



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

# FASES CUÁNTICAS DE MEZCLAS DE ÁTOMOS BOSÓNICOS Y FERMIÓNICOS EN UNA DIMENSIÓN.

**Richard Giovanni Avella Sarmiento**

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ciencias  
Departamento de Física  
Bogotá, Colombia  
2020





UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

# QUANTUM PHASES OF BOSONIC AND FERMIONIC ATOMS MIXTURE IN ONE DIMENSION.

**Richard Giovanni Avella Sarmiento**

Universidad Nacional de Colombia  
Sciences Faculty  
Department of Physics  
Bogotá, Colombia  
2020



# FASES CUÁNTICAS DE MEZCLAS DE ÁTOMOS BOSÓNICOS Y FERMIÓNICOS EN UNA DIMENSIÓN.

**Richard Giovanni Avella Sarmiento**

Tesis de investigación presentado como requisito parcial para optar el  
título de: **Doctor en Ciencias-Física**

Director:

Ph.D. Jereson Silva Valencia  
Universidad Nacional de Colombia

Codirector:

D. Phil. Juan Jose Mendoza Arenas  
Universidad de los Andes

Línea de investigación:

Mecánica Cuántica

Grupo de Investigación:

Sistemas Correlacionados

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias

Departamento de Física

Bogotá, Colombia

2020

## AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo no hubiera sido posible sin la colaboración y el soporte de los docentes integrantes del grupo de Sistemas Correlacionados de la Universidad Nacional de Colombia.

En primer lugar quiero agradecer al doctor Jerson Silva Valencia, por brindarme la oportunidad de ser parte del grupo de sistemas correlacionados. También quiero agradecerle por sus enseñanzas y orientación en la presente investigación. Ha sido una experiencia enriquecedora, tanto a nivel personal como profesional, trabajar en el grupo que dirige.

También quiero agradecer enormemente al doctor Juan Jose Mendoza, quien con su gran habilidad para generar nuevas ideas, propiciar discusiones y aportar al desarrollo de los diferentes temas, contribuyó en mi formación profesional.

Un especial agradecimiento a la doctora Yesenia Arredondo León, de la Escuela Nacional de Estudios Superiores unidad Morelia UNAM, quien me acogió, orientó y brindó las herramientas necesarias para desarrollar mi trabajo de investigación durante la pasantía doctoral.

Agradezco al Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (Colciencias), entidad que financió mis estudios de doctorado por medio de la convocatoria 727 de 2015 y por medio de los proyectos FP44842-135-2017, 42133 y 41402.

Por último quiero agradecer a todos por los que contribuyeron de una u otra manera en este trabajo.

## Publicaciones y Presentaciones

Durante la realización del presente trabajo se publicó parte de la investigación:

1. **Artículo en revista internacional.** Insulator phases of a mixture of spinor fermions and hard-core bosons. R. Avella, J. J. Mendoza-Arenas, R. Franco, and J. Silva-Valencia. Phys. Rev. A 100, 063620 (2019).
2. **Artículo sometido en Phys. Rev. A.** Mixture of scalar bosons and two-color fermions in one dimension: Superfluid-insulator transitions. R. Avella, J. J. Mendoza-Arenas, R. Franco, and J. Silva-Valencia. AR11901 Avella. arXiv:2003.09421 [cond-mat.quant-gas].

Parte de este trabajo se presentó en el siguiente evento internacional:

1. **5<sup>th</sup> International meeting for researchers in materials plasma and technology-IMRMPT.** Ponente oral. Cúcuta Mayo 2019.

## Resumen

Las mezclas de partículas que satisfacen diferentes estadísticas han suscitado gran interés tanto teórico como experimental en la últimas décadas, debido a la posibilidad de confinar y manipular gases cuánticos en redes ópticas a bajas temperaturas.

En este trabajo se estudia el estado fundamental de un sistema unidimensional, conformado por fermiones con espín  $1/2$  que interactúan con bosones escalares, por medio del Hamiltoniano Bose-Fermi-Hubbard; este Hamiltoniano no tiene solución exacta, por lo que se hace uso de la técnica conocida como grupo de renormalización de la matriz densidad.

En esta investigación se encontró, que además de los estados aislantes relacionados con cada uno de los portadores y considerando una interacción de tipo repulsivo entre bosones y fermiones, surgen dos fases aislantes debidas a la mezcla Bose-Fermi. Uno de estos estados emerge, cuando la densidad total de partículas es conmesurable con el número de sitios de la red y cumple con la relación  $\rho_B + \rho_F = n$  ( $n = 1, 2$ ); este estado se denomina estado aislante de Mott mezclado. Los otros estados aislantes surgen, cuando la densidad total de partículas no es conmesurable, cumplen con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = n$  ( $n = 1, 2$ ) y se ubican entre los estados aislantes de Mott triviales. Al considerar que la interacción bosón-fermión es de tipo atractivo, se encontraron estados aislantes no conmesurados que cumplen con las relaciones  $\rho_B - \rho_F = n$  y  $\rho_B - \frac{1}{2}\rho_F = n$  con  $n = 0, \pm 1$ .

Teniendo en cuenta los diferentes resultados experimentales, en este trabajo también se consideró el efecto de un potencial de confinamiento de tipo armónico sobre la mezcla de Bose-Fermi y se encontró un estado fundamental caracterizado por la coexistencia de regiones aislantes y regiones superfluidas. En particular se encontró la coexistencia de un aislante de Mott bosónico y fermiónico en el centro del potencial de confinamiento. También se encontraron estados con diferentes configuraciones de separación de fase.

Los modelos que se estudiaron, pueden ser realizados con las técnicas actuales de atrapamiento y confinamiento de átomos ultrafríos en redes ópticas y se espera que este trabajo estimule nuevas investigaciones.



**Palabras clave**

1. Partículas fermiónicas.
2. Partículas bosónicas.
3. Mezclas Bose-Fermi.
4. Modelo Bose-Fermi-Hubbard.
5. Grupo de renormalización de la matriz densidad.
6. Transiciones de fase cuánticas.

**Keywords**

1. Fermionic Particles.
2. Bosonic Particles.
3. Fermi-Hubbard Model.
4. Bose-Fermi-Hubbard Model.
5. Density matrix renormalization group.
6. Quantum phase transitions.

## Índice

<b>Índice de Figuras</b>	<b>XII</b>
<b>Índice de Cuadros</b>	<b>XIX</b>
<b>1. INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS</b>	<b>6</b>
2.1. Gases cuánticos de bosones . . . . .	6
2.2. Obtención del CBE . . . . .	9
2.3. CBE en redes ópticas . . . . .	11
2.4. Gases cuánticos de fermiones . . . . .	14
2.5. Gases cuánticos ultrafríos conformados por bosones y fermiones . . . . .	17
<b>3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD</b>	<b>20</b>
3.1. Hamiltoniano de Hubbard . . . . .	20
3.2. Hamiltoniano Fermi Hubbard . . . . .	23
3.3. Hamiltoniano Bose-Hubbard . . . . .	25
3.4. Modelo Bose-Fermi-Hubbard . . . . .	27
3.4.1. Mezclas Bose-Fermi sin espín . . . . .	29
<b>4. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG)</b>	<b>33</b>
4.1. Método de sistema infinito . . . . .	36
4.2. Método de sistema finito . . . . .	38
4.3. Transformación de función de onda . . . . .	39
4.4. Ajuste dinámico del número de estados de bloque . . . . .	40
4.5. Simetrías . . . . .	40
4.6. Valores esperados . . . . .	41

<b>5. FERMIONES CON ESPÍN <math>S = 1/2</math> Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”</b>	<b>43</b>
5.1. Medio llenado fermiónico $\rho_F = 1$ . . . . .	46
5.2. Otros llenados . . . . .	51
5.3. Imbalance de masas . . . . .	55
5.4. Conclusiones . . . . .	56
<b>6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”</b>	<b>58</b>
6.1. Acoplamiento bosón-fermión repulsivo ( $U_{BF} > 0$ ) . . . . .	60
6.2. Acoplamiento bosón-fermión atractivo ( $U_{BF} < 0$ ) . . . . .	64
6.3. Conclusiones . . . . .	68
<b>7. MEZCLA DE BOSONES Y FERMIONES CONFINADOS EN UN POTENCIAL ARMÓNICO</b>	<b>70</b>
7.1. Mezclas Bose-Fermi en potenciales armónicos . . . . .	73
7.2. Efecto de la amplitud de la trampa. . . . .	75
7.3. Efecto del cambio en el número de bosones y de fermiones . . . . .	76
7.4. Efecto del cambio en los parámetros de interacción . . . . .	78
7.5. Conclusiones . . . . .	79
<b>8. CONCLUSIONES</b>	<b>81</b>
8.1. Perspectivas . . . . .	82
<b>REFERENCIAS</b>	<b>84</b>

Índice de figuras

1.	Formación de un CBE. a) A altas temperaturas la interacción entre las partículas del gas es débil y la longitud de onda de De Broglie es más pequeña que la distancia $d$ de separación entre partículas, como se observa en la figura. b) Cuando la temperatura desciende, la longitud de onda de De Broglie aumenta su tamaño de forma $\lambda_{dB} \propto T^{-1/2}$ . c) Cuando $T = T_c$ la distancia de separación entre las partículas $d$ es comparable a la longitud de onda térmica de De Broglie, $\lambda_{dB} = d$ . A esta temperatura se encuentran partículas en el estado normal (nube térmica) y partículas en el estado condensado. d) Cuando la temperatura es cercana a cero, la nube térmica desaparece dando lugar a un CBE puro (figura tomada de [81]). . . . .	8
2.	Mesa de vacío: Por medio del enfriamiento láser se disminuye la temperatura de los átomos confinados en la cámara TMO hasta el orden de los microkelvin. Luego para alcanzar la temperatura de condensación, se utiliza la técnica de enfriamiento evaporativo en la cámara de ciencia, donde se realizan los diferentes estudios y se obtienen las imágenes de absorción. Figura tomada de [92]. . . . .	10
3.	Distribución de momentos para un gas de átomos de rubidio. El color rojo indica que se tienen pocos átomos en cada una de las velocidades, la coloración blanca y azul indican una concentración de átomos en el estado condensado. La fracción no condensada se ilustra mediante el color verde y el amarillo. La gráfica de la izquierda representa la distribución de momentos antes de la condensación para $T > T_c$ (sobre 400 nK) con una densidad de partículas de $2.6 \times 10^{12} cm^{-3}$ , la gráfica del centro es la distribución de momentos inmediatamente después de la condensación para $T < T_c$ (sobre 200 nK) con una densidad de partículas de $2 \times 10^{10} cm^{-3}$ y la de la derecha indica la distribución de momentos luego de cierta evaporación $T \ll T_c$ (sobre 50 nK) con $\approx 2000$ átomos. El ancho mínimo en la distribución de velocidades de los átomos, es debido a que se encuentran confinados. Figura tomada de [2]. . . . .	11
4.	Red óptica: a) Red óptica en dos dimensiones generada por la superposición de dos ondas estacionarias. b) Red óptica en tres dimensiones generada por la superposición de tres ondas estacionarias. Figura tomada de [94]. . . . .	12
5.	Para medir la de coherencia entre los diferentes sitios al variar el potencial de la red, se apaga el potencial de confinamiento y se permite una expansión libre de las funciones de onda de los bosones. Mediante esta técnica se obtienen las diferentes imágenes de absorción de los patrones de interferencia entre ondas de materia. En la figura se muestra la transición entre la fase superfluida donde existe coherencia de la función de onda, a la fase aislante donde se pierde la coherencia. Figura tomada de [38]. . . . .	13
6.	Perfil de densidad y líneas de corte para átomos ultrafríos de Cesio. A) Régimen superfluido. B) Transición de fase C) Régimen aislante de Mott. La línea roja discontinua indica la densidad esperada para un átomo por sitio. Figura tomada de [95]. . . . .	14

7.	Imágenes del tiempo de vuelo para una nube molecular constituida por átomos de $^{40}\text{K}$ . a) Diagrama de superficie de la densidad óptica creada por medio de resonancia Feshbach para una temperatura de $0.19 T_F$ (izquierda) y $0.06T_F$ (derecha). Esta fase se caracteriza por una pronunciada distribución del momento bimodal y por ser una nube de moléculas débilmente unidas. b) Sección transversal para la fracción no condensada a temperatura $T=0.90T_c$ (izquierda) y fracción condensada a $T=0.49T_c$ (derecha). $T_c$ es la temperatura crítica para un CBE no interactuante en equilibrio térmico. Figura tomada de [96]. . . . .	15
8.	Esquema de la doble trampa magneto-óptica. El tubo de transferencia permite crear una diferencia de presión entre los dos MOTs. Para disminuir la temperatura de los átomos se utiliza la técnica del enfriamiento evaporativo por medio de un campo de microondas generado por una pequeña bobina. Por último se liberan los átomos de la trampa y se estudian por medio del dispositivo de carga acoplada. Figura tomada de [13]. . . . .	16
9.	Doble ocupación como función del número total de átomos en el régimen no interactuante y en el régimen aislante de Mott. a.) En el régimen no interactuante se observa un incremento de la doble ocupación a medida que se aumenta el número de partículas (círculos vacíos). b.) En el régimen de interacción fuerte la doble ocupación es inferior al 2% para un número pequeño de átomos lo cual indica que el número de partículas en cada sitio permanece constante (círculos sólidos). Las líneas rojas y azules representan el valor teórico esperado en el límite atómico. Figura tomada de [98]. . . . .	17
10.	Densidad fermiónica $\rho$ como función del potencial químico $\mu$ . En la gráfica se considera que el valor del término de tunelamiento es $t = 0$ . La fase aislante de Mott surge a medida que se disminuye la temperatura. Figura tomada de [130]. . . . .	24
11.	a) Diagrama de fases del modelo Fermi-Hubbard en una dimensión a $T = 0$ . b) Representación de los estados aislantes. El estado aislante de banda se caracteriza por un gap entre la banda de valencia y la banda de conducción, además de tener dos ( $\rho_F = 2$ ) o cero ( $\rho_F = 0$ ) fermiones por sitio. Cuando $\rho_F = 1$ se tiene un aislante de Mott y como se observa en la gráfica, los fermiones con espín arriba se alternan con los fermiones con espín abajo. Este comportamiento se conoce como onda de densidad de espín (SDW). . . . .	25
12.	Diagrama de fase del estado base para el modelo Bose-Hubbard en una dimensión con el método numérico DMRG a $T = 0$ . A medida que la razón $t/U$ disminuye el sistema presenta una transición de fase desde la fase superfluida (SF) a la fase aislante de Mott (MI). La transición de fase se produce cuando la interacción de tipo repulsivo entre las partículas bosónicas $U$ , es mayor que la amplitud de tunelamiento $t$ , esto provoca una pérdida en la coherencia ocasionando que cada uno de los sitios de la red se llene con el mismo número de átomos (estado aislante de Mott). Figura tomada de [131]. . . . .	26
13.	Transición desde la fase superfluida a la fase aislante de Mott. a) En la fase superfluida los átomos son libres por toda la red provocando coherencia entre los sitios y al liberar la nube atómica ésta se expande y genera un patrón de interferencia. b) En el estado aislante solo existe un bosón por sitio y no hay coherencia entre los diferentes pozos por lo cual no se observa ningún patrón de interferencia. Figura tomada de [38]. . . . .	27

14.	Imágenes de absorción de los tiempo de vuelo de una mezcla Bose-Fermi. a) Sistema bosónico puro para tres potenciales de confinamiento diferentes. b) Mezcla Bose-Fermi para los mismos potenciales del sistema a). Figura tomada de [33]. . . . .	29
15.	Densidad bosónica $\rho_B$ como función del potencial químico $\mu_B$ manteniendo constante la densidad de fermiones $\rho_F = 1/4$ , la interacción entre bosones $U_{BB} = 10$ y el acoplamiento bosón-fermión $U_{BF} = 16$ . Las posiciones de los lóbulos aislantes coinciden para diferentes tamaños de red $L$ y temperaturas $\beta = 1/T$ . Figura tomada de [39]. . . . .	30
16.	Comparación entre los diagramas de fases de Rigol [39] (símbolos con líneas punteadas) y los resultados obtenidos por Lewenstein [29] (Líneas continuas y símbolos romanos). . . . .	31
17.	Configuración del superbloque. Los rectángulos negros representan al bloque sistema expandido por lo vectores $ i\rangle$ y al bloque entorno expandido por los vectores $ j\rangle$ . Cada uno de los sitios del superbloque se representan por medio de puntos rojos. . . . .	34
18.	Ilustración esquemática del crecimiento del superbloque mediante el algoritmo del sistema infinito. . . . .	36
19.	Representación esquemática del algoritmo de sistema finito. En este esquema se inicia el barrido de izquierda a derecha y luego de la mitad del algoritmo se barre de derecha a izquierda. 38	38
20.	Medidas de las distribuciones de ocupación como función del número de átomos fermiónicos $N_F$ : <b>a</b> Medición de la doble ocupación para interacción repulsiva. Panel superior, doble ocupación bosónica $D_B$ (círculos rojos). Panel del medio, doble ocupación fermiónica $D_F$ (círculos rojos). Panel inferior ocupación de parejas Bose-Fermi $D_{BF}$ para $N_B = 6 \times 10^3$ (círculos rojos), $N_B = 8.5 \times 10^3$ (círculos naranjas), $N_B = 13 \times 10^3$ (círculos verdes), $N_B = 15 \times 10^3$ (círculos azules) y $N_B = 20 \times 10^3$ (círculos morados). <b>b</b> Medición de la doble ocupación para el caso de interacción atractiva. Panel superior doble ocupación bosónica (círculos azules). Panel medio doble ocupación fermiónica (círculos rojos) panel inferior Ocupación de parejas Bose-Fermi (círculos rojos). Las líneas sólidas corresponden a simulaciones numéricas y las regiones sombreadas corresponden a resultados numéricos con diferentes temperaturas iniciales $\pm 5nK$ . Figura tomada de [21]. . . . .	44
21.	Representación esquemática del modelo Bose-Fermi Hubbard en el límite hard-core. Los círculos azules representan a los bosones sin espín y los círculos rojos representan a los fermiones con espín 1/2. . . . .	45
22.	Ilustración esquemática de los estados base de una mezcla de fermiones con dos grados de libertad (verde) interactuando con bosones en el límite “hard-core” (azul) y confinados en una dimensión. En la ilustración se considera una red con ocho sitios ( $L=8$ ) y dos diferentes estados base. (a) Estado aislante con una densidad fermiónica $\rho_F = 1$ y densidad bosónica $\rho_B = 1/2$ . (b) Estado aislante de Mott mezclado con $\rho_F = 1/2$ y $\rho_B = 1/2$ . . . . .	46

23. (a) Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu^B$ . La densidad fermiónica es  $\rho_F = 1$  (medio llenado) e interacción fermión-fermión  $U_{FF} = 3.5$ . Dos diferentes valores de interacción bosón-fermión, a saber:  $U_{BF} = 1$  (puntos negros) y  $U_{BF} = 6$  (cuadros rojos), para los cuales hay ausencia o presencia de fases incompresibles respectivamente. **Recuadro:** Potencial químico como función del tamaño del sistema para una densidad bosónica  $\rho_B = 1/2$ . La gráfica superior (conjunto de datos en azul) corresponde a la energía de excitación de una partícula y la inferior (conjunto de datos en verde) corresponde a la energía de excitación del hueco. La extrapolación en el límite termodinámico se realiza por medio de un polinomio de segundo orden e indica que el gap de carga es finito, y se representa en la gráfica por medio de diamantes de color púrpura. (b) Diagrama de fases en el plano  $\mu^B - U_{BF}$ , para  $U_{FF} = 3.5$  y densidad fermiónica  $\rho_F = 1$ . El diagrama de fases muestra la fase superfluida (blanco) y la fase aislante para  $\rho_B = 1/2$  (amarillo) que aparece a partir de un valor crítico  $U_{BF}^*$ . La línea vertical discontinua corresponde a la curva de la figura (a) (cuadros rojos). Las líneas son únicamente una ayuda visual. . . . . 48
24. Puntos críticos  $U_{BF}^*$  como función de  $U_{FF}$ . La fase incompresible cumple con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ . **Recuadro:** Perfil de densidad a lo largo de la red para las partículas bosónicas (círculos rojos) y fermiónicas (triángulos azules) para  $U_{BF} = 5$  (panel superior) y  $U_{BF} = 9$  (panel inferior). En ambos casos la interacción entre fermiones es  $U_{FF} = 3.5$  y  $t_B = t_F = 1$ . Las líneas son ayudas visuales. . . . . 50
25. En la gráfica se observa que las cargas bosónicas (azul) se alternan con las cargas fermiónicas (rojo), es decir, donde hay fermiones no hay bosones y viceversa. Este comportamiento da origen a una fase CDW bosónica que coexiste con una fase CDW fermiónica. . . . . 51
26. (a) Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu^B$ . La densidad fermiónica se fija en  $\rho_F = 1/2$  y la interacción repulsiva entre fermiones es  $U_{FF} = 5$ . Se consideran dos diferentes valores de interacción bosón-fermión, a saber:  $U_{BF} = 1$  (puntos negros) y  $U_{BF} = 8$  (cuadros rojos) para los cuales hay ausencia o presencia de fases incompresibles respectivamente. **Recuadro:** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades bosónicas  $\rho_B = 1/2$  (naranja) y  $\rho_B = 3/4$  (azul). Los valores para  $1/L \rightarrow 0$  (diamantes) corresponden a la extrapolación en el límite termodinámico por medio de un polinomio de segundo orden. (b) Diagrama de fases del estado base en el plano  $\mu^B - U_{BF}$  para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de  $U_{FF} = 2$  y densidad fermiónica de  $\rho_F = 1/2$ . Las áreas con color corresponden a regiones incompresibles. La región en amarillo corresponde a la densidad bosónica  $\rho_B = 3/4$  y la región azul es para  $\rho_B = 1/2$ . **Recuadro:** Valor esperado del número de partículas bosónicas (círculos rojos) y fermiónicas (triángulos azules) a lo largo de la red. Se observa que el estado fundamental dentro del lóbulo amarillo  $\rho_B = 3/4$  es una fase CDW. Los cálculos no mostrados presentan el mismo patrón de perfil de densidad, luego a diferencia de la figura 24, no hay diferentes tipos de fases aislantes, sino que siempre se ve una CDW. Los perfiles de densidad para  $\rho_B = 1/2$  se presentan en la figura 27. Las líneas son ayudas visuales. . . . . 52

27.	Puntos críticos como función de la interacción entre fermiones $U_{FF}$ para una densidad $\rho_B = 1/2$ . Los cuadrados separan la región superfluida de la región aislante. <b>Recuadro:</b> Dentro del lóbulo aislante (región azul) se presenta una transición de fase que depende del parámetro de interacción bosón-fermión y que va desde un estado base que se encuentra en una fase dimerizada entrecruzada para el caso $U_{BF} = 13$ (panel superior) a un estado de separación de fases para $U_{BF} = 16$ (panel inferior) considerando fija la interacción entre fermiones $U_{FF} = 2$ . Las líneas son ayudas visuales. . . . .	54
28.	Factor de estructura para bosones (cuadrados rojos) en el límite “soft-core” interactuando con fermiones con dos grados de libertad (puntos negros). El cálculo se realiza para una red con $L = 48$ sitios. . . . .	55
29.	Diagrama de fases del potencial químico como función del parámetro de interacción bosón-fermión para un imbalance en las masas de $t_B = 5t_F$ . <b>(a)</b> Densidad fermiónica $\rho_F = 1$ y parámetro de interacción entre fermiones $U_{FF} = 3.5$ . <b>(b)</b> Densidad fermiónica $\rho_F = 1/2$ y parámetro de interacción entre fermiones $U_{FF} = 2$ . La fase superfluida es la región en blanco y la fase aislante para $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ es la región con color. Las líneas son ayudas visuales. . .	56
30.	Representación esquemática del modelo Bose-Fermi Hubbard en el límite soft-core. Los círculos azules representan a los bosones sin espín y los círculos rojos representan a los fermiones con espín $1/2$ . . . . .	58
31.	Posibles distribuciones de las partículas para el estado base de una mezcla de bosones escalares (azul) y fermiones con dos grados de libertad internos (verde). <b>a.</b> Coexistencia del estado base de Mott para fermiones ( $\rho_F = 1$ ) y bosones ( $\rho_B = 2$ ), aquí $U_{BF} \geq 0$ . <b>b.</b> Estado aislante de Mott mezclado con $\rho_F = 1/2$ e interacción de acoplamiento $U_{BF}$ de tipo repulsivo. <b>c.</b> Estado aislante no conmesurado con densidad fermiónica $\rho_F = 1$ y densidad bosónica $\rho_B = 1/2$ para $U_{BF} \leq 0$ . <b>d.</b> CDW con un bosón y un fermión cada dos sitios. <b>e.</b> Estado aislante con doble periodicidad bosónica y fermiónica para interacciones repulsivas, considerando $\rho_F = 1$ y $\rho_B = 1$ . Cada sitio se representa por medio de los cuadros negros de la parte inferior. . . .	60
32.	<b>(a)</b> Densidad bosónica como función del potencial químico. <b>Recuadro</b> Gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades de $\rho_B$ no triviales. La extrapolación en el límite termodinámico se realiza por medio de un polinomio de segundo orden e indica que el gap de carga es finito y se representa en la gráfica por medio de diamantes de color purpura. <b>(b)</b> Diagrama de fases del estado base en el plano $\mu_B - U_{BF}$ para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de $U_{FF} = 6$ y densidad fermiónica de $\rho_F = 1/2$ . . . . .	61
33.	<b>(a)</b> Densidad fermiónica $\rho_F$ como función del potencial químico $\mu^F$ para un llenado $\rho_B = 1/4$ . <b>Recuadro</b> Ancho del gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades de $\rho_F$ no triviales. <b>(b)</b> Diagrama de fases del estado base en el plano $\mu_F - U_{BF}$ para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de $U_{FF} = 6$ , $U_{BB} = 16$ y densidad bosónica de $\rho_B = 1/4$ . . . . .	63



34. (a) Densidad bosónica como función del potencial químico para un llenado  $\rho_F = 1/2$ . **Recuadro** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las diferentes densidades  $\rho_B$ . (b) Diagrama de fases del estado base en el plano  $\mu_B - U_{BF}$  para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de  $U_{FF} = 6$ , interacción bosón-bosón  $U_{BB} = 16$  y densidad fermiónica de  $\rho_F = 1/2$ . . . . . 64

35. Densidad fermiónica  $\rho_F$  como función del potencial químico  $\mu_F$  para un llenado  $\rho_B = 1/4$ . **Recuadro.** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las diferentes densidades  $\rho_F$ . . . . . 65

36. Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu_B$  para acoplamientos bosón-fermión atractivo  $U_{BF} = -10$ , repulsivo  $U_{BF} = 10$  y sin acoplamiento  $U_{BF} = 0$ . . . . . 66

37. Distribución de fermiones (círculos azules) y bosones (cuadrados rojos) en la red, considerando acoplamiento bosón-fermión repulsivo (a) y atractivo (b). Los parámetros usados son:  $\rho_F = \rho_B = 1$ ,  $U_{BB} = 16$ ,  $U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = \pm 10$ . En ambos paneles se observa que el estado base corresponde a la coexistencia de las fases aislantes de Mott bosónicas y fermiónicas. En ambas figuras las líneas son ayudas visuales. . . . . 67

38. Distribución de fermiones (círculos azules) y bosones (cuadrados rojos) en la red, considerando acoplamiento bosón-fermión repulsivo (a) y atractivo (b). Los parámetros usados son:  $\rho_F = \rho_B = 1$ ,  $U_{BB} = 16$ ,  $U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = \pm 20$ . En ambos paneles se observa que el estado base corresponde a una separación de fase. En ambas figuras las líneas son ayudas visuales. . . . . 68

39. Imágenes experimentales de isótopos fermiónicos de  ${}^6\text{Li}$  confinados en una red cuadrada. Cada una de las imágenes muestra cambios drásticos en la distribución de ocupación al incrementar la interacción entre fermiones  $U_{FF}$  (en la gráfica  $U$ ) en la razón  $U/8\bar{t}$ , manteniendo constante el número de átomos. En la expresión anterior  $\bar{t}$  representa la energía de salto promedio de los fermiones  $t_f$ . La primera fila son las imágenes experimentales, mientras que la tercera fila son los perfiles de densidad para los parámetros experimentales. Para  $U/8\bar{t} = 1.1$  se observa un comportamiento metálico donde hay una gran variación de la ocupación en cada uno de los sitios. En  $U/8\bar{t} = 2.5$ , se observa la coexistencia entre las fases metálicas y aislantes de banda en los extremos y en el centro del potencial. Cuando  $U/8\bar{t} = 3.8$ , se observa la estructura “wedding cake” en la cual coexisten las fases metálica, aislante de Mott y en los extremos del potencial con un número de ocupación igual cero la fase aislante de banda. Para interacciones fuertes  $U/8\bar{t} = 15.37$  se observa una fase aislante de Mott. Figura tomada de [166]. . . . . 72

40. Surgimiento de la separación de fases en mezclas con confinamiento armónico. (a). Representación esquemática de los perfiles de densidad bosónico (magenta) y fermiónico (azul) para diferentes valores de acoplamiento bosón-fermión. En I se observa que para un parámetro de interacción pequeño hay una completa superposición de los perfiles de densidad de las dos especies. Al aumentar el parámetro de interacción (II), la densidad de los fermiones en el centro de la trampa disminuye y con esto la superposición entre las especies. Para una interacción fuerte (III), los bosones permanecen en el centro del potencial, mientras que los fermiones se ubican en la periferia del potencial de confinamiento. (b). Resultados experimentales de la densidad de columna normalizada. Figura tomada de [174]. . . . . 73

41. Modelo del Hamiltoniano Bose-Fermi-Hubbard para el caso confinado, considerando dos grados de libertad internos fermiónicos (círculos rojos) y bosones (círculos magenta) en el límite “soft-core”. Los parámetros de interacción bosón-bosón, fermión-fermión y bosón-fermión se representan en la figura por medio de  $U_{BB}, U_{FF}$  y  $U_{BF}$  respectivamente.  $W$  representa la profundidad del pozo de confinamiento. . . . . 74

42. Distribución de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para diferentes potenciales de confinamiento. (a)  $W = 0.01$  y (b)  $W = 0.03$ . En este modelo se consideran interacciones repulsivas  $U_{BB} = 8, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ , con densidades globales  $\rho_F = \rho_B = 1/2$ . El número local de bosones (fermiones)  $\langle n_i^{B,(F)} \rangle$  se representa por medio de cuadrados rojos (punto negros). La compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B,(F)}$  se representa por medio de triángulos azules (diamantes verdes). . . . . 75

43. Distribución de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para un potencial de confinamiento  $W = 0.03$ , manteniendo constante las interacciones en  $U_{BB} = 8, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ . (a)  $\rho_F = 1/2$  y  $\rho_B = 1$ . (b)  $\rho_F = 1$  y  $\rho_B = 1/2$ . El número local de bosones (fermiones)  $\langle n_i^{B,(F)} \rangle$  se representa por medio de cuadrados rojos (punto negros). La compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B,(F)}$  se representa por medio de triángulos azules (diamantes verdes). . . . . 77

44. Distribución de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para diferentes parámetros de acoplamiento repulsivo fijando las densidades en  $\rho_B = \rho_F = 1/2$  y la profundidad del pozo en  $W = 0.03$ . (a).  $U_{BB} = 8, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 7.9$ . (b).  $U_{BB} = 8, U_{BF} = 4$  y  $U_{FF} = 4$ . (c).  $U_{BB} = 6, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ . El número local de bosones (fermiones)  $\langle n_i^{B,(F)} \rangle$  se representa por medio de cuadrados rojos (punto negros). La compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B,(F)}$  se representa por medio de triángulos azules (diamantes verdes). . . . . 78

Índice de cuadros

1.	Algunas diferencias entre bosones y fermiones. . . . .	6
2.	Experimentos con mezclas de átomos bosónicos y fermiónicos . . . . .	19
3.	Comparación entre los resultados de Rigol y Lewenstein. En la figura 16 se observa que las tres primeras fases del cuadro ocurren aproximadamente para los mismos parámetros, además tienen cualidades similares. La última fase del cuadro (V), sugiere la formación de partículas compuestas. . . . .	32
4.	Algoritmo de sistema infinito para un sistema cuántico unidimensional [71, 146]. . . . .	37
5.	Algoritmo de sistema finito para un sistema cuántico unidimensional de $L$ sitios [71, 146]. Cada cálculo se encuentra constituido por varias iteraciones y cada iteración consta de $L - 3$ pasos. . . . .	39
6.	Espacio de Hilbert local para un sistema conformado por fermiones con dos grados de libertad internos y bosones sin espín en el límite hard-core $\dim(\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_F) = 8$ . . . . .	46
7.	Energía de excitación de partícula bosónica $\mu^B$ , en una mezcla de bosones escalares y fermiones con espín $s = 1/2$ . . . . .	47
8.	Espacio de Hilbert local para un sistema conformado por fermiones con dos grados de libertad internos y bosones sin espín en el límite soft-core $\mathcal{H}_B \times \mathcal{H}_F = 16$ . . . . .	59

# 1

## INTRODUCCIÓN

Uno de los estados de la materia que resulta ser de gran importancia en la física de la materia condensada, física atómica, astrofísica, física nuclear y la física de partículas elementales [1], es el estado conocido como condensación de Bose-Einstein (CBE). La CBE es un fenómeno cuántico con manifestaciones a escalas macroscópicas que depende principalmente de la estadística de las partículas, y tuvo su origen en el año de 1924 cuando Satyendra Nath Bose buscó un nuevo método para derivar la ley de Planck, que describe la radiación electromagnética emitida por un cuerpo negro que se encuentra en equilibrio térmico. Un año más tarde, Einstein encontró que el método de Bose no solamente describe la radiación del cuerpo negro, sino que también se puede usar para tratar un gas compuesto por partículas bosónicas idénticas no interactuantes y en equilibrio térmico.

