosons Confined on Optical Lattices *Phys. Rev. Lett* **89**, 117203. 2002
- [23] S. STRINGARI, Bose-Einstein condensation and superfluidity in trapped atomic gases. arXiv:cond-mat/0101299v1. 2008,
- [24] W. KETTERLE, Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. *Rev. Mod. Phy.* **74**, octubre 2002.

- [25] D. F. WALLS, G. J. MILLBURN. *Quantum Optics*, 2th Edición. Springer.
- [26] M. GREINER, O MANDEL, T. H. HÄNSCH y I. BLOCH. Collapse and revival of the matter wave field of a Bose–Einstein condensate. *Nature* **419** 00968, 2002.
- [27] T. KÜHNER, S. WHITE, H. MONIEN. One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbor interaction. *Phys. Rev. B*, **61** 12474, 2000.
- [28] J. SILVA-VALENCIA y A. M. C. SOUZA. Superfluid-to-Mott insulator transition of bosons with local three-body interactions. *Eur. Phys. J. B* **85**:161 2012.
- [29] T. SOWIŃSKI. Exact diagonalization of the one-dimensional Bose-Hubbard model with local three-body interactions. *Phys. Rev. A*. **85** 065601. 2012.
- [30] S. EJIMA, F. LANGE y H. FEHSKE. One-dimensional Bose-Hubbard model with local three-body interactions. *Phys. Rev. A*. **88**, 063625, 2013.
- [31] J. SILVA.VALENCIA, A. M. C. SOUZA, First Mott Lobe of bosons with two- and three-body interactions, *Physical Review A* **84** 065601. 2011.
- [32] C. A. DAVILA, *Entreveramiento en Redes Bosónicas Unidimensionales*, Universidad Nacional de Colombia. 2011
- [33] V. EDELMAN. *Cerca del cero absoluto*, Editorial MIR Moscú.1986
- [34] S. SACHDEV, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press. 1998.
- [35] S. WHITE. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863–2866. 1992.
- [36] K. G. WILSON. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773–840 1975.
- [37] S. EJIMA, H. FEHSKE, y F. GEBHARD, Dynamical Properties of the one-dimensional Bose Hubbard model. *Eur. Phys. Lett.* **93**, 30002. 2011.
- [38] P. KRÜGER, S. HOFFERBERTH. I. E. MAZETS, L. LESANOVKSKY y J. SCHMIEDMAYER. Weakly interacting Bose gas in the one-dimensional limit. arXiv:101012.3048v1

-
- [39] N. GEMELKE, X. ZHANG, C.-L. HUNG, y C. CHIN, In-situ observation of incompressible Mott-insulating domains of ultracold atomic gases. *Nature (London)* **460**, 995. 2009.
- [40] B. L. CHEN, X. B. HUANG, S. P. KHOU. y Y. ZHANG. Mott-Hubbard transition of bosons in optical lattices with three-body interactions. *Phys. Rev. A* **78** 043603 2008
- [41] K. ZHOU, Z. LIANG y Z. ZHANG Quantum phases of a dipolar Bose-Einstein condensate in an optical lattice with three-body interaction. *Phys. Rev. A.* **82** 013634. 2010.
- [42] J. J. JIMENEZ. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad: Aplicación al Modelo XXZ Inhomogéneo. Universidad Nacional de Colombia. 2005