La predicción teórica del CBE generó gran interés académico y debió esperar cerca de 70 años para su realización en el laboratorio. En 1995 usando isótopos de  $^{87}\text{Rb}$ , el grupo de Eric A. Cornell y Carl E. Wieman de la Universidad de Colorado (EE. UU.) logró el CBE [2], y de forma independiente Wolfgang Ketterle del Massachusetts Institute of Technology (MIT) condensó vapores alcalinos de  $^{23}\text{Na}$  [1]. La realización experimental del CBE fue un gran logro para la física, por lo que los tres investigadores obtuvieron el premio Nobel de física en 2001. Luego de la primera realización experimental del CBE, se han condensado diferentes isótopos, moléculas e incluso fotones [3], además ha sido posible observar los CBE a temperatura ambiente [4].

Los CBE se han utilizado para estudiar diferentes transiciones de fase cuánticas [5] y otros fenómenos cuánticos básicos [6, 7]. Estos fenómenos se pueden investigar al confinar los átomos ultrafríos en redes ópticas, donde es posible controlar la geometría del potencial de confinamiento, la temperatura y las interacciones entre las partículas que constituyen el sistema. Este alto grado de control permite diseñar y probar con precisión una gran variedad de sistemas cuánticos de muchos cuerpos [8]. Uno de los fenómenos más importantes que se han investigado en estos sistemas es la transición de fase que va desde el estado superfluido a la fase aislante de Mott, predicha en 1998 por D. Jaksch *et al.* [6] y observada experimentalmente por M. Greiner *et al.* [38] en un sistema conformado por átomos de  $^{87}\text{Rb}$ .

La versatilidad de los CBE permite ir mas allá de los estudios en física fundamental, pues se han propuesto para realizar aplicaciones en: Procesamiento de información cuántica [9], interferometría de precisión [10], estudio de gases cuánticos en efectos de microgravedad [11] y medición de precisión mediante el desarrollo de detectores más sensibles [12]. En este último los CBE se han aplicado en la producción de relojes atómicos, ya que permiten superar el límite de Ramsey mediante la técnica conocida como interferometría atómica no lineal.

De forma simultánea al desarrollo teórico y experimental de los CBE, se ha llevado acabo el estudio de los gases cuánticos a bajas temperaturas conformados por partículas fermiónicas. Estos sistemas son particularmente adecuados para la simulación de sistemas del estado sólido,

porque obedecen la estadística de Fermi-Dirac, lo que les permite imitar directamente el comportamiento de los electrones en un sólido. La primera realización experimental de un gas degenerado conformado por fermiones se realizó en 1997 usando átomos alcalinos de  $^{40}\text{K}$  [13]. Luego de esta realización se han logrado gases degenerados con  $^6\text{Li}$  [14]  $^3\text{He}$  [15],  $^{173}\text{Yb}$  [16],  $^{87}\text{Sr}$  [17],  $^{161}\text{Dy}$  [18],  $^{167}\text{Er}$  [19],  $^{53}\text{Cr}$  [20]

Gracias a estos avances ha sido posible obtener mezclas de gases cuánticos degenerados compuestos por isótopos bosónicos y fermiónicos del mismo átomo y de átomos diferentes [21, 22, 23, 24, 25, 26]. Inicialmente estas mezclas se propusieron para enfriar fermiones por medio de la técnica conocida como enfriamiento simpático [27] y han encontrado aplicaciones en el estudio de la física de muchos cuerpos, sistemas fuertemente correlacionados [28], en el estudio de la transición BCS en los gases atómicos de Fermi [29] e investigación de sistemas físicos sin análogo en la física del estado sólido [30].

La primera propuesta para la realización experimental de las mezclas entre bosones y fermiones se remonta a los años 70, donde se investigó un sistema conformado por isótopos bosónicos de  $^4\text{He}$ , interactuando con isótopos fermiónicos de  $^3\text{He}$  [31]. Dicho sistema aún no se ha realizado experimentalmente, debido a que la miscibilidad del  $^3\text{He}$  en  $^4\text{He}$  es muy pequeña y la temperatura necesaria para que los fermiones alcancen la superfluidez es muy baja para conseguirla con las técnicas existentes [32]. Sin embargo, gracias a los avances en las técnicas para enfriar y confinar átomos ultrafríos, se han logrado estudiar experimentalmente gases cuánticos degenerados conformados por átomos metaestables de  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  [15].

Algunas de las mezclas Bose-Fermi que se han logrado experimentalmente son:  $^{173}\text{Yb}$ - $^{170}\text{Yb}$  y  $^{173}\text{Yb}$ - $^{174}\text{Yb}$  [21]  $^{173}\text{Yb}$ - $^7\text{Li}$  [23],  $^{40}\text{K}$ - $^{23}\text{Na}$  [24],  $^{174}\text{Yb}$ - $^6\text{Li}$  [32],  $^{87}\text{Rb}$ - $^{40}\text{K}$  [33],  $^7\text{Li}$ - $^6\text{Li}$  [34],  $^7\text{Li}$ - $^{173}\text{Yb}$  [35]. Estos sistemas exhiben una gran variedad de fenómenos físicos interesantes que se deben principalmente al tipo de llenado con el cual se configura el sistema, a las interacciones que se presentan entre partículas de la misma especie y al parámetro de acoplamiento entre partículas con diferente estadística. Algunos de los fenómenos que presentan estos sistemas son: transiciones de fase desde el estado superfluido bosónico a la fase aislante de Mott [33, 36, 37, 38], diferentes estados superfluidos, onda de densidad de carga (CDW), onda de densidad de espín (SDW), separación de fase, cristales de Wigner y diferentes transiciones de fases cuánticas [39, 40, 41, 42, 43, 44].

Desde el punto de vista teórico, la fenomenología presentada por las mezclas Bose-Fermi se ha estudiado por medio del modelo Bose-Fermi Hubbard [28, 39, 29, 45] a través de diferentes técnicas como: teoría de campo medio [28], el formalismo del líquido de Luttinger [46], aproximación de la matriz T [47], el ansatz de Bethe [48, 49], métodos numéricos como la simulación cuántica de Monte Carlo [50, 51, 52, 53, 54], expansiones de acoplamiento fuerte [29] y bosonización [39, 55]. Estas aproximaciones han considerado:

1. Modelos en los cuales tanto los bosones como los fermiones no tienen espín. Este modelo es uno de los modelos más sencillos en el estudio de las mezclas Bose-Fermi y ha sido objeto de amplios estudios [33, 37, 52, 53, 54, 56, 57, 58, 59]. Este límite presenta un diagrama de fases enormemente rico, con tipos novedosos de fases cuánticas como: fases superfluidas [60], localización de bosones, líquido de Fermi, fases cuánticas que involucran fermiones compuestos [29, 61], estados superconductores de tipo s, p y d

- [62, 63, 64, 65] CDW, SDW [66, 67], separación de fases y fase de líquido de Luttinger [41, 68]. Además presenta la transición de fase desde el estado aislante de Mott al estado superfluido [39].
2. Modelos donde se consideran únicamente los grados de libertad de uno de los portadores. Este es un modelo ligeramente más complejo que el anterior y dentro de las realizaciones experimentales se han mezclado isótopos fermiónicos de  $^{173}\text{Yb}$  cuyo espín  $s = 5/2$  los cuales interactúan con isótopos bosónicos de  $^{170}\text{Yb}$  e  $^{174}\text{Yb}$  con espín  $s = 0$  [21] en un entorno determinado por un potencial de confinamiento de tipo armónico e interacciones entre partículas de diferente especie tanto atractivas como repulsivas. En esa investigación se encontró que las fases aislantes se ven modificadas por el tipo de interacción (atractiva o repulsiva) entre partículas de diferente especie y el número de átomos. Teóricamente este tipo de sistemas se ha estudiado por medio de aproximaciones como la teoría de campo medio, bosonización y Monte Carlo cuántico reportando fases como: (SDW), (CDW), cristal de Wigner <sup>1</sup>, polarón con apareamiento simple y triple [28], transiciones de fase desde la fase aislante de Mott a la fase superfluida bosónica [62] y fases superfluidas fermiónicas [69].
  3. Modelos en los que se considera que tanto los bosones como los fermiones tienen espín [25, 27].

Los modelos anteriormente descritos han permitido comprender parte de la interesante y muy variada fenomenología presentada por las mezclas Bose-Fermi, pero aún queda un amplio camino por recorrer para comprender más a fondo la fenomenología presentada por estos sistemas. Por ello es fundamental explorar más a fondo estos sistemas, pues surgen algunos interrogantes, por ejemplo:

1. ¿Cómo sería el diagrama de fases para el estado base de una mezcla Bose-Fermi confinada en una red óptica unidimensional en el límite “hard-core” más allá de la teoría de campo medio?
2. ¿Cómo sería el diagrama de fases para el estado base de una mezcla Bose-Fermi confinada en una red óptica unidimensional en el límite “soft-core” más allá de la teoría de campo medio?
3. ¿Qué tipo de fases cuánticas se pueden encontrar?
4. ¿Cuáles fases cuánticas se pueden encontrar si el sistema se confina en un potencial de tipo armónico?

Para responder estas preguntas se usó la técnica del grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG) [70, 71], considerando condiciones de frontera abiertas y truncando el espacio de Hilbert por medio del protocolo de selección dinámica de los estados del bloque

---

<sup>1</sup>Esta fase se genera cuando a bajas densidades la energía potencial domina a la energía cinética y los electrones forman redes de cristales cúbicos centrados en el cuerpo para el caso de sistemas 3D y redes triangulares en el caso 2D. Estos arreglos se producen para minimizar la energía potencial.

(DBSS)[72]. Inicialmente se estudia un sistema simple y poco explorado, que permita conocer el comportamiento de estas mezclas con pocos grados de libertad en cada uno de los sitios. Para ello se considera máximo un bosón escalar por sitio (límite “hard-core”) que interactúa con fermiones con dos grados de libertad internos. Para este sistema se encontró que cuando la razón entre el número total de fermiones y el número total de sitios de la red es 1 (medio llenado fermiónico  $\rho_F = 1$ ), surge un único estado aislante cuando la razón entre el número total de bosones y el número total de sitios es  $1/2$  ( $\rho_B = 1/2$ ). Esta nueva fase aislante, es no conmesurada, debido a que la suma entre la densidad bosónica y la densidad fermiónica da como resultado una densidad total fraccionaria, por lo que se cumple la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ .

Levantando la restricción de un bosón por sitio y considerando que en cada uno de los sitios de la red pueden existir máximo tres bosones escalares (límite “soft-core”), se encontró que al fijar la densidad de fermiones y variar el número de bosones, surgen fases aislantes que se denominan en este trabajo como fases aislantes triviales. Estas fases emergen cuando el parámetro de interacción bosón-fermión es pequeño y para densidades bosónicas enteras, reproduciendo cualitativamente los resultados del Hamiltoniano Bose-Hubbard. Al aumentar la interacción bosón-fermión, se encontró que adicional a las fases aislantes de Mott mezcladas que satisfacen la relación de conmesurabilidad  $\rho_B + \rho_F = n$ , surgen fases aislantes que cumplen relaciones de inconmesurabilidad  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = n$  (con  $n = 1, 2$ ).

Al considerar que el potencial entre las especies es de carácter atractivo, se encontró el surgimiento de fases aislantes no conmesuradas que cumplen con las relaciones  $\rho_B - \rho_F = n$  y  $\rho_B - \frac{1}{2}\rho_F = n$  (con  $n = 0, \pm 1$ ).

Debido a la posibilidad experimental de generar confinamientos de tipo armónico con entre 60 y 100 sitios, se extendió aún más la investigación, explorando el comportamiento de estas mezclas cuando se confinan en un potencial de tipo armónico y se encontró un estado fundamental caracterizado por la coexistencia de regiones aislantes y regiones superfluidas. En particular se encontró la coexistencia de un aislante de Mott bosónico y fermiónico en el centro del potencial de confinamiento. También se encontraron regiones con diferentes configuraciones de separación de fase.

La relevancia en identificar y caracterizar las diferentes fases aislantes que se presentan en las mezclas Bose-Fermi, se debe principalmente a las aplicaciones de las fases aislantes de Mott en interruptores ópticos y térmicos [73], dispositivos termocrómicos [74], sensores de gas [75] e incluso aplicaciones en celdas solares [76]. También es posible usar esta fase en el procesamiento y almacenamiento de la información, usando los estados de espín como qubits con largos periodos de decoherencia. Para hacer el registro cuántico con los qubits, usualmente se implementan dos estados base de los átomos atrapados en la red, donde el estado aislante de Mott con una partícula por sitio corresponde al registro inicial [77, 78, 79].

La presente investigación se encuentra organizada de la siguiente manera: en el capítulo 2 se describe la física fundamental de los gases atómicos degenerados. En el capítulo 3 se describen las mezclas confinadas en redes ópticas por medio del Hamiltoniano de Bose-Fermi-Hubbard. En el capítulo 4 se introduce la técnica del grupo de renormalización de la matriz densidad. En el capítulo 5 se explora el estado base para un sistema conformado por bosones sin espín interactuando con fermiones con dos grados de libertad internos en el límite “hard-core”. En el

## 1. INTRODUCCIÓN

---

capítulo 6 se investiga lo que sucede con el mismo sistema pero considerando que los bosones se encuentran en límite “soft-core” y por último en el capítulo 7 se estudia el sistema confinado en un potencial armónico.



# 2

## GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

### 2.1. Gases cuánticos de bosones

Una de las áreas de investigación dentro de la física atómica que concentra gran interés tanto teórico como experimental por sus aplicaciones en sistemas de la materia condensada, es la de los gases cuánticos degenerados<sup>2</sup>, que se encuentran compuestos por partículas bosónicas, fermiónicas o una mezcla de ambas.

Partícula	Espín	Función de onda	Calor específico $C_v$ para $T \rightarrow 0$
Boson	Entero	Simétrica	$C_v \sim T^{3/2}$
Fermion	Semientero	Antisimétrica	$C_v \sim T$

Cuadro 1: Algunas diferencias entre bosones y fermiones.

Los gases cuánticos a bajas temperaturas conformados por partículas con espín entero, cuya función de onda es simétrica ante el intercambio espacial de un par de partículas (bosones), presentan una transición de fase termodinámica conocida como condensación de Bose-Einstein (CBE). La CBE es un fenómeno cuántico con manifestaciones a escalas macroscópicas que depende principalmente de la estadística de las partículas y no de las interacciones entre las mismas. Este fenómeno tuvo su origen en el año de 1924 cuando Satyendra Nath Bose buscó un nuevo método para derivar la fórmula de Planck que describe la radiación de cuerpo negro. La idea de Bose consistió en considerar las ondas electromagnéticas del cuerpo negro como un gas de partículas idénticas, con lo cual se develó el misterio del cuanto de luz introducido por Planck en 1900 y utilizado por Einstein en la explicación del efecto foto-eléctrico en 1905. En 1925, Einstein encontró que el método de Bose no solamente describe la radiación del cuerpo negro, sino que también se puede usar para tratar un gas compuesto por partículas bosónicas idénticas no interactuantes y en equilibrio térmico.

La condensación de Bose-Einstein ocurre cuando los observables termodinámicos cambian de forma abrupta<sup>3</sup>, al alcanzar una temperatura conocida como temperatura crítica  $T_c$  que se define como

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left( \frac{n}{2.612} \right)^{2/3}, \quad (1)$$

<sup>2</sup>Otras aplicaciones de los gases cuánticos se encuentran en: información cuántica [9, 80], interferometría [10], detectores ultrasensibles [12]

<sup>3</sup>Uno de los observables termodinámicos que cambia es la fugacidad  $z$  ( $z = e^{\mu/k_B T}$ ). En la transición termodinámica de un gas ideal, el valor de la fugacidad  $z$  se incrementa gradualmente hasta 1 y cuando se alcanza este valor, el potencial químico  $\mu$  se hace cero. Cuando esto sucede, el número de partículas en el estado de menor energía aumenta de forma considerable, es decir, del número total de partículas  $N$  del sistema, una cantidad macroscópica  $N_0$  ( $N_0$  es proporcional al volumen del sistema) ocupa un estado cuántico donde la energía de una partícula  $\epsilon_k$  es cero.

## 2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

---

donde  $m$  es la masa atómica de las partículas,  $n = N/v$  es el número de partículas por unidad de volumen  $v$  (densidad de partículas),  $k_B$  representa la constante de Boltzman y  $\hbar$  simboliza la constante de Planck reducida. Cuando  $T < T_c$ , el sistema se encuentra en una fase donde coexisten en equilibrio una densidad de partículas que se encuentran en el estado de gas normal  $n_n$  y una densidad de partículas en el estado condensado  $n_0$ , de manera que

$$n = n_0 + n_n, \quad (2)$$

donde la densidad de partículas en estado normal se define como

$$n_n = 2.612 \left( \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (3)$$

La separación de los dos tipos de partículas no es espacial sino que se da en el espacio de momentos, donde las partículas en el estado condensado ocupan un estado cuántico de momento cero, mientras que las partículas en el estado normal tienen un momento finito. La fracción de partículas en el estado condensado se expresa como

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (4)$$

De la expresión anterior se puede concluir que cuando  $T \rightarrow 0$ ,  $n_0 \rightarrow n$ , y la ocupación del estado fundamental se vuelve una cantidad macroscópica; a medida que la temperatura se aproxima a la temperatura crítica  $0 < T < T_c$ , el cociente  $\frac{T}{T_c}$  aumenta, por lo cual la densidad de partículas en el estado condensado  $n_0$  decrece gradualmente y para temperaturas superiores a la temperatura crítica  $T > T_c$ , se hace infinitesimalmente pequeña comparada con la densidad total. Este fenómeno que se presenta para las partículas bosónicas, se conoce como condensación de Bose-Einstein (CBE)<sup>4</sup> y se basa en la naturaleza ondulatoria de las partículas, que se presenta a bajas temperaturas. Dicha naturaleza permite describir el sistema en términos de paquetes de onda, asociados a cada una de las partículas y cuya extensión es del orden de una longitud de onda térmica de De Broglie (la incertidumbre de posición asociada con la distribución térmica del momento). Esta se define como

$$\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad (5)$$

e indica el promedio de las longitudes de onda de las partículas que constituyen el gas, cuando se encuentra a una temperatura  $T$ . Esta relación indica que a medida que la temperatura disminuye, el tamaño del paquete de onda aumenta. Cuando la longitud de onda térmica de De Broglie es comparable a la separación inter-atómica, los paquetes de onda se entrecruzan con la onda asociada a la partícula contigua, la velocidad de cada partícula tiende a cero y los paquetes de los distintos átomos se mezclan, siguiendo el sistema una función de onda global. En este punto y aún antes de llegar a la transición de fase, el sistema se encuentra en un estado de coherencia cuántica macroscópica.

---

<sup>4</sup>Las ecuaciones del CBE se derivan en el ensamble gran canónico.

## 2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

Una representación gráfica del CBE se puede observar en la figura (1), donde se ilustra la formación del estado condensado, al aumentar la longitud de onda térmica de De Broglie como respuesta a la disminución de la temperatura.

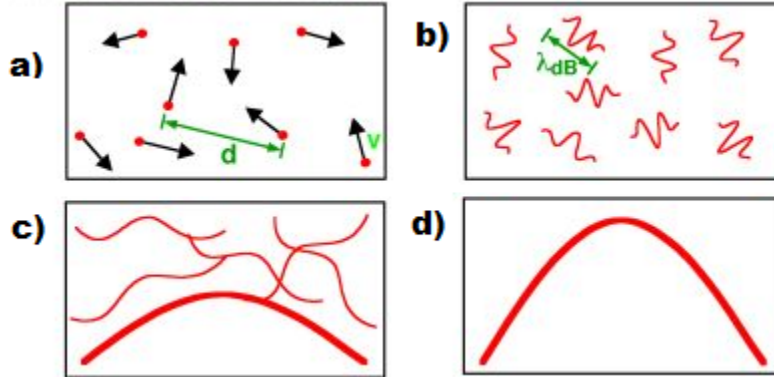


Figura 1: Formación de un CBE. a) A altas temperaturas la interacción entre las partículas del gas es débil y la longitud de onda de De Broglie es más pequeña que la distancia  $d$  de separación entre partículas, como se observa en la figura. b) Cuando la temperatura desciende, la longitud de onda de De Broglie aumenta su tamaño de forma  $\lambda_{dB} \propto T^{-1/2}$ . c) Cuando  $T = T_c$  la distancia de separación entre las partículas  $d$  es comparable a la longitud de onda térmica de De Broglie,  $\lambda_{dB} = d$ . A esta temperatura se encuentran partículas en el estado normal (nube térmica) y partículas en el estado condensado. d) Cuando la temperatura es cercana a cero, la nube térmica desaparece dando lugar a un CBE puro (figura tomada de [81]).

Los estudios experimentales relacionados con gases cuánticos diluidos presentaron avances a partir de 1970, debido al perfeccionamiento en los mecanismos para enfriar y confinar en redes magneto-ópticas este tipo de sistemas. Uno de los primeros candidatos para la realización experimental del CBE fue el átomo de hidrógeno con espín polarizado, debido principalmente a que por su masa ligera, produciría una longitud de onda térmica de De Broglie grande, como se establece en la ecuación (5). A pesar de esto no fue posible condensar este tipo de átomos, debido a que la temperatura para la condensación es muy baja y no se podía alcanzar con las técnicas existentes. Además, para evitar que el gas se adhiriera a las paredes o se recombinara en helio, era necesario aumentar la presión y esto hacía que la densidad del gas aumentara. A pesar de los intentos fallidos, se desarrollaron nuevas técnicas de enfriamiento y montajes experimentales que ampliaron los conocimientos en gases cuánticos y abrieron nuevas sendas para que otros grupos, como el liderado por Thomas Greytak y Daniel Kleppner del Massachusetts Institute of Technology, reportaran la observación de un CBE producido con átomos de hidrógeno [82] 20 años después de ser propuesto teóricamente.

En la década de los ochenta se desarrollaron dos técnicas basadas en el láser para enfriar y atrapar átomos neutros: el enfriamiento láser y el confinamiento magneto-óptico. Gracias a estas técnicas fue posible realizar transiciones ópticas y manipular la estructura interna de los niveles de energía, logrando de esta manera alcanzar temperaturas del orden de los nano kelvin.

Gracias a estos desarrollos se implementaron más técnicas que hicieron posible la realización

experimental del CBE 70 años después de su predicción. En 1995 los avances tanto teóricos como experimentales en la manipulación, enfriamiento y confinamiento de gases cuánticos hicieron posible la realización experimental de sistemas de partículas interactuantes en entornos controlados usando vapores alcalinos. Las propiedades de estos vapores permitieron usar en ellos la técnica del enfriamiento láser y su posterior confinamiento en una trampa magnética donde fue posible disminuir aún más su temperatura por medio de la técnica de enfriamiento evaporativo. Otra de las características que permiten la creación del CBE en estos vapores son: Fácil excitación de las líneas de resonancia lo cual permite usar dispersión de luz para caracterizar la densidad y la energía de la nube atómica; interacciones débiles entre átomos que pueden ser manipuladas por escogencia de los estados de espín, la densidad atómica y la aplicación de campos externos [26].

Las características de los vapores alcalinos permitieron que dos grupos de forma independiente, observaran por primera vez el CBE: el grupo de Eric A. Cornell y Carl E. Wieman de la Universidad de Colorado (EE. UU.) logró el CBE usando isótopos de  $^{87}\text{Rb}$  [2] y Wolfgang Ketterle del Massachusetts Institute of Technology (MIT) utilizó vapores alcalinos de  $^{23}\text{Na}$  [1]. Luego de la realización experimental, ambos grupos obtuvieron el premio Nobel en física. Luego de la primera realización experimental del CBE, se han utilizado diferentes técnicas y átomos para alcanzar el estado condensado. Algunos de los isótopos usados son: vapores de  $^7\text{Li}$  [83], átomos con espín polarizado de Hidrógeno [82],  $^4\text{He}$  metaestable [84],  $^{41}\text{K}$  [85],  $^{85}\text{Rb}$  [86],  $^{133}\text{Cs}$  [87],  $^{170}\text{Yb}$  [88],  $^{174}\text{Yb}$  [89],  $^{39}\text{K}$  [90] y  $^{52}\text{Cr}$  [91].

### 2.2. Obtención del CBE

Para obtener un CBE, es necesario atrapar un gran número de átomos a temperatura ambiente para luego enfriarlos. Este proceso se lleva a cabo en una trampa magneto óptica (TMO) como la que se ilustra en la figura 2 y que consiste de 3 pares de láseres contrapropagantes, circularmente polarizados y cuya eficiencia se debe al uso combinado de dos técnicas de enfriamiento (enfriamiento Doppler y enfriamiento Sísifo), que logran temperaturas cercanas a los  $10\mu\text{K}$ . Sin embargo, esta temperatura no es suficiente para alcanzar la condensación, por lo cual se hace necesario disminuir la temperatura del sistema hasta un orden aproximado de  $100\text{nK}$  por medio de la técnica denominada enfriamiento evaporativo, cuya función general consiste en dejar escapar los átomos con mayor energía y mantener densidades superiores a los  $10^{13}\text{cm}^{-3}$ .

## 2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

---

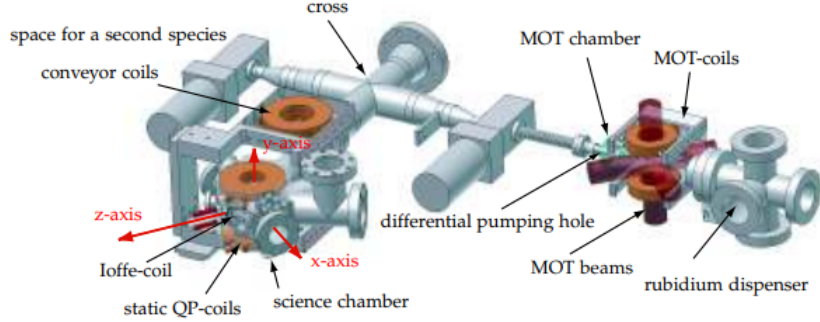


Figura 2: Mesa de vacío: Por medio del enfriamiento láser se disminuye la temperatura de los átomos confinados en la cámara TMO hasta el orden de los microkelvin. Luego para alcanzar la temperatura de condensación, se utiliza la técnica de enfriamiento evaporativo en la cámara de ciencia, donde se realizan los diferentes estudios y se obtienen las imágenes de absorción. Figura tomada de [92].

El procedimiento básico para obtener un CBE con átomos de  $^{87}\text{Rb}$  consiste de cuatro pasos:

1. **Preparación y captura:** Los átomos se confinan en una TMO conformada por un par de bobinas magnéticas circulares, que inducen un campo magnético en el eje axial y luego por medio de enfriamiento láser, se les disminuye la temperatura desde la temperatura ambiente hasta unos  $150\mu\text{K}$ .
2. **Transporte y transferencia:** Una vez se han atrapado los átomos, estos deben tener un tiempo de vida prolongado debido a que la etapa del enfriamiento evaporativo dura  $\sim 30\text{s}$ . Es por esta razón que se hace necesario transportar el gas a través de un agujero de bombeo diferencial al interior de la cámara de vacío (figura 2), donde se disminuye la presión para alcanzar el estado condensado. Para transportar los átomos se hace necesario confinarlos únicamente en el campo magnético, lo cual se logra aumentando la corriente que circula por las bobinas; este incremento aumenta la energía potencial de los átomos más externos de la trampa provocando un calentamiento del sistema y como consecuencia se pierde aproximadamente la mitad de los átomos.
3. **Enfriamiento evaporativo:** Esta etapa se lleva a cabo en la cámara de ciencia (figura 2) y consiste en remover del gas los átomos con mayor energía, disminuyendo lentamente la profundidad de la trampa de confinamiento, para dar tiempo a que los átomos de menor energía alcancen el equilibrio térmico a una menor temperatura por medio de colisiones elásticas.
4. **Imágenes de absorción:** Sobre la nube de átomos ultrafríos se hace incidir un rayo láser que es resonante con el sistema. Debido a esta interacción, parte de los fotones del láser es absorbido por los átomos y parte se dispersa, haciendo que los átomos se registren como sombras en una cámara acoplada al sistema.

Este procedimiento sirve para medir la distribución de velocidades a diferentes temperaturas después de un periodo de expansión libre (“time-of-flight experiment”) de un vapor de  $^{87}\text{Rb}$ ,

como se observa en la figura 3. En cada una de las imágenes, se observa que la densidad óptica es proporcional a la densidad de átomos que se encuentra en cada estado (normal o condensado), al producirse una expansión balística de la nube. La forma redondeada que adquiere la nube térmica cuando el sistema se encuentra en el estado de gas normal (color verde y amarillo figura 3 A y B), indica una distribución isotrópica de las velocidades de las partículas debido a que el sistema se encuentra en equilibrio térmico. Al disminuir la temperatura, la velocidad de las partículas en la dirección axial es mayor que la velocidad en la dirección radial, por lo cual el gas adquiere una forma elíptica indicando que algunas partículas se encuentran en el estado condensado (coloración blanca y azul figura 3 B y C). Debido a que a bajas temperaturas casi todas las partículas se encuentran condensadas, se tiene una baja propagación de partículas que se evidencia en las áreas rojas. Los átomos que se encuentran en el estado condensado se describen por medio de la misma función de onda macroscópica.

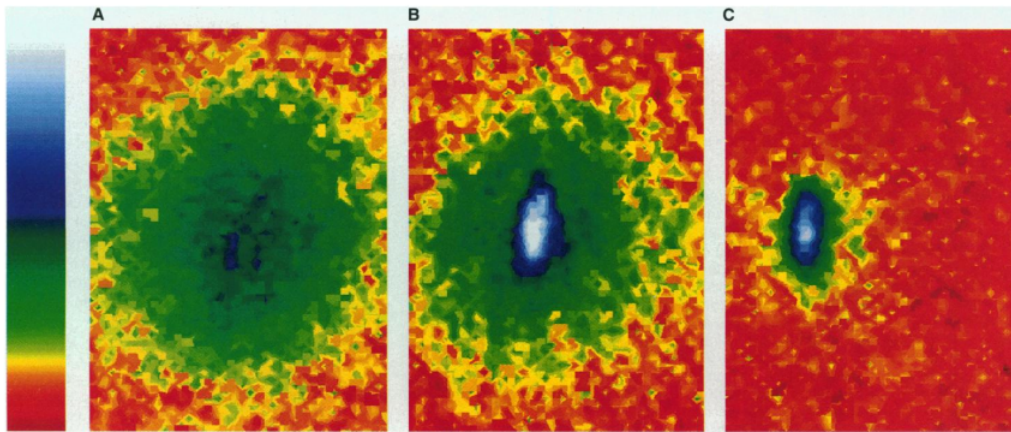


Figura 3: Distribución de momentos para un gas de átomos de rubidio. El color rojo indica que se tienen pocos átomos en cada una de las velocidades, la coloración blanca y azul indican una concentración de átomos en el estado condensado. La fracción no condensada se ilustra mediante el color verde y el amarillo. La gráfica de la izquierda representa la distribución de momentos antes de la condensación para  $T > T_c$  (sobre 400 nK) con una densidad de partículas de  $2.6 \times 10^{12} \text{cm}^{-3}$ , la gráfica del centro es la distribución de momentos inmediatamente después de la condensación para  $T < T_c$  (sobre 200 nK) con una densidad de partículas de  $2 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$  y la de la derecha indica la distribución de momentos luego de cierta evaporación  $T \ll T_c$  (sobre 50 nK) con  $\approx 2000$  átomos. El ancho mínimo en la distribución de velocidades de los átomos, es debido a que se encuentran confinados. Figura tomada de [2].

### 2.3. CBE en redes ópticas

Luego de la generación del CBE en la cámara de ciencia, es posible realizar sobre este una gran variedad de experimentos, como por ejemplo estudiar su comportamiento en una red óptica. Las redes ópticas son arreglos periódicos estables de potenciales microscópicos (cada potencial representa un sitio  $i$  dentro de la red) en diferentes dimensiones, creados por patrones de interferencia que se generan al superponer dos o más rayos láser [93]. Estos potenciales atrapan los átomos en las regiones de máxima o mínima intensidad, dependiendo de la razón entre la

## 2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

longitud de onda de la red y la frecuencia de transición de los átomos.

Para crear una red de potenciales en una dimensión, se utiliza un par de rayos láser contrapropagantes que generan un único patrón de interferencia. Si a la anterior configuración se le adicionan un par de rayos láser contrapropagantes y con una incidencia perpendicular a los dos primeros como se ilustra en la figura 4a, se generan dos ondas estacionarias ortogonales entre sí, que crean una serie de potenciales con forma de tubos unidimensionales que obligan a los átomos a moverse a lo largo del eje del tubo. La superposición de tres ondas estacionarias ortogonales genera un cristal cúbico simple en tres dimensiones como se observa en la figura 4b, en la cual, cada uno de los sitios actúa como un potencial de confinamiento de tipo armónico.

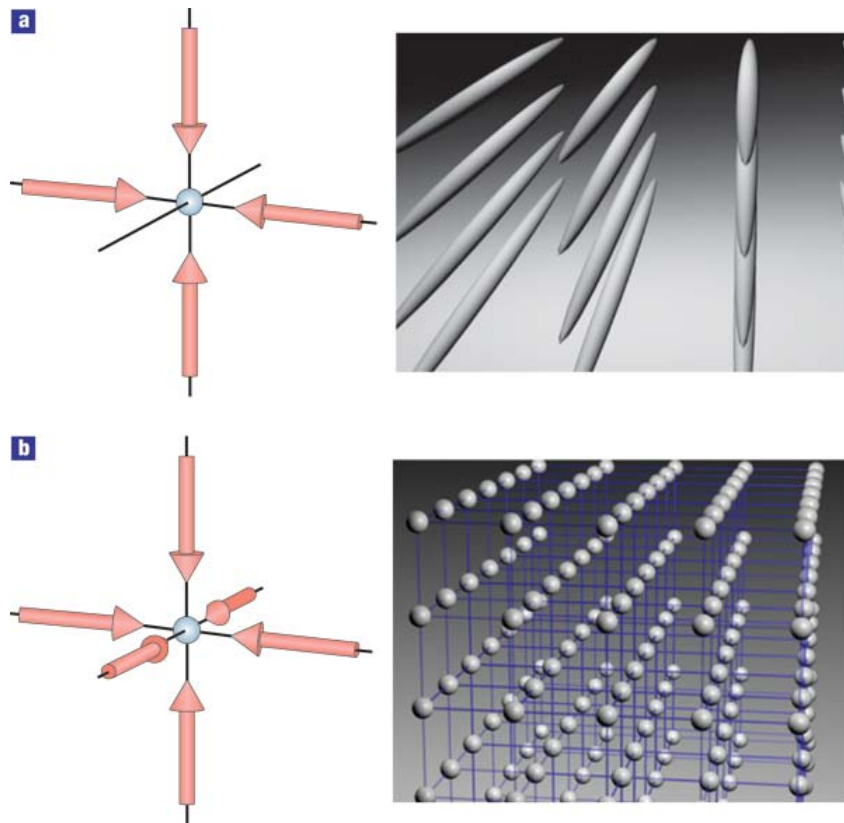


Figura 4: Red óptica: a) Red óptica en dos dimensiones generada por la superposición de dos ondas estacionarias. b) Red óptica en tres dimensiones generada por la superposición de tres ondas estacionarias. Figura tomada de [94].

Gracias al alto control que se tiene en los diferentes parámetros de interacción y en la geometría de la red, es posible investigar transiciones de fase cuántica [5] y otros fenómenos cuánticos básicos [6, 7], como la transición de fase que va desde el estado superfluido a la fase aislante de Mott, predicha en 1998 por D. Jaksch *et al.* [6] y observada en el laboratorio por M. Greiner *et al.* [38]. Experimentalmente el sistema se conformó con átomos de  $^{87}\text{Rb}$  confinados en una red óptica tridimensional y con una interacción bosón-bosón de tipo repulsivo, que permitía



a los átomos tunelar entre sitios cercanos siempre y cuando esta interacción fuese pequeña comparada con la amplitud de tunelamiento, generando de esta manera el estado superfluido.

Físicamente la fase superfluida se describe mediante una función de onda que no se encuentra localizada y con coherencia de fase de largo alcance, que genera patrones de interferencia. Los patrones de interferencia constructivos, indican que existe coherencia de la onda de materia, como se observa en la figura 5. La no localización de la función de onda provoca una disminución en la energía total del sistema de muchos cuerpos como respuesta a la disminución de la energía cinética dominante. La pérdida de la coherencia en la función de onda se da cuando la interacción de tipo repulsivo entre los átomos es mayor que la amplitud de tunelamiento, lo cual ocasiona que cada uno de los sitios de la red se llene con el mismo número de átomos (estado aislante de Mott<sup>5</sup>) minimizando la energía total del sistema [38].

En el experimento de Greiner *et al.* la transición entre la fase superfluida y la fase aislante se logró variando la profundidad del pozo de confinamiento, lo cual produjo cambios en los patrones de interferencia como se observa en la figura 5. En el regimen superfluido todos los átomos se encuentran delocalizados a través de la red y la fase relativa entre los diferentes sitios es igual (coherencia de fase entre sitios), lo cual produce un patrón de interferencia, donde los máximos indican un alto grado de coherencia en fase. Al incrementar la profundidad del pozo, los máximos de los patrones de interferencia dejan de crecer y poco a poco la coherencia de los átomos tiende a cero. Un fenómeno interesante que caracteriza la transición de fase del estado coherente al incoherente, es que cuando el patrón de interferencia es todavía visible, no se detectan aumentos en los máximos de interferencia, hasta que estos se desvanecen en el estado aislante.

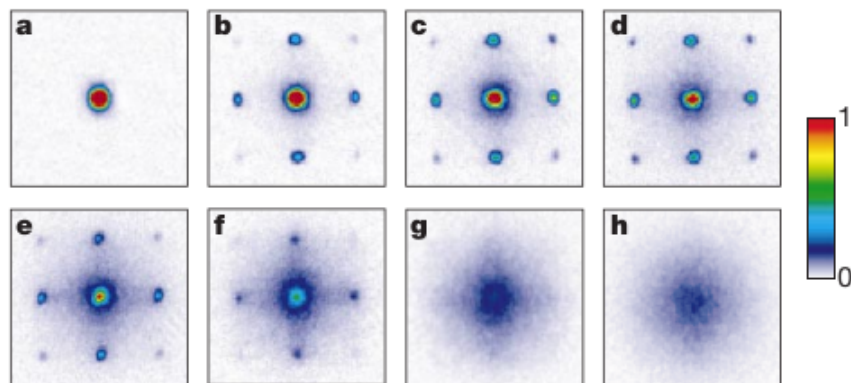


Figura 5: Para medir la de coherencia entre los diferentes sitios al variar el potencial de la red, se apaga el potencial de confinamiento y se permite una expansion libre de las funciones de onda de los bosones. Mediante esta técnica se obtienen las diferentes imágenes de absorción de los patrones de interferencia entre ondas de materia. En la figura se muestra la transición entre la fase superfluida donde existe coherencia de la función de onda, a la fase aislante donde se pierde la coherencia. Figura tomada de [38].

La primera observación directa del perfil de densidad de la fase aislante de Mott se realizó en

<sup>5</sup>La fase aislante de Mott se caracteriza principalmente por ser incompresible y por la supresión de las fluctuaciones en la densidad local inducida por la interacción entre partículas.



el año 2009 usando un gas degenerado de Bose, constituido por átomos de  $^{133}\text{Cs}$  confinados en una red óptica bidimensional y con una interacción de tipo repulsivo [95]. La figura 6 muestra los perfiles de densidad obtenidos en esta observación y la transición de fase desde el estado superfluido a la fase aislante de Mott. La figura 6A muestra al sistema en el régimen superfluido, que se caracteriza por un perfil de densidad con forma de campana, con curvatura negativa en el centro, lo que indica que la variación de la densidad de bosones con respecto al potencial químico es positiva finita y para este caso depende de la constante de acoplamiento. A medida que se incrementa adiabáticamente la profundidad de la trampa, se observa como se forma una densidad aplanada en el centro de la muestra (figuras 6B, 6C), lo que indica la aparición de la fase aislante de Mott con una partícula en cada uno de los sitios de la red (línea roja discontinua). Una de las características importantes de esta fase es la incompresibilidad.

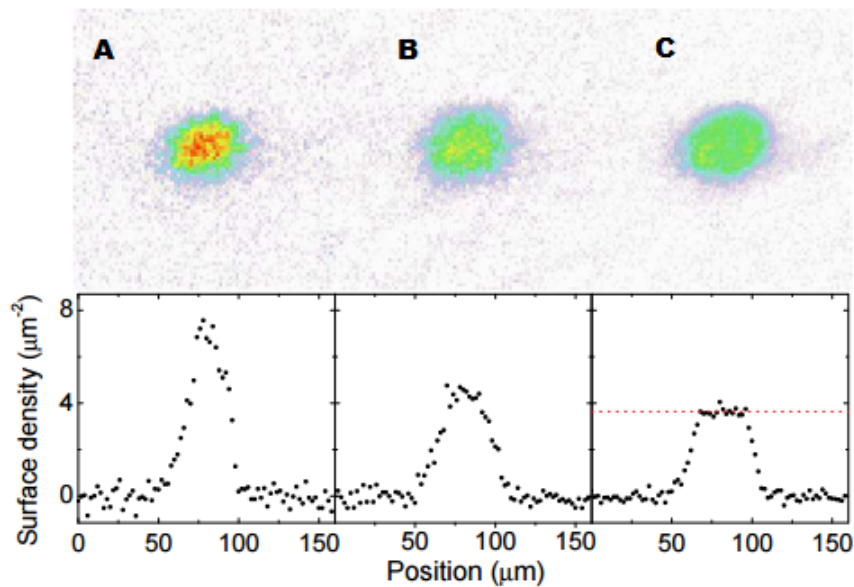


Figura 6: Perfil de densidad y líneas de corte para átomos ultrafríos de Cesio. A) Régimen superfluido. B) Transición de fase C) Régimen aislante de Mott. La línea roja discontinua indica la densidad esperada para un átomo por sitio. Figura tomada de [95].

#### 2.4. Gases cuánticos de fermiones

De forma simultánea al desarrollo teórico y experimental de los CBE, se llevó a cabo el estudio de los gases cuánticos constituidos por partículas fermiónicas interactuantes. Estas partículas se caracterizan por tener espín semientero, obedecer la estadística de Fermi-Dirac y tener una función de onda anti-simétrica ante el intercambio espacial de un par de partículas.

El estudio de los gases cuánticos a bajas temperaturas conformados por partículas fermiónicas, despertó gran interés en la comunidad científica, luego de la realización experimental del CBE en un gas molecular de fermiones interactuantes. En este experimento se utilizó la técnica de

## 2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

enfriamiento evaporativo en un gas de Fermi constituido por átomos de  $^{40}\text{K}$  y luego de forma adiabática por medio de resonancia Feshbach<sup>6</sup> se controló la interacción entre las partículas, permitiendo de esta manera ir desde un estado superfluido a la creación reversible de bosones compuestos localmente por parejas de fermiones, que se atraen a pesar de tener cargas de igual signo. Este fenómeno se puede observar en la figura 7, que presenta la distribución de momentos para temperaturas mayores y menores a la temperatura crítica para la formación del condensado de Bose-Einstein. La fase de condensación se presenta en términos de la temperatura de Fermi  $T_F = (6N\nu_r^2\nu_z)^{1/3} \frac{h}{k_B}$ , donde  $N$  representa el número de partículas en cada uno de los estados de espín,  $\nu_r$  y  $\nu_z$  representan las frecuencias axiales y radiales de la trampa de confinamiento,  $h$  representa la constante de Plank y  $k_B$  es la constante de Boltzmann [96].

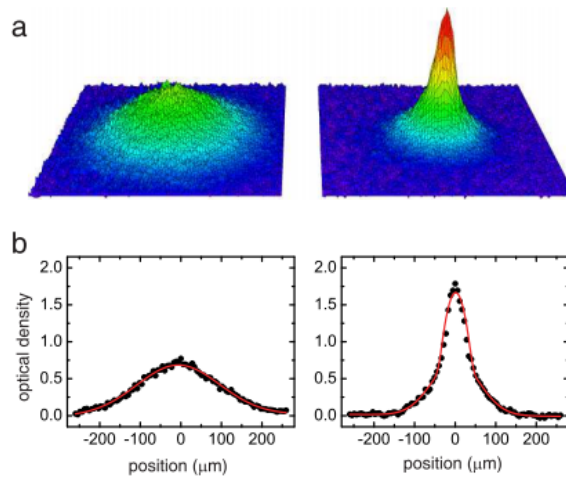


Figura 7: Imágenes del tiempo de vuelo para una nube molecular constituida por átomos de  $^{40}\text{K}$ . a) Diagrama de superficie de la densidad óptica creada por medio de resonancia Feshbach para una temperatura de  $0.19 T_F$  (izquierda) y  $0.06 T_F$  (derecha). Esta fase se caracteriza por una pronunciada distribución del momento bimodal y por ser una nube de moléculas débilmente unidas. b) Sección transversal para la fracción no condensada a temperatura  $T=0.90 T_c$  (izquierda) y fracción condensada a  $T=0.49 T_c$  (derecha).  $T_c$  es la temperatura crítica para un CBE no interactuante en equilibrio térmico. Figura tomada de [96].

El primer gas de Fermi degenerado se realizó experimentalmente al confinar en trampas magnéticas átomos de  $^{40}\text{K}$  [13] y enfriarlos hasta una temperatura de 300 nK . La técnica experimental se ilustra esquemáticamente en la figura 8 y básicamente consistía en un pre-enfriamiento de los átomos en una doble trampa magneto óptica.

<sup>6</sup>La resonancia Feshbach se produce cuando la energía del estado base (canal cerrado) es cercana a la energía asociada a algún proceso de dispersión de tipo elástico (canal abierto) de las partículas que interactúan en cada uno de los sitios de la red, permitiendo alcanzar regímenes de interacción fuertes [50, 57, 97].

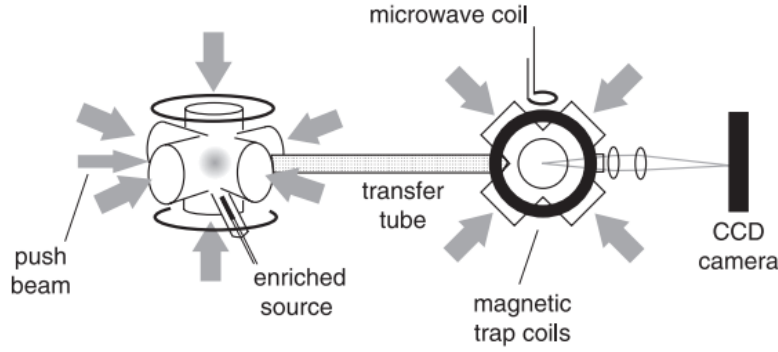


Figura 8: Esquema de la doble trampa magneto-óptica. El tubo de transferencia permite crear una diferencia de presión entre los dos MOTs. Para disminuir la temperatura de los átomos se utiliza la técnica del enfriamiento evaporativo por medio de un campo de microondas generado por una pequeña bobina. Por último se liberan los átomos de la trampa y se estudian por medio del dispositivo de carga acoplada. Figura tomada de [13].

La primera TMO captura los isótopos de  $^{40}\text{K}$  a temperatura ambiente. Luego por medio de pulsos de luz, los átomos se empujan hasta la segunda TMO donde existe un alto vacío y se hace un enfriamiento Doppler hasta los  $150\mu\text{K}$ . Por último los átomos se atrapan únicamente en una trampa magnética que produce un potencial de tipo armónico.

Con los gases cuánticos constituidos por fermiones, también es posible la realización experimental de la fase aislante de Mott, la cual se presenta cuando la interacción entre partículas es fuerte y se caracteriza por una supresión de la conductividad. Experimentalmente el aislante de Mott con gases cuánticos degenerados de fermiones se realizó en el año 2008 usando átomos de  $^{40}\text{K}$  con una interacción entre partículas de carácter repulsivo. La longitud de dispersión de las ondas  $s^7$  se manipuló por medio de resonancia Feshbach y los átomos se confinaron en un red óptica tridimensional [98], donde se estudió la formación de parejas fermiónicas en cada uno de los sitios de la red (doble ocupación), al aumentar el número de partículas. En este experimento se investigó la compresibilidad en la fase aislante de Mott que aparece en el centro de la trampa cuando el régimen de acoplamiento es repulsivo y se caracteriza por un cambio en la doble ocupación, al aumentar el número de átomos como se observa en la figura 9.

<sup>7</sup>El método de onda parcial consiste en la dispersión de ondas incidentes, cuyo número cuántico de momento angular se encuentra bien definido. Por medio de este método se explica como el potencial de interacción afecta las ondas  $s, p$  y  $d$ . Si el sistema que se considera está constituido por partículas de muy baja energía, solo se consideran que las ondas  $s$  participan en el proceso de dispersión.

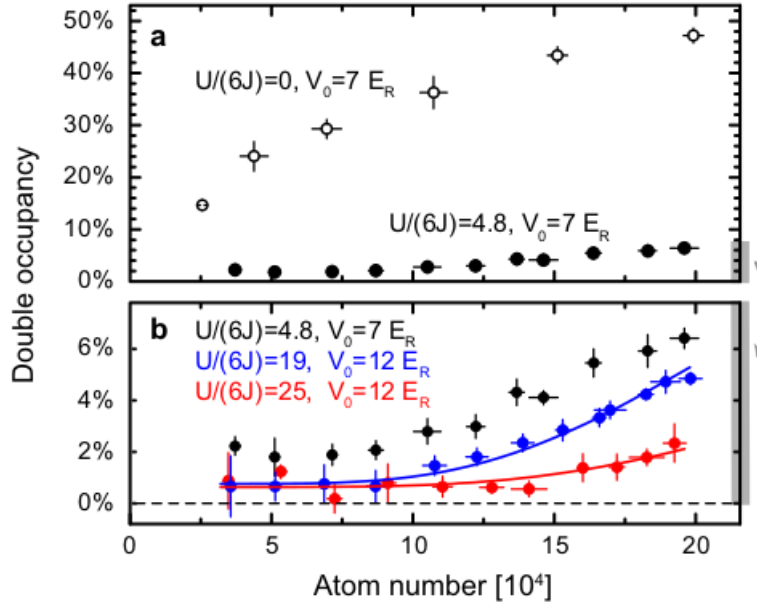


Figura 9: Doble ocupación como función del número total de átomos en el régimen no interactuante y en el régimen aislante de Mott. a.) En el régimen no interactuante se observa un incremento de la doble ocupación a medida que se aumenta el número de partículas (círculos vacíos). b.) En el régimen de interacción fuerte la doble ocupación es inferior al 2% para un número pequeño de átomos lo cual indica que el número de partículas en cada sitio permanece constante (círculos sólidos). Las líneas rojas y azules representan el valor teórico esperado en el límite atómico. Figura tomada de [98].

Los gases degenerados compuestos por fermiones se han aplicado en la investigación de la transición entre la superfluidez Bardeen-Cooper-Schrieffer y la CBE de moléculas [99, 100, 101]. También se han usado en el estudio experimental de las oscilaciones de Bloch fermiónicas [102] y en la observación de las superficies de Fermi[103]

## 2.5. Gases cuánticos ultrafríos conformados por bosones y fermiones

La física de muchos cuerpos para sistemas compuestos por fermiones se estudia típicamente sin impurezas. Sin embargo los sistemas físicos reales no son sistemas fermiónicos puros, sino que por el contrario interactúan con fonones, magnones y otras excitaciones, haciendo relevante el estudio de las mezclas entre bosones y fermiones. Estos poseen una gran variedad de transiciones de fase cuántica [34] e interesantes propiedades de excitación [104, 21]. Además se han estudiado en diversas áreas de la física como: la física de partículas, física de la materia condensada entre otras [62].

Inicialmente estas mezclas se propusieron para enfriar fermiones por medio de la técnica conocida como enfriamiento simpático, en la cual se inducen colisiones inter-especies por medio de luz, provocando una reducción del número de fermiones y manteniendo casi constante el número de bosones. Esta técnica se utiliza ya que a bajas temperaturas no existe interacción de dos cuerpos en los gases de Fermi con espín polarizado (debido al principio de exclusión

de Pauli), lo que impide el uso del enfriamiento evaporativo<sup>8</sup> y condiciona el enfriamiento de los fermiones a colisiones entre átomos distinguibles [27].

En los años 70 se propuso por primera vez una mezcla Bose-Fermi compuesta por isótopos de  $^4\text{He}$  (bosónico)- $^3\text{He}$ (fermiónico) [31] que aún no se ha realizado experimentalmente, debido a que la miscibilidad del  $^3\text{He}$  en  $^4\text{He}$  es muy pequeña y la temperatura necesaria para que los fermiones alcancen la superfluidez es muy baja para conseguirla con las técnicas existentes [32]. Sin embargo, se han obtenido en el laboratorio gases cuánticos degenerados conformados por átomos metaestables<sup>9</sup> de  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  [15].

Otra de las realizaciones experimentales con estas mezclas, se encuentra configurada con átomos bosónicos de  $^{87}\text{Rb}$  y átomos fermiónicos de  $^{40}\text{K}$ ; en esta mezcla se han observado transiciones de fase bosónicas desde el estado superfluido a la fase aislante de Mott [33, 36, 37, 38]. Las mezclas entre aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos con correlación fuerte se han realizado experimentalmente considerando el tipo de interacción entre los aislantes, usando isótopos bosónicos de  $^{170}\text{Yb}$  e isótopos fermiónicos de  $^{173}\text{Yb}$  para el caso de interacción atractiva, y para el caso repulsivo se usaron isótopos bosónicos de  $^{174}\text{Yb}$  e isótopos fermiónicos de  $^{173}\text{Yb}$ . Con estas mezclas se encontró que debido a la interacción interespecies (bosones-fermiones), se modifica drásticamente cada una de las fases aislantes de Mott, causando efectos que incluyen la mezcla entre las fases aislantes de Mott bosónicas y fermiónicas, generación de partículas compuestas, una fase aislante de Mott anti correlacionada en la cual cada aislante de Mott tiene diferente número de ocupación y una separación de fase en la cual existen regiones con solo una de las especies [21].

Experimentalmente también ha sido posible producir condensados compuestos por isótopos fermiónicos de  $^6\text{Li}$  e isótopos bosónicos de  $^7\text{Li}$  [34].

Las mezclas Bose-Fermi superfluidas, fueron obtenidas inicialmente con gases cuánticos de  $^7\text{Li}$  -  $^6\text{Li}$  [22, 106, 107] y se caracterizan por tener una interacción Bose-fermi demasiado débil para cambiar de forma significativa los perfiles de densidad de cada especie.

Experimentos recientes de mezclas Bose-Fermi confinadas en redes ópticas, han caracterizado un sistema conformado por una mezcla de isótopos fermiónicos de  $^{173}\text{Yb}$  e isótopos bosónicos de  $^7\text{Li}$  confinados en diferentes dimensiones [23]. Por medio de los resultados obtenidos se verificaron las longitudes de dispersión elástica. Además se comprobó que los efectos de la interacción entre especies son pequeños y que estos pueden ser manipulados por medio de resonancia de Feshbach para alcanzar las interacciones Bose-Fermi requeridas. En una dimensión se ha renovado el interés por el estudio de estos sistemas, debido al progreso que en la última década se ha dado en la captura, enfriamiento y manipulación de los gases cuánticos [35].

---

<sup>8</sup>En forma general el proceso para disminuir la temperatura de los átomos consta de cuatro etapas: 1. Desaceleración del haz atómico, 2. Enfriamiento sub-Doppler y captura en una trampa magneto-óptica, 3. Transferencia a un potencial conservativo y 4. Enfriamiento evaporativo. La técnica del enfriamiento sub-Doppler es ineficiente para disminuir la temperatura de los fermiones, por lo cual no se pueden atrapar en trampas magnéticas [105].

<sup>9</sup>Un isótopo metaestable es un isótopo en el que los nucleones están en un estado excitado durante un período de tiempo 100 veces más largo que un estado excitado normal. Para el caso se consideró el He en estado metaestable  $2^3S_1$ .

## 2. GASES ATÓMICOS DEGENERADOS

---

Algunas de las investigaciones experimentales que se han realizado con mezclas entre bosones y fermiones son:

Fermion-Boson	Referencia
${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$	[15]
${}^{173}\text{Yb} - {}^{170}\text{Yb}$ y ${}^{173}\text{Yb} - {}^{174}\text{Yb}$	[21]
${}^{173}\text{Yb} - {}^7\text{Li}$	[23]
${}^{40}\text{K} - {}^{23}\text{Na}$	[24]
${}^{171}\text{Yb} - {}^{87}\text{Rb}$	[25]
${}^{40}\text{K} - {}^{41}\text{K}$	[26]
${}^6\text{Li} - {}^{23}\text{Na}$	[27]
${}^6\text{Li} - {}^{174}\text{Yb}$	[32]
${}^{173}\text{Yb} - {}^{174}\text{Yb}$	[88]
${}^6\text{Li} - {}^7\text{Li}$	[108]
${}^{40}\text{K} - {}^{87}\text{Rb}$	[109]
${}^{87}\text{Sr} - {}^{84}\text{Sr}$	[110]
${}^6\text{Li} - {}^{87}\text{Rb}$	[111]
${}^6\text{Li} - {}^{85}\text{Rb}$	[112]
${}^6\text{Li} - {}^{133}\text{Cs}$	[113]
${}^6\text{Li} - {}^{41}\text{K}$	[114]
${}^{40}\text{Na} - {}^{87}\text{Rb}$	[115]

Cuadro 2: Experimentos con mezclas de átomos bosónicos y fermiónicos

Los estudios teóricos de las mezclas Bose-Fermi se han realizado por medio de aproximaciones como: aproximación de campo medio [28], el formalismo del líquido de Luttinger [46], aproximación de la matriz T [47], el ansatz de Bethe [48, 49] y métodos numéricos como la simulación de Monte Carlo cuántico [50, 51, 52].

Gracias a estos y otros aportes tanto teórico como experimentales, ha sido posible comprender parte de la fenomenología presentada por las mezclas Bose-Fermi. Principalmente los estudios se han concentrado en sistemas donde se considera que tanto las partículas bosónicas como las fermiónicas no tienen espín. Esto deja un amplio camino por recorrer en el estudio de los sistemas constituidos por bosones sin espín y fermiones con dos grados de libertad internos.

Para poder avanzar en el estudio de las mezclas Bose-Fermi confinadas en redes ópticas, se procederá en el siguiente capítulo a estudiar la teoría del modelo Bose-Fermi-Hubbard.

# 3

## HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

### 3.1. Hamiltoniano de Hubbard

El modelo de Hubbard se desarrolló teóricamente en la física de la materia condensada para describir transiciones de fase entre estados conductores y estados aislantes de Mott [116]. Este modelo permite estudiar la competencia entre la energía cinética y las interacciones entre electrones confinados en una red de potenciales periódicos n-dimensional [117, 118] y se deriva a partir del Hamiltoniano de muchas partículas, considerando que éstas pueden ser tanto de tipo bosónico como fermiónico. El potencial de interacción entre pares de partículas es un potencial de contacto que se expresa como

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2}{m_{B/F}} a_s \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (6)$$

donde  $a_s$  es la longitud de dispersión de onda  $s$ , que es un parámetro clave para describir las interacciones entre partículas a muy bajas energías y caracteriza la aproximación del pseudo-potencial de contacto, del potencial de van der Waals [119]. Es por ello que se utilizan en el estudio de las colisiones entre pares de partículas en el límite de bajas temperaturas y se define como

$$a_s = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan(\eta_s(k))}{k}, \quad (7)$$

donde  $k$  es el vector de onda relativo entre las partículas en colisión y  $\eta_s(k)$  es el cambio de fase en la dispersión [120].

Para el caso de fermiones sin espín, la dispersión de onda  $s$  se encuentra prohibida debido al principio de exclusión de Pauli, por lo que en dicho límite se debe considerar que no existe interacción. En el caso de los gases atómicos diluidos, la interacción entre partículas se describe por medio de esta longitud  $a_s$ , debido a que cuando las temperaturas son suficientemente bajas, se suprime la dispersión del momento angular distinto de cero. Es por esta razón que para el sistema que se va a estudiar, mezcla de átomos ultrafríos confinados en redes ópticas, se considera el potencial de interacción de la ecuación (6) y el Hamiltoniano de muchas partículas

$$\begin{aligned} H_{B/F} = & \int d^3\vec{r} \Psi_{B/F}^\dagger(\vec{r}) \left( \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_{B/F}} + V_P + V_R \right) \Psi_{B/F}(\vec{r}) \\ & + \frac{2\pi\hbar^2}{m_{B/F}} a_s \int d^3\vec{r} \Psi_{B/F}^\dagger(\vec{r}) \Psi_{B/F}^\dagger(\vec{r}) \Psi_{B/F}(\vec{r}) \Psi_{B/F}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (8)$$

El primer término de este Hamiltoniano da cuenta de la energía cinética y potencial local del sistema, considerando el potencial de confinamiento de la red  $V_R$  y otro de confinamiento periódico externo  $V_P$ . El segundo término es la energía de interacción. Ambas energías se expresan en términos de los operadores de campo bosónicos (fermiónicos) de creación  $\Psi_{B/F}^\dagger(\vec{r})$

### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

y de destrucción  $\Psi_{B/F}(\vec{r})$  en la posición  $\vec{r}$ , que satisfacen las relaciones de conmutación (anticommutación).

Para expandir los operadores de campo  $\Psi_{B/F}^\dagger(\vec{r})$  y  $\Psi_{B/F}(\vec{r})$  se necesita una base apropiada conformada por los estados de una partícula atrapada en un potencial periódico. Cada potencial periódico se genera por medio de un par de ondas laser contrapropagantes e igualmente polarizadas que forman una onda estacionaria de la forma  $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ , donde  $k = 2\pi/\lambda$ , siendo  $\lambda$  la longitud de onda del laser y  $V_0$  la profundidad de la red óptica que es proporcional a la intensidad del laser [94].

Si el sistema cuántico se encuentra compuesto por partículas no interactuantes, la energía cinética se minimiza por medio de la delocalización de las partículas; en este caso la expansión de los operadores se realiza considerando las funciones de Bloch, las cuales, de acuerdo al teorema de Bloch, se pueden expresar como el producto entre una onda plana y una función con la misma periodicidad del potencial. De esta manera la función de Bloch de la banda  $n$  con cuasimomento  $\vec{q}$  es:

$$\Psi_{\vec{q}}^{(n)}(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} u_{\vec{q}}^{(n)}(r), \quad (9)$$

donde  $u_{\vec{q}}^{(n)}(r+d) = u_{\vec{q}}^{(n)}(r)$ .

Si se considera que existe interacción, las partículas tienden a estar localizadas para reducir la energía de acoplamiento, generando una competencia entre la energía cinética y la energía de interacción; esta competencia es el núcleo del modelo de Hubbard. En este caso se deben utilizar en la expansión de los operadores de campo, funciones cuyos estados se encuentren localizados y es la razón por la cual no se utilizan los estados propios dados por las funciones de Bloch. Las funciones que consideran los efectos locales, son las funciones de Wannier, que a diferencia de las funciones de Bloch, son funciones que se encuentran localizadas en cada uno de los sitios de la red. Las funciones de Wannier no son más que la transformada de Fourier de las funciones de Bloch y se definen como:

$$w_n(\vec{r} - \vec{r}'_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'_i} \Psi_{n,\vec{q}}(\vec{r}), \quad (10)$$

donde  $N$  es la constante de normalización (número de sitios de la red). Como ya se mencionó, estas funciones se usan para expandir los operadores de campo  $\Psi_{B/F}(\vec{r}) = \sum_i \hat{a}_i w_n(\vec{r} - \vec{r}'_i)$  y  $\Psi_{B/F}^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \hat{a}_i^\dagger w_n(\vec{r} - \vec{r}'_i)$  con lo cual el Hamiltoniano de la ecuación (8) [6, 121, 122] se expresa ahora como

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} U_{i,j,k,l} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l, \quad (11)$$

donde  $\hat{a}_i^\dagger$  y  $\hat{a}_i$  representan respectivamente los operadores de creación y destrucción de una partícula en el sitio  $i$ ,  $t_{ij}$  representa los términos de la matriz de tunelamiento entre sitios adyacentes

$$t_{ij} = \int d^3\vec{r} w_1^*(\vec{r} - \vec{r}'_i) \left( \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_{B/F}} + V_p + V_R \right) w_1(\vec{r} - \vec{r}'_j), \quad (12)$$

y  $U_{ijkl}$  describe los elementos de la matriz que toman en cuenta todas las posibles formas de interacción entre los diferentes sitios de la red que se encuentran en la primera banda de



### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

---

Bloch,

$$U_{ijkl} = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m_{B/F}} \int d^3\vec{r} w_1^*(\vec{r} - \vec{r}_i) w_1^*(\vec{r} - \vec{r}_j) w_1(\vec{r} - \vec{r}_k) w_1^*(\vec{r} - \vec{r}_l). \quad (13)$$

Para simplificar un poco el Hamiltoniano de la ecuación (11), y obtener el modelo de Hubbard estándar, se consideran los siguientes puntos:

1. El modelo de Hubbard se restringe a la banda de Bloch más baja y por lo tanto, es una buena aproximación para partículas que se encuentran en un potencial periódico a temperaturas y llenado lo suficientemente bajos. Como consecuencia de esta simplificación se excluyen las bandas superiores al igual que el acoplamiento entre bandas.
2. Solo considera los elementos de la matriz de tunelamiento a vecinos cercanos debido a la naturaleza localizada de las funciones de Wannier.
3. Las interacciones de largo alcance se ignoran porque existe un pico en el potencial de interacción cuando  $\vec{r} = \vec{r}'$ . El valor numérico para los elementos de la matriz de interacción fuera del sitio es muy pequeño en comparación con los valores de los elementos de la matriz  $U_{i,i,i,i}$ .

Con estas aproximaciones, el Hamiltoniano de Hubbard se puede expresar como

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i, \quad (14)$$

donde  $t = t_{i,j}$  son los términos de la matriz de tunelamiento definidos en la ecuación (12),  $U_0 = U_{i,i,i,i}$  son los elementos diagonales de la matriz definida en la ecuación (13),  $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  es el operador número de partículas en el sitio  $i$  de la red,  $\langle i, j \rangle$  denota la suma sobre los vecinos más cercanos y  $\epsilon_i$  son los elementos diagonales  $t_{ii}$  de la matriz de tunelamiento que hace referencia a la energía de confinamiento del potencial externo que se expresa como

$$\epsilon_i = \int d^3\vec{r} w_1^*(\vec{r} - \vec{r}_i) V_p(\vec{r}) w_1(\vec{r} - \vec{r}_i). \quad (15)$$

En este modelo se pueden considerar dos límites:

1. Límite de interacción débil: En este régimen la interacción entre las partículas en cada sitio de la red es muy pequeña comparada con la energía cinética  $U_0 \ll t$  lo cual hace que los átomos se encuentren delocalizados a través de toda la red. Esta situación lleva a un estado conductor.
2. Aislante de Mott  $t \ll U$ : En este límite es posible despreciar el término de salto  $t$ , impidiendo el tunelamiento de las partículas entre sitios cercanos y estableciendo un estado con un número de partículas bien definido en cada uno de los sitios. Esto último implica que las fluctuaciones en el número de partículas para un potencial químico fijo es cero.

En las secciones 3.2 y 3.3 se usará esta generalización, para derivar los modelos Bose y Fermi Hubbard. Posteriormente con la generalización de estos modelos, se obtendrá el modelo Bose-Fermi-Hubbard.

### 3.2. Hamiltoniano Fermi Hubbard

En el año de 1963 John Hubbard plantea un modelo aproximado para explicar el comportamiento de los electrones que se encuentran en la banda de conducción en metales de transición [118]. Desde entonces este modelo se ha usado en diversas aplicaciones y en la descripción de fenómenos tales como la superconductividad, el comportamiento de los gases cuánticos confinados en redes ópticas. También se ha usado en la descripción de cristales simples con aislamiento antiferromagnético en una dimensión tales como los cupratos de cadena  $SrCuO_2$  y  $Sr_2CuO_3$  [123]. Por medio de este modelo ha sido posible la investigación del comportamiento de materiales como el trióxido de vanadio  $V_2O_3$  a altas temperaturas [124]. Además se ha usado para interpretar los resultados experimentales con materiales poliméricos [125], metales de transición y sus óxidos [126] entre otros materiales.

Experimentalmente el Hamiltoniano del modelo Fermi-Hubbard, es resultado directo de la red en la que se confinan gases cuánticos degenerados de átomos fermiónicos y conecta de forma directa las fronteras de investigación entre la física de los gases cuánticos y la física de la materia condensada.

Formalmente el Hamiltoniano para el modelo de Hubbard que describe el comportamiento de fermiones, se deriva desde el modelo de Hubbard (ecuación (14)) usando las relaciones de anticonmutación fermiónicas  $\{\hat{f}_{j,\sigma}, \hat{f}_{i,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$  :

$$\hat{H}_F = -t_F \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} + \frac{U_{FF}}{2} \sum_{i,\sigma \neq \sigma'} \hat{n}_{i,\sigma}^F \hat{n}_{i,\sigma'}^F + \sum_{i,\sigma} \epsilon_i \hat{n}_{i,\sigma}^F. \quad (16)$$

El primer término describe el tunelamiento de las partículas entre sitios cercanos de la red (término cinético) y el segundo término describe las interacciones entre partículas en cada uno de los sitios.  $\hat{f}_{i,\sigma}^\dagger$  y  $\hat{f}_{j,\sigma}$  representan respectivamente al operador de creación y aniquilación de un electrón con espín  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  en la posición  $i$ ,  $\hat{n}_{F,i,\sigma} = \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{i,\sigma}$  es el operador número para fermiones,  $t_F$  es la amplitud para el hopping entre sitios adyacentes.  $U_{FF}$  representa la interacción en cada sitio entre partículas fermiónicas con espín  $\uparrow$  y partículas fermiónicas con espín  $\downarrow$  debido al principio de exclusion de Pauli,  $\epsilon_i$  representa el término de confinamiento y el índice de la suma  $\langle i, j \rangle$  indica el acoplamiento entre sitios cercanos.

Las soluciones exactas a este Hamiltoniano en dimensiones arbitrarias son posibles cuando  $U_{FF}/t_F = 0$  o en el límite de acoplamiento fuerte ( $U_{FF}/t_F \rightarrow \infty$ ) donde se prohíbe que un sitio se encuentre doblemente ocupado. La solución exacta a este problema es desconocida excepto en una dimensión [127, 128], donde se puede encontrar usando el ansatz de Bethe, cuando  $U_{FF}$  y  $t_F$  son finitos. Sin embargo no ha sido posible encontrar una solución analítica en 2 y 3 dimensiones [129], por lo cual se emplean métodos numéricos aproximados.

El diagrama de fases del modelo Fermi-Hubbard es muy rico como resultado de las interacciones entre partículas, el tunelamiento cuántico, el principio de exclusion de Pauli, los diferentes grados de libertad internos entre otros. Los resultados en una dimensión para fermiones, se expresan en términos de cantidades como la densidad fermiónica  $\rho_F$

$$\rho_F = \frac{N_F}{L}, \quad (17)$$

### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

donde  $N_F$  es el número de partículas y  $L$  el número de sitios en la red; el potencial químico  $\mu_F$ , se define como la diferencia entre la energía del estado con  $N_F + 1$  partículas y el estado con  $N_F - 1$  partículas.

$$\mu_F = E(N_F + 1) + E(N_F - 1) - 2E(N_F) \quad (18)$$

y la compresibilidad

$$\kappa = \partial\rho_F/\partial\mu_F. \quad (19)$$

La relación entre la densidad fermiónica  $\rho_F$  y el potencial químico  $\mu_F$  para diferentes temperaturas, se pone de manifiesto en el diagrama de fases de la figura 10, donde para  $T = 0.25$  se crea un escalón que varía muy lentamente alrededor de  $\rho_F = 1$  y se mantiene hasta que  $\mu_F \approx -U/2$ . Esta región se conoce como fase aislante de Mott e indica la presencia de un fermión por sitio y se caracteriza porque su compresibilidad  $\kappa = \partial\rho_F/\partial\mu_F = 0$  [130].

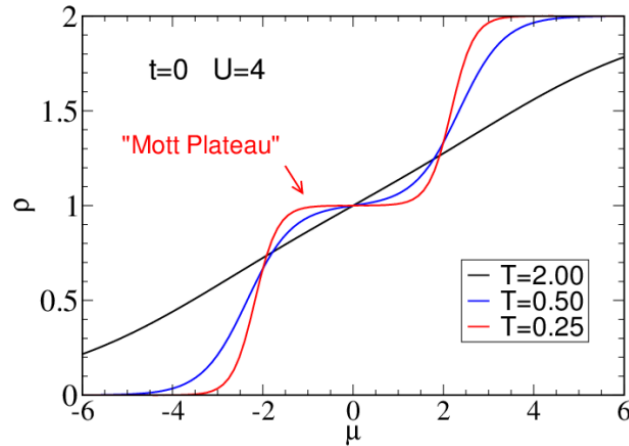


Figura 10: Densidad fermiónica  $\rho$  como función del potencial químico  $\mu$ . En la gráfica se considera que el valor del término de tunelamiento es  $t = 0$ . La fase aislante de Mott surge a medida que se disminuye la temperatura. Figura tomada de [130].

Como se muestra en la figura 10, el modelo Fermi-Hubbard en una dimensión y con un sector de espín total cero<sup>10</sup> (sin imbalance), presenta una transición de fase particular entre el estado metálico y el estado aislante que es función de la densidad de fermiones. Cuando en la cadena fermiónica se tiene un fermión por sitio  $\rho_F = 1$ , se presenta la fase aislante de Mott que se caracteriza por una onda de densidad de espín (SDW), sin importar el valor del parámetro de tunelamiento y para  $U_{FF} > 0$ . El estado fundamental del sistema es un estado metálico en los intervalos  $0 < \rho_F < 1$  y  $1 < \rho_F < 2$ . Para la densidad fermiónica  $\rho_F = 2$  se encuentran dos partículas fermiónicas con diferente espín en un mismo sitio y el estado fundamental en este caso es un aislante de banda. La descripción gráfica de dichos estados se presenta en la figura 11.

<sup>10</sup>El sector de espín total cero surge cuando el número de partículas con espines arriba es igual al de espines abajo.

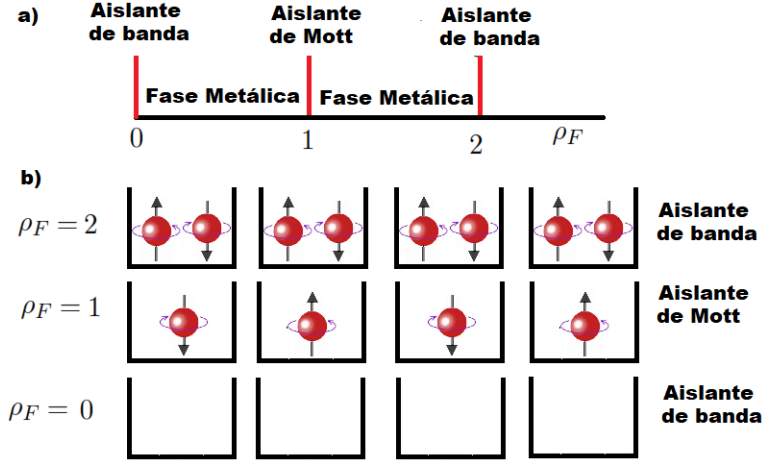


Figura 11: a) Diagrama de fases del modelo Fermi-Hubbard en una dimensión a  $T = 0$ . b) Representación de los estados aislantes. El estado aislante de banda se caracteriza por un gap entre la banda de valencia y la banda de conducción, además de tener dos ( $\rho_F = 2$ ) o cero ( $\rho_F = 0$ ) fermiones por sitio. Cuando  $\rho_F = 1$  se tiene un aislante de Mott y como se observa en la gráfica, los fermiones con espín arriba se alternan con los fermiones con espín abajo. Este comportamiento se conoce como onda de densidad de espín (SDW).

### 3.3. Hamiltoniano Bose-Hubbard

El modelo Bose-Hubbard describe la física de partículas bosónicas confinadas en un potencial periódico y se obtiene a partir del Hamiltoniano general de Hubbard (ecuación (14)) omitiendo los grados de libertad de espín y considerando que los operadores cumplen con las relaciones de conmutación bosónicas  $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ . Dicho Hamiltoniano está dado por

$$\hat{H}_B = -t_B \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U_{BB}}{2} \sum_i \hat{n}_i^B (\hat{n}_i^B - 1) + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i^B + \mu \sum_i \hat{n}_i^B. \quad (20)$$

En la ecuación anterior el primer término es la contribución de energía correspondiente a la delocalización de los bosones entre sitios vecinos de la red. El segundo término considera la energía total de interacción entre átomos que se encuentran en cada uno de los sitios.  $U_{BB}$  corresponde a la energía de interacción bosón-bosón y puede tomar valores negativos y positivos dependiendo si la interacción es atractiva o repulsiva. El operador bosónico de creación y aniquilación de átomos en el  $i$ -ésimo sitio de la red se representan por medio de  $\hat{b}_i^\dagger$ ,  $\hat{b}_i$  respectivamente,  $\hat{n}_i^B = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$  es el operador número para bosones,  $t_B$  es la amplitud para el “hopping” entre sitios adyacentes. El penúltimo término del Hamiltoniano es la energía asociada al potencial de confinamiento externo definido en la ecuación (15). Si se considera el ensamble gran canónico, el potencial químico  $\mu$  fija el número total de átomos del sistema.

En general este modelo no tiene solución analítica, debido al obstáculo que presenta la posibilidad de encontrar más de un bosón en cada sitio de la red. Esta múltiple ocupación también presenta problemas técnicos en las aproximaciones numéricas, por lo que usualmente se impone la restricción de tener un número máximo de bosones  $n_{max}$  por sitio. El caso trivial se

### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

presenta para  $n_{max} = 1$  debido a que no hay término de interacción entre los bosones; este caso se conoce como límite “hard-core”.

El modelo Bose-Hubbard permite identificar dos casos límites:

1. Cuando  $t_B \gg U_{BB}$  el término de tunelamiento es dominante, favoreciendo una máxima delocalización de las partículas y dando origen a la fase superfluida. Esta fase se describe mediante una función de onda delocalizada, con coherencia de fase de largo alcance y se logra cuando todos los átomos ocupan el mismo estado de Bloch de una partícula.
2. Cuando  $t_B \ll U_{BB}$  y  $U_{BB}$  es de carácter repulsivo se favorece la localización de los átomos en cada uno de los sitios de la red y se suprime por completo el número de fluctuaciones (fase aislante de Mott).

Por medio del modelo Bose-Hubbard se puede describir la transición de fase cuántica de segundo orden, que lleva al sistema desde la fase superfluida, al estado aislante de Mott<sup>11</sup> [38]. Esta transición se controla de forma bidireccional al aumentar o disminuir la razón  $t/U$  (donde  $U = U_{BB}$  y  $t = t_B$ ) como se observa en el diagrama de fases de la figura 12.

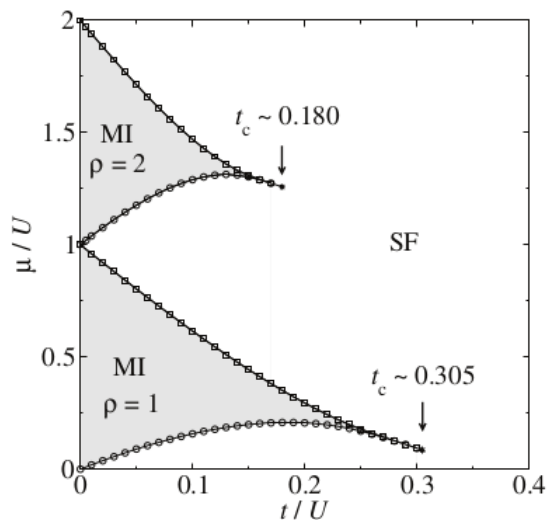


Figura 12: Diagrama de fase del estado base para el modelo Bose-Hubbard en una dimensión con el método numérico DMRG a  $T = 0$ . A medida que la razón  $t/U$  disminuye el sistema presenta una transición de fase desde la fase superfluida (SF) a la fase aislante de Mott (MI). La transición de fase se produce cuando la interacción de tipo repulsivo entre las partículas bosónicas  $U$ , es mayor que la amplitud de tunelamiento  $t$ , esto provoca una pérdida en la coherencia ocasionando que cada uno de los sitios de la red se llene con el mismo número de átomos (estado aislante de Mott). Figura tomada de [131].

La posible realización experimental del Hamiltoniano de Bose-Hubbard con átomos ultrafríos confinados en redes ópticas, se planteó por primera vez en 1998 por Jaksch *et al.* [6]. Cuatro

<sup>11</sup>En el formalismo del modelo Bose-Hubbard, las regiones aislantes se denominan lóbulos [6, 29, 131].

años después de ser propuesto, M. Greiner *et al.* [38] observaron experimentalmente la transición de fase cuántica desde el estado superfluido al estado aislante de Mott en un sistema conformado por bosones con interacciones repulsivas como se observa en la figura 13 y en la figura 5.

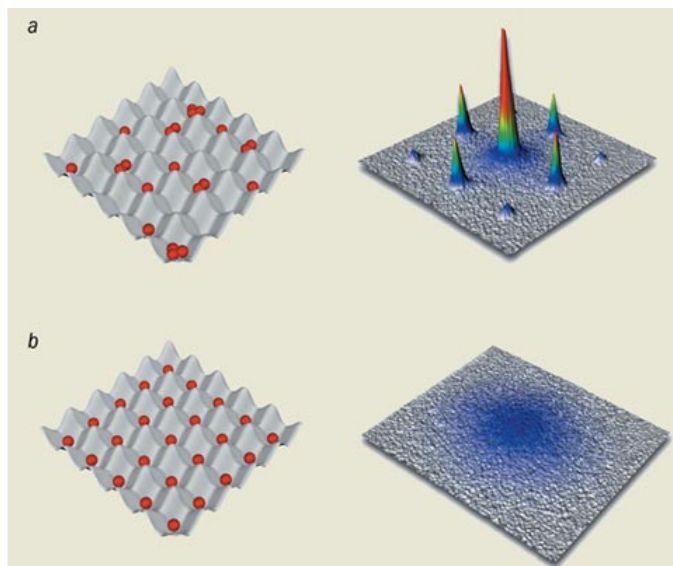


Figura 13: Transición desde la fase superfluida a la fase aislante de Mott. a) En la fase superfluida los átomos son libres por toda la red provocando coherencia entre los sitios y al liberar la nube atómica ésta se expande y genera un patrón de interferencia. b) En el estado aislante solo existe un bosón por sitio y no hay coherencia entre los diferentes pozos por lo cual no se observa ningún patrón de interferencia. Figura tomada de [38].

Dentro de los sistemas físicos constituidos por gases cuánticos ultrafríos confinados en redes ópticas que se pueden estudiar por medio del modelo Bose-Hubbard se encuentran

1. Sistemas conformados por fermiones con espín  $1/2$ , unidos en pares llamados dímeros y con una estadística de excitación bosónica. Este sistema se describe mediante el modelo Bose-Hubbard en el límite “hard-core” [132].
2. Interacción dipolar de largo alcance en átomos de  $^{161}\text{Dy}$  [18],  $^{167}\text{Er}$  [19] y  $^{153}\text{Cr}$  [20].

#### 3.4. Modelo Bose-Fermi-Hubbard

Teóricamente una mezcla de bosones y fermiones confinados en una red óptica, se describe por medio del Hamiltoniano de Bose-Fermi-Hubbard (BFH), introducido por el grupo de A. Albus [45] y que se expresa en términos de los modelos de Hubbard para bosones  $H_B$  (ecuación (20)) y para fermiones  $H_F$  (ecuación (16)) más un término de interacción entre partículas de diferente especie  $U_{BF}$ . Este término se puede considerar como una dispersión de onda  $s$  debido a la baja temperatura en que se encuentran estos sistemas y se modela por

### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

---

medio de un potencial de interacción de contacto

$$U_{BF}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2}{m_r} a_{BF} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (21)$$

donde  $m_r = \frac{m_B m_F}{m_B + m_F}$  representa la masa reducida y  $a_{BF}$  representa la longitud de dispersión entre bosones y fermiones. Este potencial puede ser positivo, cuando la interacción entre partículas de diferente especie es de tipo repulsivo, y negativo en caso de considerarse interacciones atractivas.

De esta manera el Hamiltoniano Bose-Fermi Hubbard se expresa como

$$\hat{H}_{BF} = \hat{H}_B + \hat{H}_F + U_{BF} \sum_{i,\sigma} \hat{n}_i^B \hat{n}_{i,\sigma}^F. \quad (22)$$

Dentro de las aproximaciones teóricas usadas en el estudio de BFH se pueden mencionar: aproximación de campo medio [28, 42, 45, 62, 133, 134], ansatz de Bethe [48, 49], aproximación de acoplamiento fuerte [29], grupo de renormalización de la matriz densidad [42], Monte Carlo cuántico [50, 51, 52, 53, 54], bosonización [39, 55], métodos estocásticos [51], entre otros [205]. Estas aproximaciones, han permitido predecir una gran variedad de fases cuánticas como: onda de densidad de carga (CDW) [30], cuasipartículas tipo polarón, estados aislante de Mott, estados superfluidos y comportamiento supersólido [37]. Los resultados predichos mediante los sistemas descritos teóricamente por el modelo de Bose-Fermi-Hubbard han sido verificados experimentalmente, por ejemplo, la condensación de Bose-Einstein en mezclas de bosones y fermiones ( ${}^6\text{Li} - {}^7\text{Li}$  [108] y  ${}^6\text{Li} - {}^{87}\text{Rb}$ ) confinadas en redes ópticas [111].

Por medio del Hamiltoniano Bose-Fermi Hubbard, también es posible describir cristales alternantes ( $\text{TiO}_2$  alternado con iones de  $\text{Li}$ ), donde los iones actúan como partículas bosónicas y los electrones como fermiones [135]. Uno de los modelos usados en la descripción de la física de los superconductores de alta temperatura, son las mezclas entre fermiones con espín polarizado y bosones sin espín en dos y tres dimensiones, considerando que  $\rho_F = 1/2$  y que únicamente se tiene un bosón por sitio. Este tipo de sistemas se han estudiado tanto analítica (aproximación de campo medio) como numéricamente obteniendo como resultado apareamiento superconductor de onda  $s, p$  y  $d$ , fase de onda de densidad de carga, ordenamiento antiferromagnético, fase supersólida y transiciones de fase desde el estado superfluido al estado aislante [62, 134, 136, 137, 138, 139, 140].

Las diferentes fases cuánticas que se pueden presentar en una mezcla Bose-Fermi, dependen del carácter de la interacción entre las especies, el tipo de llenado y la clase de confinamiento. Debido a la complejidad del problema, se han considerado modelos en los que tanto los bosones como los fermiones no tienen espín y sistemas conformados por fermiones con 2 grados de libertad internos interactuando con bosones sin espín.

El interés en el estudio de los gases cuánticos en una dimensión (1D), ha despertado el interés de los investigadores, debido a los progresos en las técnicas experimentales para atrapar, enfriar y manipular isótopos tanto bosónicos como fermiónicos [55, 141].

### 3.4.1. Mezclas Bose-Fermi sin espín

Uno de los modelos más sencillos en el estudio de las mezclas Bose-Fermi, consiste en considerar que las partículas constituyentes no tienen espín. Este modelo se ha estudiado ampliamente por medio de métodos tanto analíticos como numéricos y puede ser descrito por medio del modelo Bose-Fermi-Hubbard. Para este caso particular, debido a que sólo se puede tener un fermión por sitio, no se considera el término de interacción entre fermiones en el Hamiltoniano de la ecuación (22)

$$\hat{H}_{BF} = -t_B \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U_{BB}}{2} \sum_i \hat{n}_i^B (\hat{n}_i^B - 1) - t_F \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_j + U_{BF} \sum_i \hat{n}_i^B \hat{n}_i^F. \quad (23)$$

Estos sistemas han sido objeto de amplios estudios tanto teóricos como experimentales, presentando un diagrama de fases enormemente rico con tipos novedosos de fases cuánticas. Experimentalmente se han confinado átomos fermiónicos de  $^{40}\text{K}$  e isótopos bosónicos de  $^{87}\text{Rb}$  en una red óptica tridimensional. Los resultados de este experimento indicaron que debido a los fermiones, los átomos bosónicos se localizan en la red [33] como se ilustra en la figura 14. Allí se presentan los tiempos de vuelo <sup>12</sup> de los patrones de interferencia para tres potenciales de confinamiento diferentes de un sistema compuesto solo por bosones y los patrones de interferencia de una mezcla Bose-Fermi. En esta figura también se observa la transición de fase desde el estado aislante de Mott al estado superfluido reportado en otros artículos [37, 59].

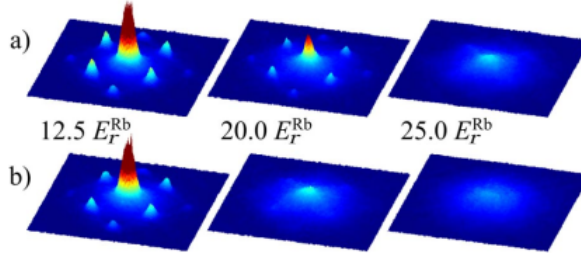


Figura 14: Imágenes de absorción de los tiempo de vuelo de una mezcla Bose-Fermi. a) Sistema bosónico puro para tres potenciales de confinamiento diferentes. b) Mezcla Bose-Fermi para los mismos potenciales del sistema a). Figura tomada de [33].

Los estudios teóricos de este sistema se han realizado por medio de diferentes aproximaciones, dentro de las que se encuentran: simulación de Monte Carlo cuántico [39, 52, 53, 54], bosonización [56], ansatz de Bethe [57], teoría del funcional densidad [58], entre otras. Estas aproximaciones han permitido estudiar las fases del estado base en redes ópticas y se ha encontrado que la fase aislante de Mott surge cuando la densidad total del sistema es conmensurable con la red <sup>13</sup>. También se han estudiado fenómenos interesantes como las densidades de on-

<sup>12</sup>La técnica experimental conocida como tiempo de vuelo, consiste en medir la posición de los átomos después de un periodo de expansión libre. Los átomos se liberan del potencial de confinamiento en  $t = 0$  y la densidad de la nube en expansión se captura en imágenes en un momento posterior.

<sup>13</sup>Un sistema es conmensurable, cuando la razón entre el número total de partículas y el número de sitios de la red, da como resultado un valor entero.



### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

da de carga y de espín que se deben a las diferentes interacciones entre los átomos y se ha encontrado que la superfluidez de los fermiones se debe al acoplamiento de onda s.

En una dimensión el diagrama de fases del estado fundamental, se ha estudiado mediante diferentes aproximaciones como: ansatz de Gutzwiller [29], aproximación de campo medio [61] y aproximación de Montecarlo Cuántico [41, 52, 67, 68]. Dentro de las fases encontradas mediante estas aproximaciones se encuentran: fases superfluidas, líquido de Fermi, fases cuánticas que involucran fermiones compuestos que dependiendo del tipo de interacción bosón-fermion se pueden conformar por un fermión y uno o más bosones [61], transiciones de fase que llevan al sistema desde estados donde las dos componentes se encuentran bien mezcladas a estados donde cada una de las componentes se mantiene lo suficientemente alejada de la otra (separación de fases), fases aislantes de Mott, onda de densidad de carga [66] y onda de densidad de espín.

El diagrama de fases para el estado fundamental fue obtenido por Pollet *et al.* usando la aproximación de Monte Carlo cuántico y considerando un ensamble canónico. En esta investigación se encontró para el caso de igual hopping ( $t_F = t_B$ ) separación de fases, fase de líquido de Luttinger y una fase de apareamiento entre pares de partículas de diferente especie [41, 68].

Posteriormente usando parámetros diferentes a los considerados por Pollet, se determinó el diagrama de fases del estado base para una mezcla Bose-Fermi confinada en una red óptica unidimensional, por medio de la simulación de Monte Carlo cuántico [39, 52, 53, 54, 67] y encontraron que las fases aislantes y superfluidas dependían del llenado del sistema, al igual que del tipo de interacción bosón-fermión y bosón-bosón. Uno de los resultados de este trabajo, es el diagrama de fases de la figura 15, que se obtuvo al encontrar la densidad de partículas bosónicas  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu_B$ , cuando la energía de tunelamiento de ambas especies era cero ( $t_B = t_F = 0$ ), manteniendo constante el potencial de interacción entre bosones  $U_{BB}$  y la densidad de partículas fermiónicas  $\rho_F$ .

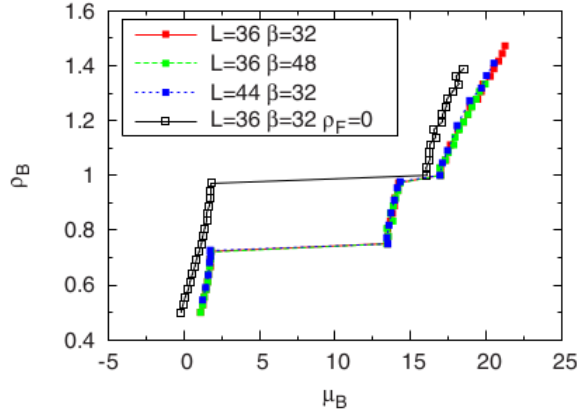


Figura 15: Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu_B$  manteniendo constante la densidad de fermiones  $\rho_F = 1/4$ , la interacción entre bosones  $U_{BB} = 10$  y el acoplamiento bosón-fermión  $U_{BF} = 16$ . Las posiciones de los lóbulos aislantes coinciden para diferentes tamaños de red  $L$  y temperaturas  $\beta = 1/T$ . Figura tomada de [39].

### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

En la figura 15 se observa la aparición de una fase aislante con compresibilidad  $\kappa = 0$  cuando la densidad de bosones es  $\rho_B = 3/4$  y la densidad fermiónica es  $\rho_F = 1/4$ . Esto indica la aparición de la fase aislante de Mott mezclada, cuando la densidad total del sistema es conmesurable con la red

$$\rho_B + \rho_F = 1 \quad (24)$$

En la expresión anterior  $\rho_F$  se definió en la ecuación (17) y  $\rho_B$  se define como

$$\rho_B = \frac{N_B}{L}, \quad (25)$$

donde  $N_B$  es el número total de bosones y  $L$  es el número de sitios en la red.

El diagrama de fases en el plano  $\mu_B - U_{BF}$ , muestra como el potencial químico es función del parámetro de interacción entre partículas de diferente especie  $U_{BF}$ , manteniendo tanto la densidad de fermiones como la interacción entre bosones constante. Para  $U_{BF}$  pequeños el ancho del gap del aislante trivial  $\rho_B = 1$  es dominante, pero a medida que este parámetro aumenta, el gap va tendiendo a cero. Caso contrario ocurre con el gap que se genera para el aislante no trivial  $\rho_B = 3/4$ , con la diferencia de que este no crece de forma indeterminada; por el contrario alcanza un punto de saturación como se observa en la figura 16.

Una comparación entre la investigación realizada por Rigol y el estudio previo del grupo de Lewenstein, se hace en la figura 16, donde además del acuerdo cuantitativo en ambos estudios, es posible establecer algunas correspondencias que se dan en el intervalo  $0 \leq \mu \leq 20$ . En la tabla 3 se presenta la correspondencia entre ambos estudios.

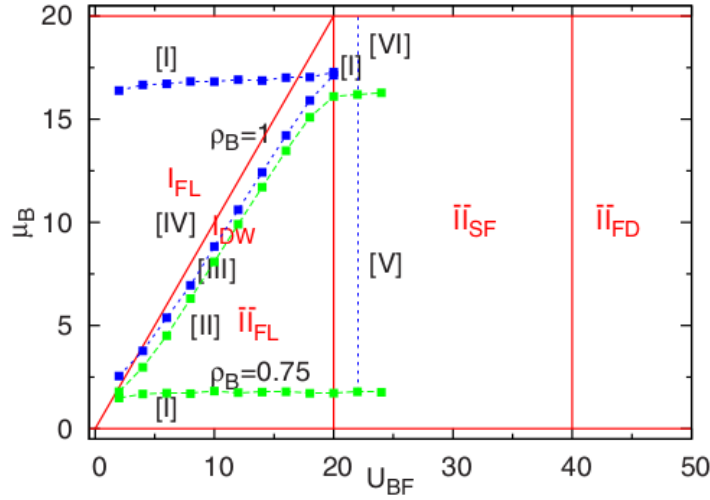


Figura 16: Comparación entre los diagramas de fases de Rigol [39] (símbolos con líneas punteadas) y los resultados obtenidos por Lewenstein [29] (Líneas continuas y símbolos romanos).

### 3. HAMILTONIANO BOSE-FERMI HUBBARD

---

Rigol [39]	Lewenstein [29]
Fase anticorrelacionada <i>II</i>	Líquido de Fermi formado por un fermión y un agujero bosónico $\bar{\Pi}_{FL}$
Fase de coexistencia entre el aislante de Mott y el líquido de Luttinger <i>IV</i>	Líquido de Fermi $I_{FL}$
Estado en que coexiste la fase anticorrelacionada con el estado superfluido <i>III</i>	Densidad de onda de carga $I_{DW}$
Fase aislante <i>V</i>	Fase de fermiones compuestos. Un fermión y un agujero bosónico $\bar{\Pi}_{FD}$

Cuadro 3: Comparación entre los resultados de Rigol y Lewenstein. En la figura 16 se observa que las tres primeras fases del cuadro ocurren aproximadamente para los mismos parámetros, además tienen cualidades similares. La última fase del cuadro (V), sugiere la formación de partículas compuestas.

A pesar de los esfuerzos por entender el comportamiento de las mezclas Bose-Fermi, aún se hace pertinente profundizar en modelos más complejos que involucren por ejemplo los grados de libertad internos de las especies. Es por ello que en los capítulos posteriores se investigarán las mezclas Bose-Fermi considerando que las partículas fermiónicas poseen espín 1/2 y que la mezcla se encuentra confinada en una red óptica unidimensional.

Debido a la alta complejidad de los modelos en los que se consideran los grados de libertad internos de las partículas constituyentes y a que los Hamiltonianos no tienen soluciones analíticas exactas, surge la necesidad de ir más allá de la aproximación de campo medio para comprender de forma adecuada las mezclas Bose-Fermi confinadas en una red óptica unidimensional. El estudio de estos sistemas se llevará a cabo por medio de la técnica numérica conocida como grupo de renormalización de la matriz densidad, (GRMD, por sus siglas en inglés DMRG), que es el método computacional más poderoso para el estudio del estado base de sistemas correlacionados unidimensionales. Esta técnica, será estudiada en el siguiente capítulo.

## 4

### Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG)

*Las mezclas Bose-Fermi confinadas en una red óptica unidimensional, en las cuales se considera que las partículas fermiónicas poseen espín 1/2 y que pueden interactuar tanto atractiva como repulsivamente con bosones polarizados, se podrían estudiar numéricamente por diagonalización exacta, al introducir en un computador el Hamiltoniano exacto para obtener los valores y vectores propios de interés. Sin embargo, el espacio de Hilbert del sistema crece exponencialmente con el número de sitios, por lo que solamente se podrían estudiar sistemas con muy pocos sitios. Por esta razón, vamos a considerar el método del grupo de renormalización de la matriz densidad para estudiar las mezclas entre bosones escalares y fermiones con espín.*

En 1992 White y Noack [70, 71, 143] estudiaron las limitaciones numéricas presentadas por los métodos de renormalización en el espacio real (RSRG), cuando se utilizan en el estudio de las propiedades a baja energía de sistemas cuánticos de muchos cuerpos. El estudio de White lo llevo a encontrar la manera de escoger mucho mejor los estados que determinan la física más relevante del sistema, tomando los estados con mayor peso estadístico dentro de la matriz densidad en lugar de tomar los  $m$  estados de menor energía del Hamiltoniano. Esta idea dio origen al algoritmo conocido como grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG por sus siglas en inglés). El formalismo del DMRG resulta ser una idea muy importante en física computacional, debido a que la dimensión del espacio de Hilbert de los sistemas cuánticos de muchos cuerpos crece exponencialmente con el tamaño del sistema, agotando rápidamente los recursos informáticos. Por ejemplo, un sistema conformado por partículas fermiónicas con dos grados de libertad internos y  $L$  sitios tiene un espacio de Hilbert con una dimension  $2^L$  [145].

El algoritmo del DMRG ha logrado una precisión sin precedentes en la descripción de los sistemas cuánticos unidimensionales [146] y consiste de dos secciones fundamentales: algoritmo de sistema infinito que tiene como objetivo hacer crecer el sistema al tamaño que se quiere estudiar, y algoritmo de sistema finito que reduce el error numérico basado en el principio variacional. En estos algoritmos se toma un sistema con  $L$  sitios conocido como superbloque el cual se divide en 4 bloques: Un bloque denominado bloque del sistema  $L^S$  que se expande por medio de los vectores base  $|i\rangle$ ,  $i = 1, \dots, l$  y que se representará como  $B_l$ , dos sitios intermedios representados cada uno por medio de  $\bullet$ , y el resto se denomina bloque del entorno  $E$  cuyos vectores base son  $|j\rangle$ ,  $j = 1, \dots, J$  y su representación es  $B_j^R$ . Con estas consideraciones la longitud total del superbloque es  $L = l + J + 2$  y para la construcción de la matriz densidad se representará como  $B_l \bullet \bullet B_j^R$ . Esta configuración se ilustra en la figura 17.

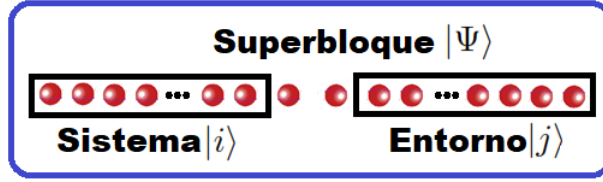


Figura 17: Configuración del superbloque. Los rectángulos negros representan al bloque sistema expandido por los vectores  $|i\rangle$  y al bloque entorno expandido por los vectores  $|j\rangle$ . Cada uno de los sitios del superbloque se representan por medio de puntos rojos.

Para introducir este concepto se usaran dos bloques en lugar de uno: un bloque izquierdo, A y un bloque derecho, B. El espacio de Hilbert del sistema  $A + B$  se expande por el producto tensorial  $\hat{H}_{A+B} = \hat{H}_A \otimes \hat{H}_B$  y su dimensión es  $D_{A+B} = D_A + D_B$ . De esta manera el estado general del sistema (superbloque) se describe por medio de la función de onda normalizada  $|\Psi\rangle$ .

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{i,j} |i\rangle |j\rangle, \quad (26)$$

donde la suma corre sobre todos los estados del bloque izquierdo  $|i\rangle$  y del bloque derecho  $|j\rangle$  con sus respectivos coeficientes  $\Psi_{i,j}$ .

En cada iteración se adiciona un sitio a la derecha del bloque izquierdo y un sitio a la izquierda del bloque derecho. De esta manera los dos bloques crecen de forma simultanea hasta que la base alcanza la dimensión  $m$  deseada. Cuando el sistema se encuentra en un estado puro, se describe por medio de la matriz densidad reducida de la física estadística

$$\hat{\rho} = Tr_E |\Psi\rangle \langle \Psi|, \quad (27)$$

donde  $Tr_E$  indica que se realiza la traza sobre los grados de libertad del entorno. Al realizar esta operación se obtiene que sus componentes vienen dados por

$$\rho_{i'i'} = \sum_j \Psi_{i,j}^* \Psi_{i',j}. \quad (28)$$

La matriz densidad  $\hat{\rho}$  tiene  $N^s$  vectores propios ortogonales  $\hat{\rho}|w_\alpha\rangle = w_\alpha|w_\alpha\rangle$  con sus respectivos valores propios  $w_\alpha \geq 0$ , en los que se considera la probabilidad de que el sistema se encuentre en un determinado estado  $|\alpha\rangle$ , por lo cual  $\sum_\alpha \omega_\alpha = 1$ .

Para truncar el espacio de Hilbert del estado del sistema, se organizan de mayor a menor los estados propios, es decir,  $w_1 \geq w_2 \geq w_3 \geq \dots$  y se retienen los  $M^s$  estados más probables, (estados con mayor peso estadístico) de la matriz densidad reducida 27.

La razón por la cual se consideran los estados con mayor peso estadístico  $M^s$ , se debe a que el valor esperado de cualquier observable  $\langle \hat{A} \rangle$ , que actúa sobre el sistema se expresa en términos de la matriz densidad reducida 27 y del estado general del superbloque 26, de la forma

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr(\hat{\rho} \hat{A}). \quad (29)$$

Al expresar el valor esperado en términos de los vectores propios de la matriz densidad  $|w_\alpha\rangle$  se obtiene:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{\alpha}^{N^s} w_\alpha \langle w_\alpha | \hat{A} | w_\alpha \rangle, \quad (30)$$

donde  $N^s$  son los valores propios. Esta última relación permite calcular el valor esperado del observable  $\hat{A}$  en términos de los vectores propios con mayor peso estadístico  $M^s$ , descartando aquellos estados  $|w_\alpha\rangle$  donde  $w_\alpha \approx 0$  sin que el error sea apreciable. Esta es la idea detrás del proceso de renormalización, con la cual se expresa el valor esperado aproximado del operador  $\hat{A}$  como

$$\langle \hat{A} \rangle_{aprox} \approx \sum_{\alpha}^{M^s} w_\alpha \langle w_\alpha | \hat{A} | w_\alpha \rangle. \quad (31)$$

El error que se produce en la renormalización del valor esperado del operador  $\hat{A}$  viene dado por

$$\epsilon_\rho = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M^s} \omega_\alpha, \quad (32)$$

donde  $M^s$  representa los estados retenidos con mayor peso  $w_\alpha$ . La ecuación (32) indica que entre mayor cantidad de valores  $w_\alpha$  se consideren, el error disminuye, siendo cero cuando se consideran todos los valores propios.

Para definir la matriz densidad del sistema a estudiar, se debe decidir la forma en la cual se construye el superbloque y el mecanismo que va a incrementar su tamaño. También es necesario considerar la manera en la cual se introducen los grados de libertad en el sistema, evitando el rápido crecimiento del espacio de Hilbert y conservando tanta información como se pueda en cada uno de los pasos. Una de las características más importantes del algoritmo del grupo de renormalización de la matriz densidad es la tasa de variación en la cual la precisión se incrementa con el número de estados  $m$ . La forma más eficiente de construir un superbloque se logra cuando se agrega un sitio al sistema y uno al entorno en cada iteración, teniendo presente que la representación más precisa del estado objetivo se da al conectar uno de los extremos del superbloque al resto de la cadena (condiciones de frontera abiertas). Si se conectan ambos extremos (condiciones de frontera periódicas) la representación es menos precisa.

En las condiciones de frontera abiertas, cada uno de los estados propios de la matriz densidad del bloque, representan la respuesta del bloque a las fluctuaciones cuánticas generadas en el resto de la cadena. Si el bloque del sistema se conecta por ambos extremos al resto de la cadena (condiciones de frontera periódicas), cada uno de los extremos deberá responder de forma independiente a las fluctuaciones cuánticas del entorno. De esta manera si se necesitan  $m$  estados para describir con precisión la unión del sistema por uno de sus extremos con el resto de la cadena, entonces, se necesitarán  $m^2$  cuando la unión se realiza por los dos extremos. Es necesario tener en cuenta que en el límite termodinámico las condiciones de frontera abiertas se comportan como condiciones de frontera cerradas debido a que usualmente el estudio se centra en el bulk del sistema. Un ejemplo se presenta en las cadenas de Heisenberg, donde la precisión relativa de la energía del estado base para un sistema con 28 sitios y partículas de espín  $S = 1/2$ , tiene un error de  $\epsilon_a = 10^{-10}$  para condiciones de frontera abiertas, y de  $\epsilon_p = 10^{-7}$  para condiciones de frontera periódicas [71].

Para utilizar el algoritmo DMRG en el modelo bajo consideración es necesario tener en cuenta que el sistema a estudiar es un sistema finito, que junto con la representación del superbloque por medio de la configuración  $B_l \bullet \bullet B_l^R$  y considerando que  $B' = B_{l+1} = B_l \bullet$  permiten construir la matriz densidad mediante dos diferentes métodos: método de sistema infinito y método de sistema finito.

#### 4.1. Método de sistema infinito

El algoritmo inicia considerando un sistema con 4 sitios  $B_1 \bullet \bullet B_1^R$  ( $B_1^R$  es el reflejo de  $B_1$  y el subíndice 1 indica que consiste de un solo sitio), cuyo Hamiltoniano se diagonaliza por medio del método de Lanczos [147] o Davidson [148] para encontrar los valores y vectores propios con los cuales se construye la matriz densidad reducida. Los estados  $m$  con mayor peso estadístico de la matriz densidad, se usan como vectores columna de la matriz de transformación  $O$ , que tiene por función proyectar cualquier operador  $A$  del bloque del sistema, en un nuevo operador  $\tilde{A}$  de tamaño  $m \times m$  por medio de la operación  $\tilde{A} = O^\dagger A O$  (en este punto se produce la renormalización del espacio de Hilbert). Posteriormente se crea el hamiltoniano para  $B_2 = B_1 \bullet$  y en la segunda iteración se diagonaliza el hamiltoniano de la configuración  $B_2 \bullet \bullet B_2^R$ . De esta manera se continua hasta alcanzar el tamaño deseado del superbloque  $B_l \bullet \bullet B_l^R$ . En cada iteración, el tamaño de la cadena se incrementa en dos sitios. La figura 18 muestra una representación esquemática para este algoritmo.

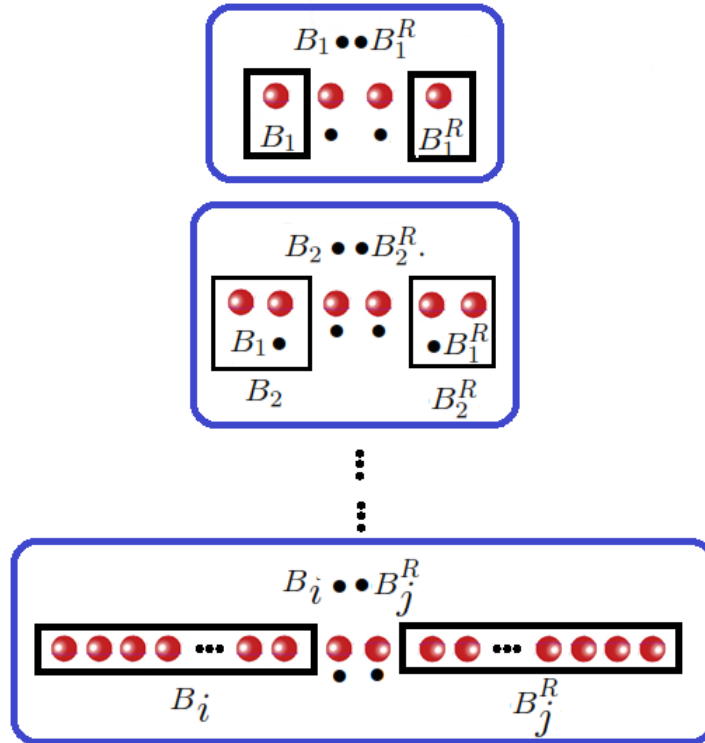


Figura 18: Ilustración esquemática del crecimiento del superbloque mediante el algoritmo del sistema infinito.

#### 4. GRUPO DE RENORMALIZACIÓN DE LA MATRIZ DENSIDAD (DMRG)

---

Este método se usa principalmente cuando se desea conocer las propiedades del estado base de una cadena infinita, lo cual se logra al considerar que en cada iteración, los extremos de los bloques se alejan del centro de la cadena y luego de muchos pasos cada bloque representa aproximadamente la mitad de la cadena infinita. Este algoritmo converge en dos sentidos de forma simultanea: en la longitud de  $B_l$  al infinito y el sentido que  $B_l$  está adaptado para responder a una cadena infinita conectada a él por la derecha. Este algoritmo se resume en el cuadro 4.

---

---

1	Iniciar con un sistema conformado por cuatro sitios y definir las matrices en cada uno de los sitios que representa al hamiltoniano y los operadores relevantes. Dos sitios conforman el bloque sistema y dos el bloque entorno.
2	Por medio del producto directo entre las matrices de cada sitio se construye el hamiltoniano del superbloque.
3	Por medio de algoritmos como Lanczos o Davidson se diagonaliza el hamiltoniano del superbloque para obtener el estado objetivo (por lo general el estado base) y los valores esperados de los operadores relevantes.
4	Construir la matriz densidad reducida $\rho$ con los estados propios del punto 3.
5	Determinar mediante diagonalización exacta los vectores propios de la matriz densidad $\rho$ del punto 4 y organizarlos de mayor a menor valor propio $w_\alpha$ , manteniendo los estados de mayor peso estadístico.
6	Hallar la representación matricial de los operadores relevantes $O$ , para el bloque sistema (constituido por dos sitios), mediante producto directo entre los operadores de cada uno de los sitios
7	Construir la matriz de transformación $A$ usando los vectores propios seleccionados del punto 5 como vectores columna.
8	Usar los operadores $O$ del punto 6 para construir los operadores truncados $\tilde{O}$ por medio de la operación $\tilde{O} = A^\dagger O A$ . Los operadores $\tilde{O}$ van a actuar sobre el nuevo bloque 1.
9	El antiguo bloque 1 se guarda y se reemplaza con el bloque del punto 8.
10	El antiguo bloque 2 se guarda y se reemplaza con la reflexión del bloque del punto 8
11	Iniciar de nuevo en el paso 2.

---

---

Cuadro 4: Algoritmo de sistema infinito para un sistema cuántico unidimensional [71, 146].

Debido a que las dimensiones del superbloque aumentan, se presenta el inconveniente de que en cada paso los estados objetivos son diferentes. Este aumento puede provocar una convergencia lenta debido al cambio cualitativo en sus funciones de onda. Por lo tanto, es necesario implementar un método que garantice la convergencia de las funciones de onda para calcular las propiedades de un sistema de tamaño definido  $N$ . El método que garantiza la convergencia, es el método de sistema finito.



### 4.2. Método de sistema finito

Mediante este algoritmo es posible calcular con gran precisión las propiedades de un sistema de tamaño finito  $L$ , considerando que el bloque entorno es un baño estadístico en el cual se encuentra inmerso el bloque sistema. El método se basa en dejar siempre un mismo tamaño  $L$  para el superbloque y variar de forma iterativa los tamaños tanto del sistema como del ambiente. Para este caso, el ambiente no es una reflexión del sistema.

Inicialmente se construye un superbloque de tamaño  $L$  usando el algoritmo para sistema infinito y guardando los operadores que se usan en cada iteración. El superbloque se divide en cuatro bloques para formar los bloques sistema y entorno. El bloque sistema se compone por un bloque de tamaño  $l = (L/2) - 1$  y un bloque en el que se considera un solo sitio y se representará mediante  $B_l \bullet$ , el bloque entorno se compone por un bloque con un solo sitio y un bloque de tamaño  $l' = (L/2) - 1$  y su representación será  $\bullet B_{l'}^R$ . De esta manera el superbloque se puede expresar como  $B_l \bullet \bullet B_{l'}^R$ , donde se cumple que  $l + l' + 2 = L$ .

En la siguiente iteración  $B_l \bullet \bullet B_{l'}^R$  se usa para construir un nuevo bloque del sistema con un tamaño  $l + 1 = L/2$ , removiendo un sitio del bloque entorno  $l' - 1 = (L/2) - 1 - 1$  para mantener constante el tamaño  $L$  del superbloque  $B_{l+1} \bullet \bullet B_{l'-1}^R$ . En la siguiente iteración se usa la expresión anterior para construir un nuevo bloque sistema con tamaño  $l + 2 = L/2 + 1$ , removiendo nuevamente un sitio del bloque entorno  $l' - 2 = (L/2) - 1 - 2$  y construir el superbloque  $B_{l+2} \bullet \bullet B_{l'-2}^R$ . En cada paso del algoritmo se aumenta el tamaño del sistema hasta que  $l'$  sea el mínimo posible ( $l' = 1$  lo cual corresponde a  $l = L - 3$ ). Esta secuencia de pasos del algoritmo de sistema finito, es un barrido de izquierda a derecha, como se muestra en la figura 19.

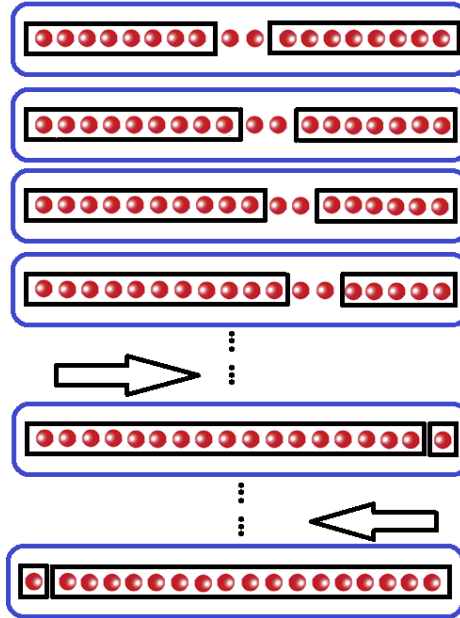


Figura 19: Representación esquemática del algoritmo de sistema finito. En este esquema se inicia el barrido de izquierda a derecha y luego de la mitad del algoritmo se barre de derecha a izquierda.

El mismo procedimiento se ejecuta pero de derecha a izquierda, intercambiando los roles de los bloques sistema y entorno. La variación del tamaño de los bloques se realiza hasta que solo quede un sitio en el bloque sistema ( $l = 1$  lo cual corresponde a  $l' = L - 3$ ). Este proceso se repite hasta cuando el tamaño del bloque sistema sea igual al tamaño del bloque entorno. El proceso se explica en detalle en el recuadro 4

1	Construir el superbloque de tamaño $L$ por medio del algoritmo de sistema infinito.
2	Dividir el superbloque del punto anterior en 4 bloques y considerar el bloque uno de tamaño $l = L/2$ y el bloque 4 de tamaño $l' = L - l - 2$ . Con esta operación el tamaño de los dos bloques (sistema-entorno) es diferente y se mantiene constante el tamaño del superbloque
3	Construir el bloque $B_{l+1}$ con los pasos 2-9 del cuadro 4.
4	Reemplazar el bloque 4 con la reflexión de $B_{l'}$ del punto 2.
5	Si $l < L - 3$ incrementar el tamaño del sistema haciendo $l = l + 1$ .
6	Repetir los pasos 3 a 5 hasta que $l = L - 3$ . Hasta aquí es la iteración izquierda-derecha.
7	A partir del superbloque del punto 6 tomar cuatro bloques: tres compuestos por un único sitio $l = 1$ y el cuarto bloque con un tamaño $l' = L - 3$
8	Construir el bloque $B_{l+1}$ con los pasos 2-9 del cuadro 4.
9	Guardar el nuevo bloque $B_{l+1}$ para el espacio 1, reemplazando el antiguo $B_{l+1}$
10	Reemplazar el bloque 4 con la reflexión de $B_{L-(l+1)-2}$ .
11	Si $l < L - 3$ incrementar el tamaño del sistema haciendo $l = l + 1$ y volver al paso 8. Si $l = L - 3$ inicie una nueva iteración desde el paso 7.
12	Repetir el proceso varias veces, y parar cuando la configuración sea simétrica.

Cuadro 5: Algoritmo de sistema finito para un sistema cuántico unidimensional de  $L$  sitios [71, 146]. Cada cálculo se encuentra constituido por varias iteraciones y cada iteración consta de  $L - 3$  pasos.

### 4.3. Transformación de función de onda

Como ya se mencionó anteriormente, la convergencia iterativa al estado base del hamiltoniano se obtiene en cada uno de los pasos del barrido por medio de alguna rutina de diagonalización (Lanczos o Davidson). El número de iteraciones depende de la precisión deseada y en cada iteración se aplica el Hamiltoniano a un nuevo estado, hasta alcanzar la convergencia deseada. Este proceso se agiliza al transformar el estado base del paso previo en el barrido a una nueva base, para usarlo como punto de inicio en la diagonalización.

Considerando que el estado base del Hamiltoniano, antes del cambio de base es:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}} \langle \alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3} | \Psi \rangle | \alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3} \rangle. \quad (33)$$

Una vez se efectua el cambio de base, se adiciona un sitio al sistema y un sitio al ambiente

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_{i+1}, s_{i+2}, s_{i+3}, \beta_{i+4}} \langle \alpha_{i+1} s_{i+2} s_{i+3} \beta_{i+4} | \Psi \rangle | \alpha_{i+1} s_{i+2} s_{i+3} \beta_{i+4} \rangle. \quad (34)$$

Considerando  $\sum_{\alpha_i} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \approx \sum_{\beta_i} |\beta_i\rangle\langle\beta_i| \approx 1$  se obtiene

$$\langle\alpha_{i+1}s_{i+2}s_{i+3}\beta_{i+4}|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_i, s_{i+1}\beta_{i+3}} (U_E^\dagger)_{\alpha_{i+1}, \alpha_i s_{i+1}} (U_S)_{s_{i+3}\beta_{i+4}, \beta_{i+3}} \langle\alpha_i s_{i+1} s_{i+2} \beta_{i+3}|\Psi\rangle. \quad (35)$$

Esta operación disminuye el costo computacional, al reducir el cálculo del estado fundamental a solo unas pocas iteraciones de Lanczos o Davidson.

#### 4.4. Ajuste dinámico del número de estados de bloque

El algoritmo DMRG estándar considerar un mismo número de estados  $m$  en cada operación de truncamiento, pero para tener control en la precisión del algoritmo desde el comienzo del proceso, se debe seleccionar de manera eficiente el número de estados del superbloque, manteniendo los estados propios de la matriz densidad con un peso estadístico mayor que un parámetro  $\epsilon$  fijado durante el procedimiento de renormalización. El error máximo de truncamiento  $\varepsilon_{Tmax}$  se fija desde el inicio del algoritmo y puede ser igual al parámetro  $\epsilon$  o mayor si se minimizan las contribuciones de los estados que no se consideran. Para evitar este problema, el parámetro  $\epsilon$  se ajusta dinámicamente aumentando el número de estados, cuando la contribución de los estados no considerados sea mayor que  $\varepsilon_{Tmax}$ .

La implementación en el DMRG se lleva a cabo al aumentar el número de estados seleccionados  $m$  cuando  $\sum_{\alpha}^m w_{\alpha} = 1 - \epsilon < 1 - \varepsilon_{Tmax}$ . De esta manera, se tiene control sobre el error de truncamiento y se considera un número preciso de estados propios de la matriz densidad, evitando tener más estados de los necesarios, lo que podría hacer que el tiempo de cálculo se incremente, o menos estados, lo que podría generar resultados con errores muy grandes.

Una de las ventajas del método de ajuste dinámico del número de estados de bloque, consiste en que el número de estados requeridos para lograr una determinada precisión, es mayor cerca de la configuración simétrica y en los pasos restantes, el error de truncamiento se alcanza con un número pequeño de estados, con lo cual la eficiencia en el paso de renormalización se maximiza. Esto da la posibilidad de tomar diferentes valores de  $\varepsilon_{Tmax}$  en cada barrido, haciendo más eficiente el cálculo [72].

#### 4.5. Simetrías

Otra de las ventajas del DMRG, consiste en que este algoritmo permite considerar una gran variedad de simetrías, que son de ayuda para reducir el tiempo de cómputo y el almacenamiento en mucho más que un orden de magnitud. Además el espacio de Hilbert también se reduce y se descompone en una suma de sectores. Las simetrías que se implementan con mayor frecuencia son las simetrías que permiten que tanto la magnetización total  $\hat{S}_{total}^z$  y el número total de partículas  $\hat{n}$ , tengan un conjunto común de funciones propias y sus valores propios sean buenos números cuánticos. Si estas simetrías se encuentran presentes en el Hamiltoniano, todos los operadores se pueden expresar en forma matricial como un conjunto de bloques (sectores) que se distribuyen a lo largo de la diagonal con elementos distintos de cero y que se

preserva siempre y cuando se mantenga fija la magnetización total y el número de partículas. Por ejemplo, para una cadena de  $N$  espines  $1/2$  donde  $[\hat{S}_{total}^z, \hat{H}] = 0$ , el Hamiltoniano se puede expresar como:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -N/2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -N/2 + 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & N/2 - 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & N/2 \end{pmatrix} \quad (36)$$

Para el caso que se esta trabajando, el Hamiltoniano de la ecuación (22) conserva el número total de partículas

$$\left[ \sum_i \hat{n}_i, \hat{H}_{BF} \right] = 0 \quad (37)$$

y además conserva tanto la componente en  $z$  del espín  $S_{total}^z$  como el espín total  $S^2$

$$\left[ \sum_i \hat{S}_{total,i}^z, \hat{H}_{BF} \right] = 0, \quad (38)$$

$$\left[ \hat{S}^2, \hat{H}_{BF} \right] = 0. \quad (39)$$

Por lo tanto la base con la que se trabaja, será bien definida como  $|\hat{n}, \hat{S}^2, \hat{S}_z\rangle$ .

#### 4.6. Valores esperados

El valor esperado del operador local  $A_l$  del sitio  $l$ , se calcula por medio de la matrix densidad, usando la función de onda del superbloque 26

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{i,i'=1}^{DimS} \sum_{j=1}^{DimE} \Psi_{ij}^* [\hat{A}]_{i,i'} \Psi_{i',j}, \quad (40)$$

donde  $DimE$  es la dimensión del bloque entorno y  $DimS$  es la dimensión del sistema. En el código se agrega el sitio  $l$  en el último barrido y se guarda el operador  $A_l$ , para en el último paso calcular  $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ . Es por esta razón que se debe ser cuidadoso al evaluar cada uno de los operadores locales con su respectivo espacio de Hilbert al aumentar el número de sitios.

El calculo de la función de correlación del operador  $\hat{A}$  entre los sitios  $l$  y  $m$  depende de si ambos sitios están en el mismo bloque (sistema o entorno) o en bloques diferentes. En el primer caso se realiza el producto  $\hat{A}_l \hat{A}_m$  tan pronto como se pueda definir en el último barrido del método del sistema finito, y para actualizarlo en cada paso del barrido. De esta forma  $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$  se calcula cuando el entorno es igual al sistema

$$\langle \Psi | \hat{A}_l \hat{A}_m | \Psi \rangle = \sum_{i,i',j} \Psi_{ij}^* [\hat{A}_l \hat{A}_m]_{i,i'} \Psi_{i',j}. \quad (41)$$

#### 4. GRUPO DE RENORMALIZACIÓN DE LA MATRIZ DENSIDAD (DMRG)

---

Si ambos sitios pertenecen a diferentes bloques, el proceso anterior deja de ser válido, debido a que los operadores pertenecen a diferentes espacios de Hilbert, por lo cual los operadores se calculan por separado y la función de correlación se calcula por medio de:

$$\langle \Psi | \hat{A}_l \hat{A}_m | \Psi \rangle = \sum_{i,i',j,j'} \Psi_{ij}^* [\hat{A}_l]_{ii'} [\hat{A}_m]_{j,j'} \Psi_{i',j'}. \quad (42)$$

## 5

### FERMIONES CON ESPÍN $S = 1/2$ Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

*Los estudios teóricos en los cuales se consideran mezclas entre bosones y fermiones sin espín, indican la aparición de un estado aislante de Mott que surge cuando la densidad total de partículas en el sistema es conmesurado con la red [39]. Para la misma relación de conmesurabilidad, se reportó experimentalmente el surgimiento de un estado aislante de Mott mezclado en un sistema conformado por isotopos bosonicos de  $^{174}\text{Yb}$  ( $s = 0$ ) interactuando repulsivamente con isotopos fermionicos de  $^{173}\text{Yb}$  ( $s = 5/2$ ) [21]. Por esta razón vale la pena preguntarse ¿Qué sucede con las fases aislantes y la relación de conmesurabilidad, cuando se considera un sistema en el que los bosones se encuentran polarizados y los fermiones tienen dos grados de libertad internos?*

El modelo descrito en el capítulo 3, es desde el punto de vista teórico, la aproximación más sencilla que permite describir las mezclas entre bosones y fermiones. Este tipo de sistemas se ha estudiado por medio del Hamiltoniano Bose-Fermi-Hubbard sin considerar los grados de libertad internos de las partículas constituyentes.

Un modelo un poco más complejo consiste en considerar fermiones con espín  $1/2$  y bosones sin espín. Experimentalmente este modelo se ha realizado usando gases cuánticos degenerados de  $^{174}\text{Yb}$ – $^{173}\text{Yb}$  e  $^{174}\text{Yb}$ – $^{171}\text{Yb}$ . El  $^{174}\text{Yb}$  es un isótopo bosónico con espín nuclear cero, y el  $^{173}\text{Yb}$  y  $^{171}\text{Yb}$  son isótopos fermiónicos con espín nuclear  $I = 5/2$  (seis grados de libertad internos) y  $I = 1/2$  (dos grados de libertad internos) respectivamente [16]. También se han realizado mezclas de aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos confinados en una red tridimensional, manteniendo fijo el número de bosones y variando la densidad de fermiones para medir la doble ocupación bosón-bosón ( $D_B$ ), fermión-fermión ( $D_F$ ) y bosón-fermión ( $D_{BF}$ )[21] como se ilustra en la figura 20. También se encontró que el sistema se caracteriza mediante dos fases que dependen del número de fermiones con los cuales se configura el sistema y que para el caso repulsivo son: fase I, donde el número de total de partículas es conmesurable con la red ( $\rho_B + \rho_F = \rho$ , donde  $\rho$  es entero) pero individualmente son inconmensurables ( $\rho_B$  y  $\rho_F$  no son enteros). Los resultados experimentales para esta fase indican que  $D_B \approx D_F \approx D_{BF} \approx 0$ ; fase II, separación de fases. En esta fase  $D_{BF} \approx 0$ , mientras ocurre un crecimiento en  $D_B$  como se observa en el panel inferior y superior de la figura 20a respectivamente.

A diferencia del caso repulsivo, en el caso atractivo se observa un aumento en la doble ocupación bosón-fermión (panel inferior de la figura 20b), lo que da origen a tres nuevas fases: fase I, partículas tipo A compuestas por dos bosones y un fermión. Esta fase se caracteriza por un rápido crecimiento tanto de  $D_B$  como de  $D_{BF}$  como se observa en el panel inferior y superior de la figura 20b respectivamente; fase II, se crean dos partículas tipo B conformadas por un bosón y un fermión. Este comportamiento se debe a que únicamente se tiene un fermión por sitio, se presenta una disminución en  $D_B$  y un aumento en  $D_{BF}$ ; fase III partículas tipo C

## 5. FERMIONES CON ESPÍN $S = 1/2$ Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

conformadas por dos bosones y dos fermiones. Este comportamiento se debe principalmente al mayor número de fermiones y al confinamiento armónico que propicia un aumento en  $D_F$  y  $D_B$  en el centro de la trampa como se observa en el panel del centro y superior de la figura 20b respectivamente.

Motivados por estos estudios, se investigará el estado base de un sistema que nos permita abordar con cierto grado de complejidad las mezclas Bose-Fermi. Es por ello que se procederá a explorar un sistema constituido por fermiones con 2 grados de libertad internos que interactúan de forma repulsiva con bosones en el límite “hard-core”. La interacción entre los fermiones se considera de tipo repulsivo y en todo el sistema se encuentra confinado en una red óptica unidimensional. La energía del estado base del sistema se calcula por medio del grupo de renormalización de la matriz densidad, considerando condiciones de frontera abiertas.

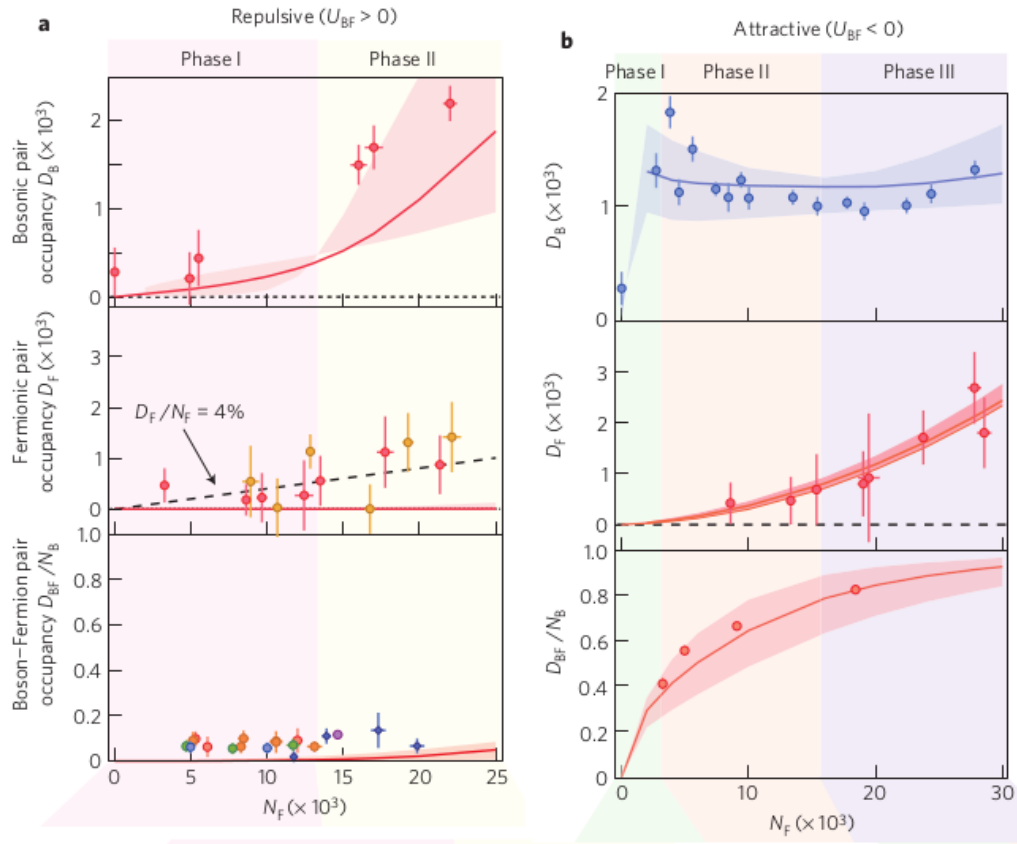


Figura 20: Medidas de las distribuciones de ocupación como función del número de átomos fermiónicos  $N_F$ : **a** Medición de la doble ocupación para interacción repulsiva. Panel superior, doble ocupación bosónica  $D_B$  (círculos rojos). Panel del medio, doble ocupación fermiónica  $D_F$  (círculos rojos). Panel inferior ocupación de parejas Bose-Fermi  $D_{BF}$  para  $N_B = 6 \times 10^3$  (círculos rojos),  $N_B = 8.5 \times 10^3$  (círculos naranjas),  $N_B = 13 \times 10^3$  (círculos verdes),  $N_B = 15 \times 10^3$  (círculos azules) y  $N_B = 20 \times 10^3$  (círculos morados). **b** Medición de la doble ocupación para el caso de interacción atractiva. Panel superior doble ocupación bosónica (círculos azules). Panel medio doble ocupación fermiónica (círculos rojos) panel inferior Ocupación de parejas Bose-Fermi (círculos rojos). Las líneas sólidas corresponden a simulaciones numéricas y las regiones sombreadas corresponden a resultados numéricos con diferentes temperaturas iniciales  $\pm 5nK$ . Figura tomada de [21].

5. FERMIONES CON ESPÍN  $S = 1/2$  Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

---

Para estudiar teóricamente este sistema considerando la temperatura  $T = 0$ , se usará el modelo Bose-Fermi Hubbard (ecuación (22)), sin considerar el término correspondiente al potencial de confinamiento externo, ni el término de interacción entre partículas bosónicas, debido a que se está trabajando en el límite “hard-core”, donde se considera máximo una partícula bosónica por sitio como se observa esquemáticamente en la figura 21.

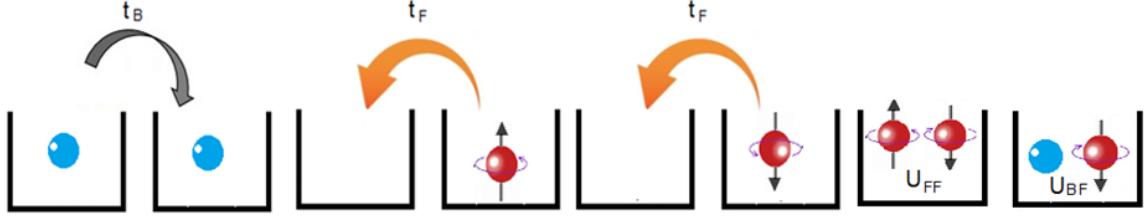


Figura 21: Representación esquemática del modelo Bose-Fermi Hubbard en el límite hard-core. Los círculos azules representan a los bosones sin espín y los círculos rojos representan a los fermiones con espín  $1/2$ .

Con estas consideraciones el Hamiltoniano para el sistema en cuestión es

$$\hat{H}_{BF} = -t_B \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.) - t_F \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (\hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} + h.c.) + \frac{U_{FF}}{2} \sum_{i,\sigma \neq \sigma'} \hat{n}_{i,\sigma}^F \hat{n}_{i,\sigma'}^F + U_{BF} \sum_i \hat{n}_i^B \hat{n}_i^F. \quad (43)$$

Para investigar este modelo se considera que la densidad de partículas bosónicas (fermiónicas) se define como

$$\rho_{B(F)} = \frac{N_{B(F)}}{L} \quad (44)$$

donde  $N_{B(F)}$  es el número de partículas bosónicas (fermiónicas) en el sistema de  $L$  sitios. La base del espacio de Hilbert bosónico  $\mathcal{H}_B$  en cada uno de los sitios de la red, se forma con los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , con una densidad que se encuentra en el intervalo  $0 \leq \rho_B \leq 1$ . Para el caso fermiónico se consideran dos grados de libertad internos, con los estados  $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  y  $|\uparrow\downarrow\rangle$  que forman una base para el espacio de Hilbert correspondiente  $\mathcal{H}_F$ . La densidad de partículas para este caso se encuentra en el intervalo  $0 \leq \rho_F \leq 2$ , por lo cual,  $\rho_F = 1$  corresponde a medio llenado fermiónico.

Con los espacios de Hilbert bosónicos y fermiónicos, se obtiene el espacio de Hilbert local para el sistema bosón-fermión, por medio del producto tensorial  $\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_F$ . Los estados base para este espacio son:



5. FERMIONES CON ESPÍN  $S = 1/2$  Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

---

$N^B$	$N_{\uparrow}^F$	$N_{\downarrow}^F$	Estado
0	0	0	$ 0, 0\rangle$
0	$\uparrow$	0	$ 0, \uparrow\rangle$
0	0	$\downarrow$	$ 0, \downarrow\rangle$
0	$\uparrow$	$\downarrow$	$ 0, \uparrow\downarrow\rangle$
1	0	0	$ 1, 0\rangle$
1	$\uparrow$	0	$ 1, \uparrow\rangle$
1	0	$\downarrow$	$ 1, \downarrow\rangle$
1	$\uparrow$	$\downarrow$	$ 1, \uparrow\downarrow\rangle$

Cuadro 6: Espacio de Hilbert local para un sistema conformado por fermiones con dos grados de libertad internos y bosones sin espín en el límite hard-core  $\dim(\mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_F) = 8$ .

La escala de energía se fija tomando  $t_F = 1$  y se considera una amplia gama de densidades bosónicas y fermiónicas. Una ilustración esquemática del estado base del sistema se presenta en la figura 22 para una red con ocho sitios.

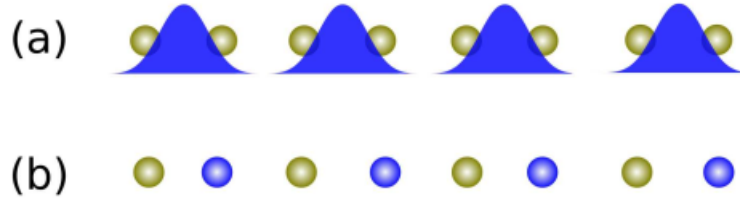


Figura 22: Ilustración esquemática de los estados base de una mezcla de fermiones con dos grados de libertad (verde) interactuando con bosones en el límite “hard-core” (azul) y confinados en una dimensión. En la ilustración se considera una red con ocho sitios ( $L=8$ ) y dos diferentes estados base. (a) Estado aislante con una densidad fermiónica  $\rho_F = 1$  y densidad bosónica  $\rho_B = 1/2$ . (b) Estado aislante de Mott mezclado con  $\rho_F = 1/2$  y  $\rho_B = 1/2$ .

### 5.1. Medio llenado fermiónico $\rho_F = 1$

Debido al importante rol de los efectos de la interacción en los sistemas constituidos tanto por bosones como por fermiones, es de esperarse que ocurran cambios drásticos en los comportamientos físicos individuales de cada especie, cuando éstas interactúan y se confinan en una misma red. Es así como por ejemplo, si la densidad de partículas bosónicas se hace cero ( $\rho_B = 0$ ) en el Hamiltoniano de la ecuación (43) y la densidad de fermiones en el sistema es  $\rho_F = 1$ , se obtiene un estado aislante de Mott con ordenamiento de tipo antiferromagnético para interacciones entre fermiones diferente de cero y de tipo repulsivo  $U_{FF} > 0$ . Pero, ¿Qué sucede con este sistema si se adicionan bosones y se mantiene constante tanto la interacción entre fermiones  $U_{FF}$  como la interacción bosón-fermión  $U_{BF}$ ?

Para dar respuesta a esta pregunta, se estudia el comportamiento de la densidad bosónica como función del potencial químico. Para ello se fija el número de partículas fermiónicas  $\rho_F$ ,

5. FERMIONES CON ESPÍN  $S = 1/2$  Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

---

la interacción  $U_{FF}$ , la interacción entre partículas de diferente especie  $U_{BF}$  y se van agregando bosones al sistema. Primero se encuentra la energía para el sistema fijando la densidad de fermiones y considerando que la densidad de bosones es cero, lo que corresponde al estado  $|N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 0\rangle$ . Luego se añade un bosón y se calcula la energía  $E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 1)$  de este nuevo estado dejando los demás parámetros fijos. Operando de esta forma, y desarrollando en cada iteración el proceso descrito, se llega hasta el estado con la densidad bosónica deseada. Con la diferencia entre la energía del estado  $|N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, N_B + 1\rangle$  y el estado  $|N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, N_B\rangle$  se calcula la energía de excitación de partícula  $\mu^B$ , como se ilustra en el cuadro 7.

$N_B$	$\rho_B = \frac{N_B}{L}$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, N_B)$	Energía de excitación de partícula $\mu^B$
0	$0/L$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 0)$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 1) - E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 0)$
1	$1/L$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 1)$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 2) - E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, 1)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$N_B$	$\frac{N_B}{L}$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, N_B)$	$E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, N_B + 1) - E(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, N_B)$

Cuadro 7: Energía de excitación de partícula bosónica  $\mu^B$ , en una mezcla de bosones escalares y fermiones con espín  $s = 1/2$ .

Siguiendo el proceso descrito en el cuadro 7, se obtiene la figura 23(a) para  $U_{FF} = 3.5$  y una densidad de fermiones de  $\rho_F = 1$ .

5. FERMIONES CON ESPÍN  $S = 1/2$  Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

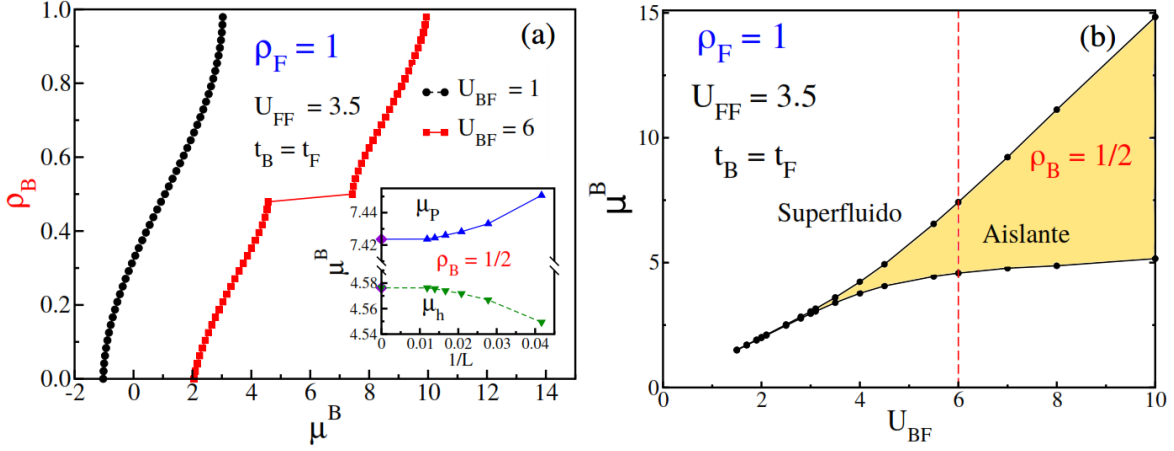


Figura 23: (a) Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu^B$ . La densidad fermiónica es  $\rho_F = 1$  (medio llenado) e interacción fermión-fermión  $U_{FF} = 3.5$ . Dos diferentes valores de interacción bosón-fermión, a saber:  $U_{BF} = 1$  (punto negros) y  $U_{BF} = 6$  (cuadros rojos), para los cuales hay ausencia o presencia de fases incompresibles respectivamente. **Recuadro:** Potencial químico como función del tamaño del sistema para una densidad bosónica  $\rho_B = 1/2$ . La gráfica superior (conjunto de datos en azul) corresponde a la energía de excitación de una partícula y la inferior (conjunto de datos en verde) corresponde a la energía de excitación del hueco. La extrapolación en el límite termodinámico se realiza por medio de un polinomio de segundo orden e indica que el gap de carga es finito, y se representa en la gráfica por medio de diamantes de color purpura. (b) Diagrama de fases en el plano  $\mu^B - U_{BF}$ , para  $U_{FF} = 3.5$  y densidad fermiónica  $\rho_F = 1$ . El diagrama de fases muestra la fase superfluida (blanco) y la fase aislante para  $\rho_B = 1/2$  (amarillo) que aparece a partir de un valor crítico  $U_{BF}^*$ . La línea vertical discontinua corresponde a la curva de la figura (a) (cuadros rojos). Las líneas son únicamente una ayuda visual.

La gráfica 23(a) muestra la densidad bosónica como función del potencial químico para un término de acoplamiento entre partículas de diferente especie  $U_{BF} = 1$  (punto negros) y  $U_{BF} = 6$  (cuadros rojos). Para  $U_{BF} = 1$ , se observa un incremento monótono en la densidad bosónica como función del potencial químico, indicando que las excitaciones bosónicas se producen sin un gasto de energía. Para el caso  $U_{BF} = 6$  se observa la aparición de una fase aislante, cuando la densidad bosónica es  $\rho_B = 1/2$ . Estos resultados sugieren la existencia de un valor crítico  $U_{BF}^*$  del parámetro de acoplamiento entre bosones y fermiones, para el cual aparece la fase aislante. El que esta fase aislante sobreviva en el límite termodinámico, indica que la energía de excitación de una partícula  $\mu_p = E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B + 1) - E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B)$  es diferente a la energía de excitación del hueco  $\mu_h = E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B) - E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B - 1)$ , estableciéndose un gap que se define como:

$$\Delta^B = \mu_p - \mu_h. \quad (45)$$

En el límite termodinámico para el caso en estudio, existe un valor finito de  $\Delta^B = 2.8$  para  $U_{BF} = 6$ , como se observa en recuadro de la gráfica 23(a). Este gap representa el ancho del plateau en la gráfica principal (figura 23(a)).

Estos resultados indican que cuando la densidad fermiónica es  $\rho_F = 1$  y la densidad bosónica es  $\rho_B = 1/2$ , se obtiene un único estado aislante que cumple con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ ,

donde el número total de cargas no es conmesurable con la red. Este hallazgo es interesante debido a que las fases aislantes de Mott surgen, cuando la suma entre la densidad bosónica y fermiónica da como resultado un valor entero, ( $\rho_B + \rho_F = \rho$ ,  $\rho \in N$ ) indicando de esta manera que el número total de partículas es conmesurable con el número de sitios de la red.

La gráfica 23(b) presenta el diagrama de fases en el plano  $\mu^B - U_{BF}$ . La curva superior  $\mu_p$  (inferior  $\mu_h$ ) representa la energía de excitación más baja desde el estado  $|N_\uparrow, N_\downarrow, N_B\rangle$  al estado  $|N_\uparrow, N_\downarrow, N_B + 1\rangle$  ( $|N_\uparrow, N_\downarrow, N_B - 1\rangle$ ), para diferentes valores del acoplamiento  $U_{BF}$ . La diferencia entre la curva superior e inferior nos permite conocer la variación del ancho del gap como función del parámetro de acoplamiento  $U_{BF}$  y se construye al realizar varios estudios de  $\mu^B - \rho_B$  para diferentes valores de  $U_{BF}$  como el de la figura 23(a), manteniendo constante la densidad de fermiones y la interacción entre fermiones. Este diagrama de fases establece que en el límite termodinámico para el intervalo  $0 \leq U_{BF}^* < 1.5$ , la energía requerida para adicionar o extraer una partícula del sistema es la misma y el estado base del sistema se encuentra en el estado superfluido. Para  $U_{BF} > 1.5$  y densidad bosónica  $\rho_B = 1/2$ , el sistema se encuentra en el estado aislante y el ancho del gap es función del parámetro  $U_{BF}$  (área amarilla).

Los estudios realizados indican que existe un valor crítico  $U_{BF}^* \geq U_{BF}$  a partir del cual se producen los estados aislantes, y para  $U_{BF} < U_{BF}^*$ , el sistema se encuentra en un estado superfluido. El valor crítico  $U_{BF}^*$  es función del parámetro de interacción entre fermiones como se ilustra por medio de la curva verde en la figura 24, que divide el diagrama de fases en una región sin gap<sup>14</sup> (región inferior) y una región con gap (región superior) que cumple con la condición  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ . En la figura 24, también se observa la aparición de la fase aislante aun cuando no hay interacción entre los fermiones  $U_{FF} = 0$ .

---

<sup>14</sup>Un estado sin gap es aquel estado en el que el potencial químico es continuo, indicando que no es necesario suministrar energía al sistema para agregar partículas.

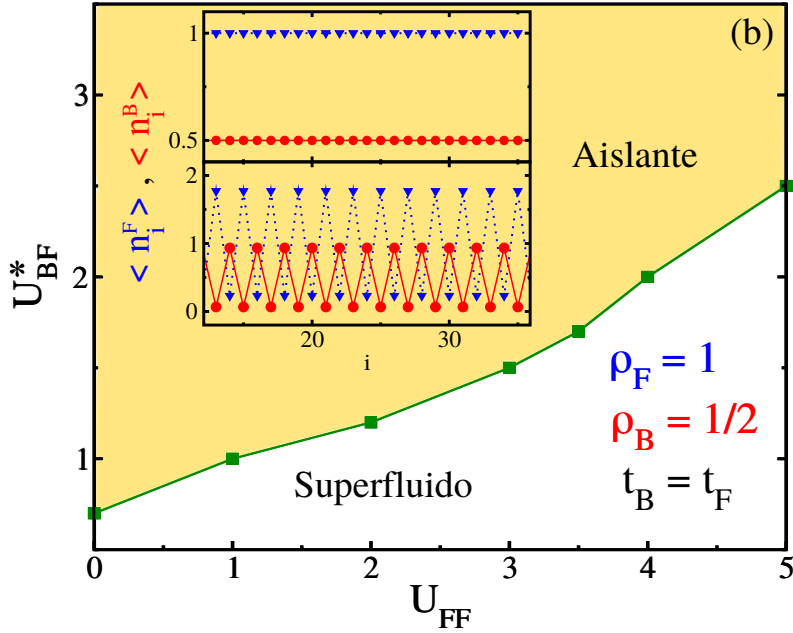


Figura 24: Puntos críticos  $U_{BF}^*$  como función de  $U_{FF}$ . La fase incompresible cumple con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ . **Recuadro:** Perfil de densidad a lo largo de la red para las partículas bosónicas (círculos rojos) y fermiónicas (triángulos azules) para  $U_{BF} = 5$  (panel superior) y  $U_{BF} = 9$  (panel inferior). En ambos casos la interacción entre fermiones es  $U_{FF} = 3.5$  y  $t_B = t_F = 1$ . Las líneas son ayudas visuales.

El perfil de densidad del número de partículas bosónicas y fermiónicas en la fase aislante, se presenta en el recuadro de la figura 24. Para valores pequeños del parámetro de interacción bosón-fermión, se observó que cada dos sitios hay un bosón extendido<sup>15</sup> y que las partículas fermiónicas ocupaban cada una un único lugar en la red, como se observa en el panel superior para un parámetro de interacción  $U_{BF} = 5$  y en la figura 22 (a). Este resultado sugiere que los fermiones que se encuentran en un estado de Mott, proporcionan un transfondo en el cual se produce una transición de estado entre la fase superfluida y la fase aislante, que se induce al variar el número de bosones. Una situación similar fue encontrada para una mezcla Bose-Fermi en 3D, considerando la conmensurabilidad global de las densidades bosónicas y fermiónicas. Para este sistema se reportó la transición de fase desde el estado superfluido al estado aislante de Mott con un transfondo fermiónico en la fase CDW [62, 134].

El perfil de densidad en la fase aislante del recuadro de la figura 24 para valores pequeños del parámetro de interacción bosón-fermión, permite explicar la aparición de la fase aislante en  $U_{FF} = 0$ , donde la interacción local entre bosones y fermiones es lo suficientemente fuerte para crear cuasipartículas pesadas que no decaen a pesar de su naturaleza repulsiva. Estas cuasipartículas se encuentran en una celda unitaria compuesta por dos sitios, cada uno con un fermión y un bosón uniformemente distribuido. Esto ocurre porque la energía potencial asociada es mayor que la energía cinética máxima para partículas independientes, por lo que la primera no puede convertirse en la segunda. Estos pares masivos repulsivamente unidos se propagan muy lentamente a través de la red, lo que resulta en un estado aislante [149]. Expe-

<sup>15</sup>La función de onda bosónica se distribuye de forma uniforme en dos sitios consecutivos.

rimentalmente se ha reportado la creación de cuasipartículas conformadas por dos fermiones y un bosón (FFB) en un confinamiento de tipo armónico pero con interacción entre bosones y fermiones de tipo atractivo [21]. Este resultado no ha sido reportado previamente en sistemas Bose-Fermi con interacción repulsiva.

Para valores grandes de  $U_{BF}$  los fermiones y los bosones ocupan lugares diferentes, haciendo que la distribución de partículas sea no homogénea, como se ilustra en el panel inferior del recuadro de la figura 24, donde se consideró un parámetro de acoplamiento  $U_{BF} = 9$ . Con este valor se obtiene un aislante alternante, constituido por una celda unitaria compuesta por dos sitios, uno de ellos ocupado por un bosón y el otro ocupado por aproximadamente dos fermiones. En esta fase tanto la densidad de onda de carga (CDW) fermiónica como bosónica es máxima, lo cual indica que los fermiones y los bosones se encuentran completamente localizados. La máxima ocupación fermiónica se debe a que sin importar el signo de la interacción bosón-fermión en cada uno de los sitios de la red, se induce una interacción de tipo atractiva entre los fermiones siempre y cuando la interacción bosón-bosón sea de carácter repulsivo [93]. Un estado base similar al que se encuentra en este trabajo, se reportó con una celda unitaria compuesta por dos sitios de la red, para una mezcla de fermiones con espín polarizado y bosones sin espín considerando una densidad de medio llenado para ambos tipos de cargas [30]. La fase CDW y la transición de fase entre SDW a CDW ha sido reportada por medio de la aproximación de bosonización [56].

Estos resultados permiten concluir que en el lóbulo aislante se produce una transición de fase cuántica que depende del parámetro de interacción entre fermiones y cuya determinación precisa es una de las perspectivas de esta tesis. Gráficamente este comportamiento se puede observar en la figura 25

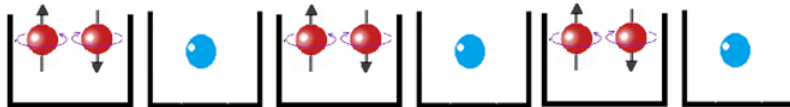


Figura 25: En la gráfica se observa que las cargas bosónicas (azul) se alternan con las cargas fermiónicas (rojo), es decir, donde hay fermiones no hay bosones y viceversa. Este comportamiento da origen a una fase CDW bosónica que coexiste con una fase CDW fermiónica.

Los resultados anteriores indican que existe un estado aislante cuando la densidad fermiónica es conmensurable con el tamaño de la red. Sin embargo ¿Sucede lo mismo si no se cumple dicha condición? Para dar respuesta a esta pregunta, en la siguiente sección se procederá a estudiar otros llenados fermiónicos.

## 5.2. Otros llenados

Luego de explorar la física para medio llenado fermiónico  $\rho_F = 1$ , se estudiará en la presente sección lo que sucede con los diagramas de fases del sistema, al considerar diferentes densidades fermiónicas. La primera densidad que se explorará es  $\rho_F = 1/2$  y se considerará un parámetro de interacción entre fermiones constante de  $U_{FF} = 5$ . Nuevamente se determinará

5. FERMIONES CON ESPÍN  $S = 1/2$  Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

el comportamiento de la densidad bosónica como función del potencial químico, manteniendo el parámetro de acoplamiento  $U_{BF}$  constante, como se muestra en la figura 26.

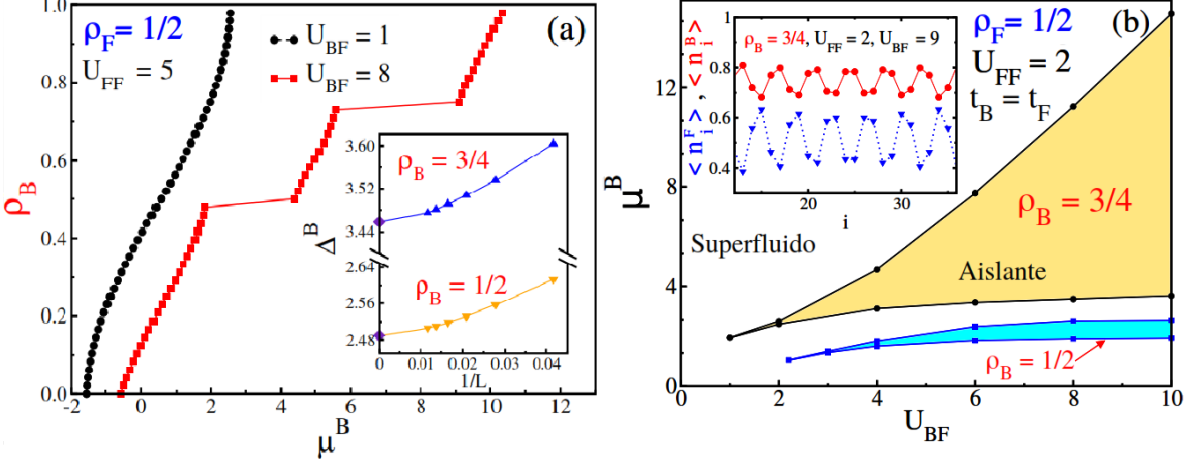


Figura 26: (a) Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu^B$ . La densidad fermiónica se fija en  $\rho_F = 1/2$  y la interacción repulsiva entre fermiones es  $U_{FF} = 5$ . Se consideran dos diferentes valores de interacción bosón-fermión, a saber:  $U_{BF} = 1$  (puntos negros) y  $U_{BF} = 8$  (cuadrados rojos) para los cuales hay ausencia o presencia de fases incompresibles respectivamente. **Recuadro:** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades bosónicas  $\rho_B = 1/2$  (naranja) y  $\rho_B = 3/4$  (azul). Los valores para  $1/L \rightarrow 0$  (diamantes) corresponden a la extrapolación en el límite termodinámico por medio de un polinomio de segundo orden. (b) Diagrama de fases del estado base en el plano  $\mu^B - U_{BF}$  para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de  $U_{FF} = 2$  y densidad fermiónica de  $\rho_F = 1/2$ . Las áreas con color corresponden a regiones incompresibles. La región en amarillo corresponde a la densidad bosónica  $\rho_B = 3/4$  y la región azul es para  $\rho_B = 1/2$ . **Recuadro:** Valor esperado del número de partículas bosónicas (círculos rojos) y fermiónicas (triángulos azules) a lo largo de la red. Se observa que el estado fundamental dentro del lóbulo amarillo  $\rho_B = 3/4$  es una fase CDW. Los cálculos no mostrados presentan el mismo patrón de perfil de densidad, luego a diferencia de la figura 24, no hay diferentes tipos de fases aislantes, sino que siempre se ve una CDW. Los perfiles de densidad para  $\rho_B = 1/2$  se presentan en la figura 27. Las líneas son ayudas visuales.

En la gráfica 26(a), se observa un crecimiento continuo de la densidad bosónica cuando el término de acoplamiento es  $U_{BF} = 1$  (puntos negros), lo cual indica que el estado base se encuentra en una fase superfluida. Al incrementar el valor del acoplamiento a  $U_{BF} = 8$ , el sistema presenta un comportamiento bastante novedoso relacionado con la aparición de dos fases aislantes (cuadros rojos), una para la densidad  $\rho_B = 1/2$  y otra para  $\rho_B = 3/4$ . El recuadro muestra la evolución del ancho de estas fases aislantes en función del inverso del tamaño de la red, indicando que en el límite termodinámico alcanzan un valor finito, de  $\Delta^B = 2.4$  para  $\rho_B = 1/2$  y de  $\Delta^B = 3.4$  para  $\rho_B = 3/4$ .

El estado aislante que emerge para  $\rho_B = 1/2$ , manteniendo constante la densidad de fermiones  $\rho_F = 1/2$  satisface la relación  $\rho_B = 1 - \rho_F$  e indica que el número total de cargas es conmensurable con el tamaño de la red, dando origen a un estado de Mott mezclado donde la densidad de los bosones y de los fermiones no son conmensurables. Una representación esquemática de esta situación se presenta en la figura 22(b). Esta relación por separado se ha obtenido para

estados aislantes de mezclas Bose-Fermi en diferentes contextos, por ejemplo anteriormente en mezclas entre bosones y fermiones con espín polarizado [39]. La fase aislante que proviene de  $\rho_B = 3/4$  manteniendo constante  $\rho_F = 1/2$ , cumple con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$  que se vincula al aislante de Mott, ya discutido antes para el caso  $\rho_F = 1$ . Estas relaciones fueron verificadas para otras densidades fermiónicas (por ejemplo  $\rho_F = 1/3$ ) y es una de las principales conclusiones de este trabajo.

La presencia de dos fases aislantes en este llenado sugieren un diagrama de fases muy diverso, como se muestra en la gráfica 26(b). Las regiones coloreadas indican los estados aislantes que se encuentran para las densidades bosónicas  $\rho_B = 3/4$  (lóbulo amarillo) y  $\rho_B = 1/2$  (lóbulo azul). El lóbulo para  $\rho_B = 1/2$ , muestra un crecimiento lento en la energía necesaria para adicionar o extraer una partícula bosónica del sistema, y su diferencia tiende a permanecer constante para valores altos del parámetro  $U_{BF}$ . Este comportamiento es diferente al que se presenta para  $\rho_B = 3/4$ , en el cual la diferencia en las dos energías se incrementa con  $U_{BF}$ . Es importante mencionar que las regiones que rodean a cada uno de los lóbulos sugieren la existencia de tres diferentes regiones superfluidas.

En el recuadro de la figura 26(b) se muestra el valor esperado del número de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para  $\rho_B = 3/4$  (punto rojos y triángulos azules respectivamente), para un parámetro de interacción entre fermiones de  $U_{FF} = 2$  y  $U_{BF} = 9$ . En esta fase, el estado fundamental es una modulación periódica de carga de dos sitios, es decir, una onda de densidad de carga que permanece cualitativamente igual independientemente de la interacción bosón-fermión.

Los estados aislantes de las figuras 23(b) y 26(b) para  $\rho_B = 3/4$ , cumplen con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ . Estos lóbulos presentan un incremento lento de la energía necesaria para remover un bosón, la cual se satura al aumentar el parámetro de interacción entre partículas de diferente especie. Por el contrario, la energía necesaria para adicionar un bosón crece de forma rápida con el parámetro de interacción bosón-fermión  $U_{BF}$ . Por lo tanto las características de las fases aislantes de los lóbulos que cumplen con la relación  $\rho_B + \rho_F = 1$  son diferentes si se comparan con los que cumplen con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ .

Los puntos críticos  $U_{BF}^*$  para el estado aislante cuando la densidad bosónica es  $\rho_B = 1/2$ , se representan en la figura 27 por medio de cuadrados verdes para diferentes valores del parámetro de interacción entre fermiones. La curva divide el diagrama de fases en dos regiones: la región con color que indica un estado aislante y la región sin color que hace referencia a la región superfluida. Es de resaltar que el estado aislante se presenta aún cuando la interacción entre fermiones es cero y se necesita una energía de interacción aproximada de  $U_{BF}^* \approx 4.2$  para distribuir y localizar las cargas en los diferentes sitios de la red como se ilustra en el esquema de la figura 22 (b). Esta energía es mayor que la requerida para inducir el estado aislante para medio llenado fermiónico y  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$  estudiado en la sección 4.1, debido a la mayor cantidad de fermiones en ese caso (ver figura 24). La gráfica 27 también indica que debido a la menor densidad de fermiones ( $\rho_F = 1/2$ ), la energía de acoplamiento  $U_{BF}^*$  para localizar las partículas es menor a medida que se incrementa la interacción  $U_{FF}$ .



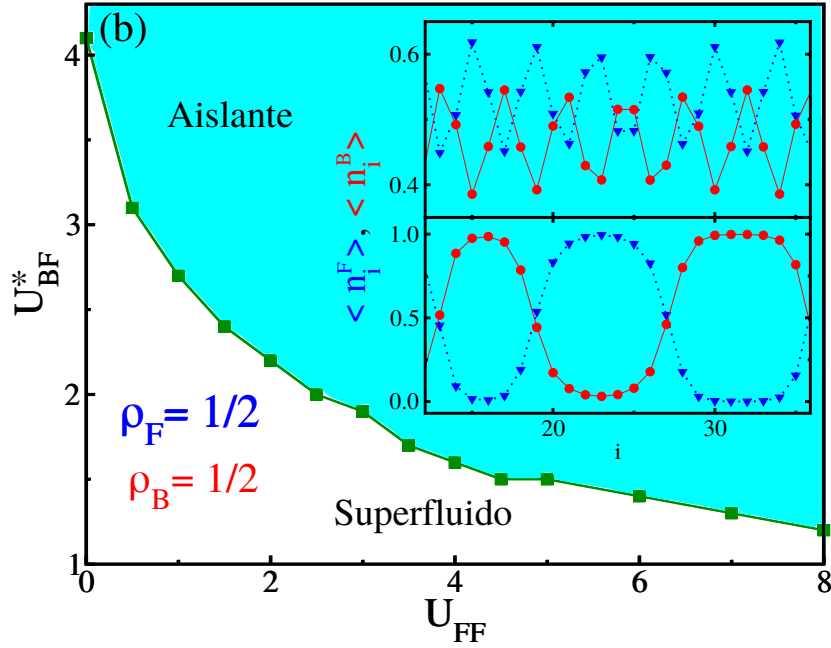


Figura 27: Puntos críticos como función de la interacción entre fermiones  $U_{FF}$  para una densidad  $\rho_B = 1/2$ . Los cuadrados separan la región superfluida de la región aislante. **Recuadro:** Dentro del lóbulo aislante (región azul) se presenta una transición de fase que depende del parámetro de interacción bosón-fermión y que va desde un estado base que se encuentra en una fase dimerizada entrecruzada para el caso  $U_{BF} = 13$  (panel superior) a un estado de separación de fases para  $U_{BF} = 16$  (panel inferior) considerando fija la interacción entre fermiones  $U_{FF} = 2$ . Las líneas son ayudas visuales.

La evolución de los puntos críticos  $U_{BF}^*$ , contrasta con los hallazgos para los lóbulos que cumplieron la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ , donde dichos puntos críticos aumentan con  $U_{FF}$ . Este fenómeno se debe a la baja densidad fermiónica que localiza a los bosones y los fermiones en diferentes sitios, manteniendo el estado aislante cuando la interacción bosón-fermión es débil y la interacción entre fermiones es finita. En los lóbulos aislantes, el número total de portadores es siempre mayor que el tamaño de la red como se observó en la figura 24, realzando la importancia de la interacción bosón-fermión.

La distribución de las partículas bosónicas y fermiónicas en los lóbulos aislantes es diversa y se puede atribuir principalmente a la interacción bosón-fermión, como se aprecia en el recuadro de la figura 27, donde se mantiene fija la interacción fermión-fermión para una densidad bosónica de  $\rho_B = 1/2$  y se varía el parámetro de interacción bosón-fermión. En el panel superior del recuadro se considera que  $U_{BF} = 13$ , lo cual genera un estado base que se encuentra en una fase dimerizada que se entrecruza debido a la baja densidad global de fermiones. En el panel inferior del recuadro, se considera  $U_{BF} = 16$  y se observan regiones con un número pequeño de cargas fermiónicas y ausencia de cargas bosónicas alternadas con regiones donde la densidad de bosones es pequeña y hay ausencia de cargas fermiónicas. Esta distribución a lo largo de la red corresponde a una separación de fases que ya ha sido reportada teóricamente y recientemente observada en una mezcla Bose-Fermi constituida por isótopos de  $^{41}K - ^6Li$  [206].

5. FERMIONES CON ESPÍN  $S = 1/2$  Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “HARD-CORE”

La caracterización del estado base para bosones y fermiones se complementa por medio de las correlaciones densidad-densidad, que permiten obtener el factor de estructura para cada una de las cargas definido como

$$S_{F,(B)}(k) = \sum_{j,l=1}^L e^{ik(j-l)} \left( \langle n_j^{F,(B)} n_l^{F,(B)} \rangle - \langle n_j^{F,(B)} \rangle \langle n_l^{F,(B)} \rangle \right), \quad (46)$$

donde  $k$  es el vector de onda en el espacio de momentos,  $\langle \dots \rangle \equiv \langle \psi_0 | \dots | \psi_0 \rangle$ , y  $|\psi_0\rangle$  es la función de onda del estado base.

El factor de estructura para bosones y para fermiones exhibe un máximo alrededor de  $k/\pi \sim 0.54$  para  $U_{BF} = 13$  y un crecimiento monótono para los fermiones en  $U_{BF} = 19$  con una tendencia a saturar para los bosones, como se observa en la figura 28. Lo anterior nos permite reforzar que existe una transición de fase al interior de la fase aislante.

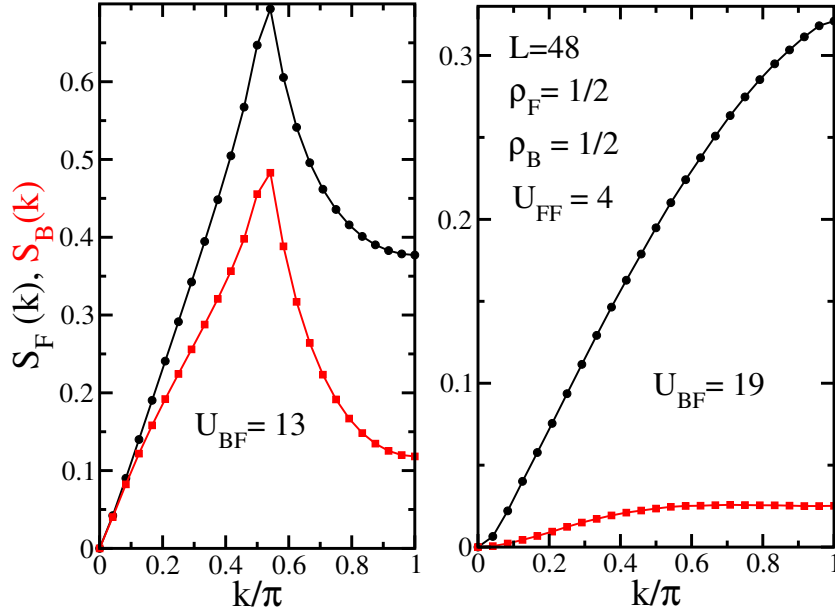


Figura 28: Factor de estructura para bosones (cuadrados rojos) en el límite “soft-core” interactuando con fermiones con dos grados de libertad (puntos negros). El cálculo se realiza para una red con  $L = 48$  sitios.

Para densidades fermiónicas que se encuentran por encima del medio llenado los sistemas compuestos por mezclas Bose-Fermi cumplen con la simetría partícula-hueco, por lo cual se espera la aparición de regiones aislantes según las condiciones expuestas anteriormente. Por ejemplo, para una densidad fermiónica de  $\rho_F = 3/4$  se obtienen fases aislantes para densidades bosónicas de  $\rho_B = 1/4$  y  $\rho_B = 1/2$ .

### 5.3. Imbalance de masas

La posibilidad de realizar experimentalmente sistemas mezclados de bosones y fermiones con diferentes átomos, implica que estos sistemas pueden estar compuestos por especies atómicas

con diferentes masas y presentar fases cuánticas diferentes a las obtenidas cuando las masas se encuentran balanceadas. Teóricamente los sistemas Bose-Fermi con diferentes masas, se pueden estudiar haciendo que los hopping sean diferentes  $t_B \neq t_F$ . Para explorar como varía el diagrama de fases de un sistema compuesto por bosones y fermiones con diferentes masas, se considerará a continuación el caso para el cual  $t_B = 5t_F$  que se ha estudiado en otras investigaciones experimentales [24], considerando los mismos parámetros del estudio realizado para  $\rho_F = 1$ . El diagrama de fases en el plano  $\mu^B - U_{BF}$  para este sistema se presenta en la figura 29(a).

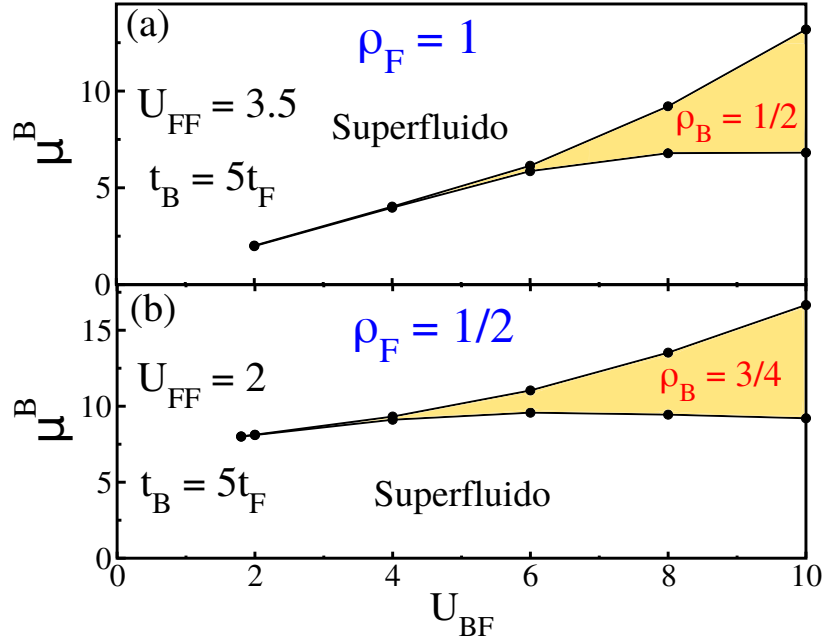


Figura 29: Diagrama de fases del potencial químico como función del parámetro de interacción bosón-fermión para un imbalance en las masas de  $t_B = 5t_F$ . (a) Densidad fermiónica  $\rho_F = 1$  y parámetro de interacción entre fermiones  $U_{FF} = 3.5$ . (b) Densidad fermiónica  $\rho_F = 1/2$  y parámetro de interacción entre fermiones  $U_{FF} = 2$ . La fase superfluida es la región en blanco y la fase aislante para  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$  es la región con color. Las líneas son ayudas visuales.

Esta figura muestra como el lóbulo aislante cumple con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ , presentando un área mas angosta que la reportada en la gráfica de la figura 23(b); esto se debe principalmente a la mayor energía cinética de los bosones. Este comportamiento se mantiene cuando la densidad de fermiones es de  $\rho_F = 1/2$  como se observa en la figura 29(b). Sin embargo, para este último caso, la fase aislante que surge para la relación de conmesurabilidad  $\rho_B + \rho_F = 1$ , es decir, la fase aislante para  $\rho_B = 1/2$  desaparece, debido a la menor densidad fermiónica.

#### 5.4. Conclusiones

En este capítulo se estudió el estado base de una mezcla entre fermiones con espín  $1/2$  y bosones sin espín en el límite “hard-core”, considerando diferentes densidades fermiónicas y

variando los parámetros de interacción fermión-fermión y bosón-fermión para construir los diferentes diagramas de fase.

Para el caso de medio llenado fermiónico ( $\rho_F = 1$ ) se encontró un único estado aislante que se presenta para  $\rho_B = 1/2$  y cumple con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ . Este estado se caracteriza por una transición de fase que va desde un aislante de Mott con un fermión por sitio y un bosón compartido por dos sitios a un estado aislante alternante donde cada celda unitaria se encuentra constituida por dos sitios: uno con dos fermiones y el otro sitio con un bosón. Esta transición se induce controlando el acoplamiento entre partículas  $U_{BF}$ .

A diferencia del caso anterior para otros llenados fermiónicos, los estados aislantes dependen de la densidad fermiónica y surgen cuando la densidad bosónica cumple con las relaciones  $\rho_B = 1 - \rho_F$  y  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ . El estado fundamental para cada uno de los casos es diferente. Por ejemplo, para el caso en el que se considera un llenado fermiónico de  $\rho_F = 1/2$  y una densidad bosónica de  $\rho_B = 3/4$ , el estado base no se altera al variar el término de acoplamiento  $U_{BF}$ . Sin embargo, para el caso en el que la densidad bosónica es  $\rho_B = 1/2$ , se presenta una transición de fase cuántica que va desde una onda de densidad de carga a una separación de fases.

En esta sección también se encontró que los lóbulos aislantes surgen a partir de un valor crítico finito del término de acoplamiento  $U_{BF}^*$  que depende del parámetro de interacción entre fermiones y su evolución depende de si cumple o no con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ .

Por último se estudió lo que sucedía con el sistema al considerar un imbalance en las masas. En este caso se presenta una reducción en el ancho de los lóbulos que cumplen con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ , mientras que los otros desaparecían dependiendo de los parámetros de interacción.

La correspondencia entre los parámetros del modelo de Hubbard y los parámetros que se controlan experimentalmente son:  $U_{BB} = E_B^R a_{BB} k \sqrt{\frac{8}{\pi}} \eta_B^{3/4}$ ,  $U_{FF} = E_F^R a_{FF} k \sqrt{\frac{8}{\pi}} \eta_F^{3/4}$  y  $U_{BF} = E_F^R a_{BF} k \frac{4}{\sqrt{\pi}} (1 + \frac{m_F}{m_B}) (\eta_F^{-1/2} + \eta_B^{-1/2})^{-3/2}$ , donde  $k = \frac{\pi}{a}$  es el vector de onda del campo láser,  $a$  denota el espaciamiento de la red,  $E_{B(F)}^R = \frac{(\pi\hbar)^2}{2a^2 m_{B(F)}}$  es la energía de retroceso bosónica (fermiónica) y  $\eta_{B(F)} = \frac{V_{B(F)}}{E_{B(F)}^R}$  es la amplitud de la red en forma adimensional [93]. Experimentalmente las interacciones boson-boson y boson-fermion, se controlan variando la profundidad de los patrones de interferencia de la red óptica, la longitud de onda del laser y las longitudes de dispersión  $a_{BB}$  y  $a_{BF}$  que se pueden ajustar por medio de resonancia Feshbach, por lo que es posible ajustar de forma razonable los parámetros a las escalas de energía trabajadas en esta investigación. A lo largo de todo el estudio se considera que ambas especies tienen aproximadamente la misma masa  $m_B \approx m_F$ , por lo que  $t_B = t_F$  y permite estudiar mezclas como  ${}^6\text{Li} - {}^7\text{Li}$  [14],  ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$  [15],  ${}^{173}\text{Yb} - {}^{174}\text{Yb}$  [21] y  ${}^{40}\text{K} - {}^{41}\text{K}$  [242]. Para el estudio particular se puede considerar la mezcla  ${}^{170}\text{Yb} - {}^{171}\text{Yb}$ .

En el siguiente capítulo se estudiará un sistema unidimensional constituido por fermiones con espín  $1/2$  que interactúan con bosones sin espín en el límite “soft-core” donde se espera que la física sea aún más rica. Se construirán los diagramas de fases a temperatura cero, considerando interacciones intraespecies de tipo repulsivo e interespecies tanto atractivas como repulsivas.

## 6

### FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

En el capítulo anterior se encontró que para un sistema conformado por fermiones con espín  $1/2$  y bosones polarizados en el límite hard-core, surgen dos tipos de fases aislantes: fases aislantes de Mott mezcladas, que emergen cuando la densidad total de partículas es conmesurable con la red y fases aislantes que emergen para densidades no conmesuradas. También se logró establecer que estas fases cumplen con las relaciones de conmesurabilidad  $\rho_B = 1 - \rho_F$  y de inconmesurabilidad  $\rho_B = 1 - \frac{1}{2}\rho_F$ . Pero, ¿Qué sucede con estas fases de compresibilidad cero, si ahora se considera más de un bosón por sitio?

Luego de explorar las transiciones de fase para una mezcla entre bosones sin espín en el límite “hard-core” y fermiones con dos grados de libertad internos confinados en una red óptica unidimensional, y de encontrar que las fases aislantes para este sistema se producen cuando la densidad bosónica es  $\rho_B = 1 - \rho_F$  y  $\rho_B = 1 - \frac{1}{2}\rho_F$  [152], se procederá a estudiar esta misma configuración de partículas, pero considerando ahora la posibilidad de encontrar más de un bosón en el mismo sitio (límite “soft-core”) como se observa esquemáticamente en la figura 30. Debido a la posibilidad de variar experimentalmente tanto la magnitud como el signo de la interacción entre partículas de diferentes especies, en esta investigación se consideran interacciones tanto de tipo atractivo como de tipo repulsivo.

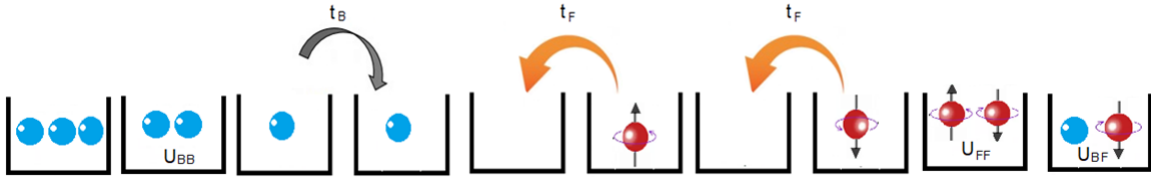


Figura 30: Representación esquemática del modelo Bose-Fermi Hubbard en el límite soft-core. Los círculos azules representan a los bosones sin espín y los círculos rojos representan a los fermiones con espín  $1/2$ .

El estudio teórico de este sistema, se realizará por medio del modelo Bose-Fermi Hubbard (ecuación (22)), sin considerar el término correspondiente al potencial de confinamiento externo

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BF} = & -t_B \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.) + \frac{U_{BB}}{2} \sum_i \hat{n}_i^B (\hat{n}_i^B - 1) - t_F \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (\hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} + h.c.) \\ & + \frac{U_{FF}}{2} \sum_{i,\sigma \neq \sigma'} \hat{n}_{i,\sigma}^F \hat{n}_{i,\sigma'}^F + U_{BF} \sum_i \hat{n}_i^B \hat{n}_i^F. \end{aligned} \quad (47)$$

Para investigar este modelo se considera que el número máximo de bosones por sitio es  $n_{max}^B =$

6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

---

3; de esta manera el espacio de Hilbert bosónico  $\mathcal{H}_B$  local tiene como base:  $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$  y  $|3\rangle$  y con una densidad que se encuentra en el intervalo  $0 \leq \rho_B \leq 3$ . Es de resaltar el hecho de que si bien la densidad máxima posible de bosones que se consideran en el estudio es  $\rho_B = 3$ , los cálculos realizados no alcanzan este valor, pues se hace necesario considerar las fluctuaciones cuánticas. Para el caso de los fermiones, los estados  $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  y  $|\uparrow\downarrow\rangle$  forman una base para el espacio de Hilbert correspondiente  $\mathcal{H}_F$ . La densidad de fermiones por sitio, se encuentra en el intervalo  $0 \leq \rho_F \leq 2$ .

Por medio del producto tensorial entre los espacios bosónicos y fermiónicos  $|N_B\rangle \otimes |N_F\rangle$  se obtienen los siguientes estados para un sitio de la mezcla:

$ N_B\rangle$	$ N_{\uparrow}^F\rangle$	$ N_{\downarrow}^F\rangle$	$ N_B, N_F\rangle$
0	0	0	$ 0, 0\rangle$
0	$\uparrow$	0	$ 0, \uparrow\rangle$
0	0	$\downarrow$	$ 0, \downarrow\rangle$
0	$\uparrow$	$\downarrow$	$ 0, \uparrow\downarrow\rangle$
1	0	0	$ 1, 0\rangle$
1	$\uparrow$	0	$ 1, \uparrow\rangle$
1	0	$\downarrow$	$ 1, \downarrow\rangle$
1	$\uparrow$	$\downarrow$	$ 1, \uparrow\downarrow\rangle$
2	0	0	$ 2, 0\rangle$
2	$\uparrow$	0	$ 2, \uparrow\rangle$
2	0	$\downarrow$	$ 2, \downarrow\rangle$
2	$\uparrow$	$\downarrow$	$ 2, \uparrow\downarrow\rangle$
3	0	0	$ 3, 0\rangle$
3	$\uparrow$	0	$ 3, \uparrow\rangle$
3	0	$\downarrow$	$ 3, \downarrow\rangle$
3	$\uparrow$	$\downarrow$	$ 3, \uparrow\downarrow\rangle$

Cuadro 8: Espacio de Hilbert local para un sistema conformado por fermiones con dos grados de libertad internos y bosones sin espín en el límite soft-core  $\mathcal{H}_B \times \mathcal{H}_F = 16$ .

De esta manera el espacio tiene una dimensión  $d = 16$ , que es una base grande pero tratable. El problema se aborda considerando que la escala de energía se fija en  $t_F = 1$  y se considera una amplia gama de densidades bosónicas y fermiónicas. Una ilustración esquemática de algunos estados base del sistema se presenta en la figura 31 para una red con ocho sitios.

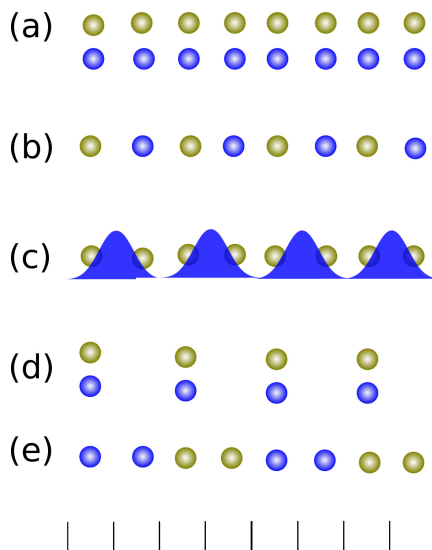


Figura 31: Posibles distribuciones de las partículas para el estado base de una mezcla de bosones escalares (azul) y fermiones con dos grados de libertad internos (verde). **a.** Coexistencia del estado base de Mott para fermiones ( $\rho_F = 1$ ) y bosones ( $\rho_B = 2$ ), aquí  $U_{BF} \geq 0$ . **b.** Estado aislante de Mott mezclado con  $\rho_F = 1/2$  e interacción de acoplamiento  $U_{BF}$  de tipo repulsivo. **c.** Estado aislante no conmensurado con densidad fermiónica  $\rho_F = 1$  y densidad bosónica  $\rho_B = 1/2$  para  $U_{BF} \leq 0$ . **d.** CDW con un bosón y un fermión cada dos sitios. **e.** Estado aislante con doble periodicidad bosónica y fermiónica para interacciones repulsivas, considerando  $\rho_F = 1$  y  $\rho_B = 1$ . Cada sitio se representa por medio de los cuadros negros de la parte inferior.

La energía del estado base del sistema conformado por un número  $N_B$  de bosones y  $N_F = N_\uparrow + N_\downarrow$  de fermiones, se expresa por medio de  $E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B)$  y se obtiene a partir del Hamiltoniano 20 por medio del algoritmo del grupo de renormalización de la matriz densidad, considerando condiciones de frontera abiertas.

Experimentalmente es posible controlar las interacciones entre gases cuánticos degenerados por medio de resonancia Feshbach [243], por esta razón se considerará en la siguientes dos secciones el acoplamiento bosón-fermión tanto de tipo atractivo como de tipo repulsivo.

### 6.1. Acoplamiento bosón-fermión repulsivo ( $U_{BF} > 0$ )

En esta sección se considerará que la interacción entre partículas con diferente estadística es de tipo repulsivo, se fija la densidad de fermiones en  $\rho_F = 1/2$  y se varía la densidad de bosones en el intervalo  $0 \leq \rho_B \leq 3$ , considerando que las interacciones bosón-bosón y fermión-fermión son de tipo repulsivo y sus valores son  $U_{BB} = 16$  y  $U_{FF} = 6$  respectivamente.

En la figura 32(a) se observa que para el parámetro de acoplamiento  $U_{BF} = 1$  (cuadrados rojos), el potencial químico bosónico  $\mu_B = E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B + 1) - E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B)$  crece de forma continua, presentando mesetas (plateaus) cuando la densidad de bosones es entera. Esta fenomenología se debe principalmente a la baja interacción entre bosones y fermiones, reproduciendo el comportamiento de sistemas conformados únicamente por bosones [150].

## 6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

Debido a este comportamiento, a estas fases se les denomina como fases aislantes triviales.

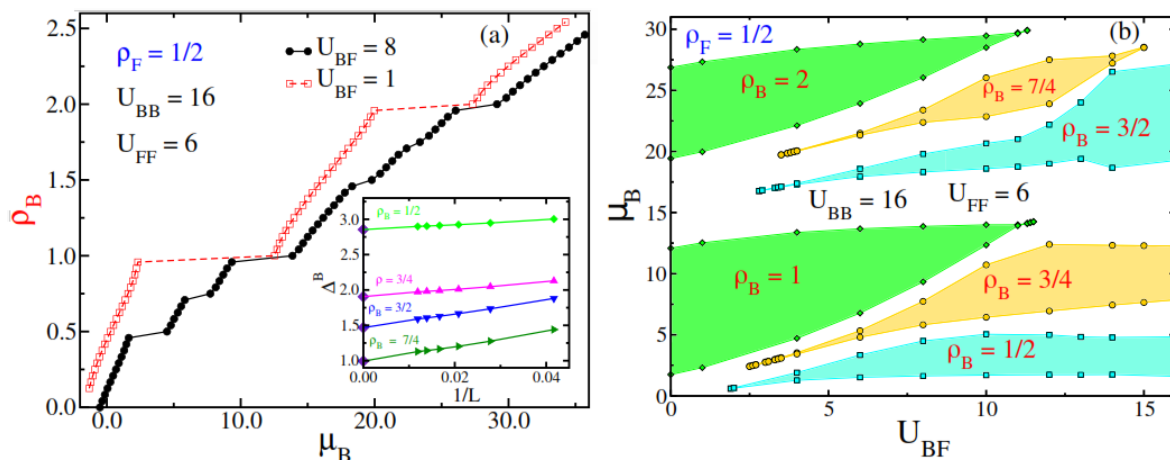


Figura 32: (a) Densidad bosónica como función del potencial químico. **Recuadro** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades de  $\rho_B$  no triviales. La extrapolación en el límite termodinámico se realiza por medio de un polinomio de segundo orden e indica que el gap de carga es finito y se representa en la gráfica por medio de diamantes de color púrpura. (b) Diagrama de fases del estado base en el plano  $\mu_B - U_{BF}$  para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de  $U_{FF} = 6$  y densidad fermiónica de  $\rho_F = 1/2$ .

Al aumentar el parámetro de interacción bosón-fermión a  $U_{BF} = 8$  (círculos negros) se observa que los estados aislantes triviales disminuyen su gap y surgen cuatro nuevos estados aislantes (no triviales) en las densidades bosónicas  $\rho_B = 1/2, 3/4, 3/2$  y  $\rho_B = 7/4$ . En el recuadro de la figura 32(a) se muestra como estos estados aislantes se mantienen en el límite termodinámico.

Los estados aislantes que se encuentran en las densidades  $\rho_B = 1/2$  y  $\rho_B = 3/2$ , se relacionan con el estado base para el cual la densidad total de partículas ( $\rho_B + \rho_F$ ) es conmesurable con el tamaño de la red. Por lo tanto estas fases aislantes corresponden a aislantes de Mott mezclados que cumplen la relación  $\rho_B + \rho_F = n$ , donde  $n = 1$  para el aislante  $\rho_B = 1/2$  y  $n = 2$  para  $\rho_B = 3/2$ . Las fases aislantes no triviales que aparecen en las densidades  $\rho_B = 3/4$  y  $\rho_B = 7/4$  no cumplen la condición de conmesurabilidad y satisfacen la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = n$  donde  $n = 1$  para el en aislante  $\rho_B = 3/4$  y  $n = 2$  para el aislante en  $\rho_B = 7/4$ . La anterior discusión y cálculos para otras densidades fermiónicas permiten concluir que este sistema tiene estados aislantes triviales y estados aislantes no triviales, lo cual generaliza los resultados del modelo “hard-core” [152].

Las propiedades físicas de las fases aislantes dependen de las densidades bosónicas y fermiónicas al igual que de los parámetros de interacción, por lo cual existe un amplio rango de parámetros para explorar el sistema. El diagrama de fases en el plano  $\mu_B - U_{BF}$ , se ilustra en la figura 32(b) donde las regiones con color representan las fases aislantes, mientras que las áreas en blanco corresponden a regiones sin gap (estados superfluidos). En esta figura se observa que el gap de los lóbulos triviales disminuye a medida que el acoplamiento bosón-fermión aumenta, alcanzando sus puntos críticos en  $U_{BF}^* \approx 11.7$  y  $U_{BF}^* \approx 11.3$  para  $\rho_B = 1$  y  $\rho_B = 2$  respectivamente. Debido a la interacción fermión-fermión los lóbulos aislantes de Mott des-



aparecen más rápidamente que lo predicho para una mezcla de bosones escalares y fermiones polarizados  $U_{BF}^* \approx 2U_{BB}$  [39]. Tanto en este último estudio como en nuestra investigación en el límite “hard-core” los lóbulos no triviales surgen desde un valor finito de la interacción repulsiva entre bosones y fermiones, al igual que se evidencia en este caso que es más general.

Contrario al límite “hard-core” (figura 26), los lóbulos aislantes de Mott triviales aparecen primero que los lóbulos donde la densidad de partículas no es conmesurada. Este comportamiento se debe a que se considera más de un bosón por sitio con una interacción mutua de tipo repulsivo, además, la interacción entre bosones y fermiones es pequeña, lo cual hace que las especies atómicas se comporten de forma casi independiente. Estos lóbulos tienden a saturar en valores grandes del parámetro de acoplamiento bosón-fermión, lo cual indica que esta característica no depende de la repulsión entre bosones. Los lóbulos no triviales que aparecen para las densidades  $\rho = 1/2, 3/4, 3/2$  y  $7/4$  tienen sus puntos críticos en  $U_{BF}^* \approx 1.9, 2.5, 2.9, 3.9$  respectivamente. La evolución de estos lóbulos es diferente a los del sistema “hard-core”, donde el ancho siempre se incrementaba. Ahora se observa que para  $\rho_B = 3/4$  el ancho satura para valores grandes de  $U_{BF}$  y se desvanece para  $\rho_B = 7/4$ , determinando un lóbulo cerrado en el diagrama de fases. Se espera que entre los lóbulos aislantes se generen diferentes estados superfluidos que marcará la rica física involucrada en el modelo descrito por el hamiltoniano de la ecuación (47).

Experimentalmente también es posible fijar la densidad de bosones y variar la densidad de fermiones [21]. Es por ello que como complemento a esta investigación se explorará la transición desde el estado superfluido al estado aislante considerando una densidad bosónica fija en  $\rho_B = 1/4$  y se variará el número de fermiones. El potencial químico de los fermiones se define como  $\mu_F = E(N_\uparrow + 1, N_\downarrow + 1, N_B) - E(N_\uparrow, N_\downarrow, N_B)$  y la densidad fermiónica puede variar en el intervalo  $0 \leq \rho_F \leq 2$  como se ilustra en la figura 33 (a). En esta figura, al igual que en la figura 32 (a), se observa que para el parámetro de interacción débil  $U_{BF} = 1$  el potencial químico fermiónico presenta un salto cuando la densidad de fermiones es  $\rho_F = 1$  (cuadrados rojos). El resultado es cualitativamente muy similar al encontrado para un sistema con solo fermiones; para interacciones débiles se recupera el comportamiento de los modelos independientes, que es lo que uno intuitivamente espera.

6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

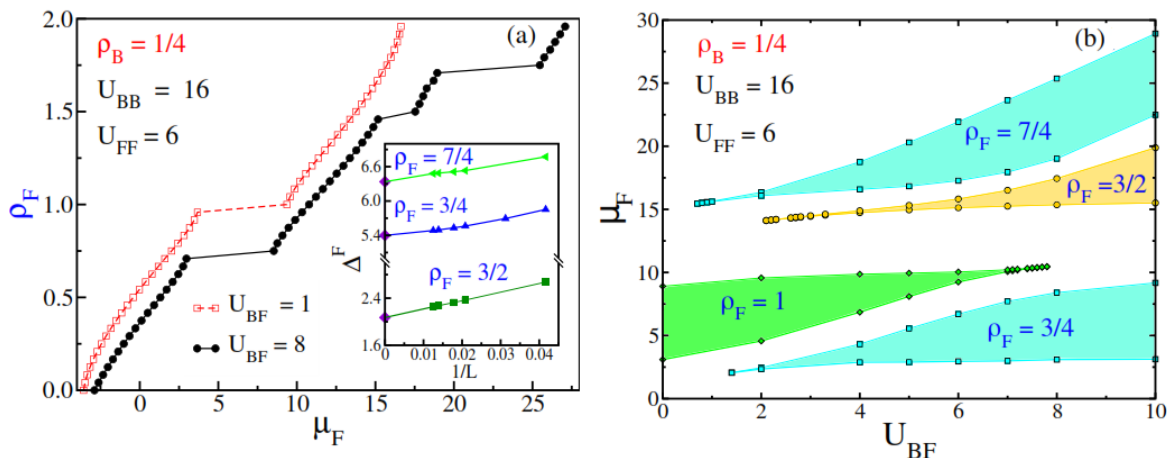


Figura 33: (a) Densidad fermiónica  $\rho_F$  como función del potencial químico  $\mu^F$  para un llenado  $\rho_B = 1/4$ . **Recuadro** Ancho del gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades de  $\rho_F$  no triviales. (b) Diagrama de fases del estado base en el plano  $\mu_F - U_{BF}$  para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de  $U_{FF} = 6$ ,  $U_{BB} = 16$  y densidad bosónica de  $\rho_B = 1/4$ .

Al incrementar el acoplamiento repulsivo entre bosones y fermiones a  $U_{BF} = 8$  (puntos negros), la fase aislante trivial desaparece y da origen a tres fases aislantes no triviales, que cumplen con las relaciones  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$  y  $\rho_B + \rho_F = 1$  encontradas en el capítulo anterior y reportadas en [152]. Estas fases aislantes se presentan en las densidades  $\rho_F = 3/4$ ,  $\rho_F = 3/2$  y  $\rho_F = 7/4$ . El gap de carga para cada una de estas fases aislantes no triviales se presenta en el recuadro de la figura 33 (a) como función del tamaño del sistema; en el límite termodinámico, obtenido por medio de extrapolaciones polinomiales de segundo orden, se observa que las fases aislantes sobreviven. Los estados aislantes de Mott en las densidades  $\rho_F = 3/4$  y  $\rho_F = 7/4$  tienen un número total de partículas igual y dos veces el tamaño de la red, respectivamente; mientras que el lóbulo en  $\rho_F = 3/2$  satisface la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ .

La figura 33 (b) ilustra el diagrama de fases en el plano  $\mu_F - U_{BF}$  para una densidad bosónica fija de  $\rho_B = 1/4$  e interacciones bosón-bosón y fermión-fermión de  $U_{BB} = 16$  y  $U_{FF} = 6$  respectivamente. Como en la figura 32(b), las regiones en blanco representan las fases superfluidas, mientras que las de color representan las fases aislantes. Al apagar el acoplamiento bosón-fermión se observa la aparición de la fase aislante de Mott trivial, la cual se reduce a medida que se incrementa el acoplamiento  $U_{BF}$  y desaparece en  $U_{BF}^* \approx 7.8$ . Al incrementar el acoplamiento bosón-fermión desde cero los lóbulos conmesurados no triviales surgen desde  $U_{BF}^* \approx 1.4$  y  $0.7$  para  $\rho_F = 3/4$  y  $7/4$  respectivamente. La evolución de estos lóbulos es diferente, pues el gap de carga para  $\rho_F = 3/4$  satura para valores grandes del acoplamiento  $U_{BF}$ , el gap de carga para  $\rho_F = 7/4$  aumenta como función del potencial químico. La fase aislante no conmesurada  $\rho_F = 3/2$  surge desde  $U_{BF}^* \approx 2.1$ , crece monótonamente y tiende a saturarse para valores grandes.

### 6.2. Acoplamiento bosón-fermión atractivo ( $U_{BF} < 0$ )

En la sección anterior se elaboraron diagramas de fases considerando que el término de acoplamiento bosón-fermión era de carácter repulsivo. Ahora la pregunta a responder es ¿Cómo cambian los diagramas fases del mismo sistema si se consideran interacciones bosón-fermión de tipo atractivo? Para dar respuesta a esta pregunta se usarán los mismos valores para los parámetros de interacción bosón-bosón y fermión-fermión que se consideraron en la sección anterior y se explorarán las transiciones de fase superfluido-aislante.

Al fijar la densidad fermiónica en  $\rho_F = 1/2$  y variar la densidad de bosones en forma progresiva en el intervalo  $0 \leq \rho_B \leq 3$  y considerando acoplamientos atractivos bosón-fermión  $U_{BF} = -1$  y  $U_{BF} = -8$ , se obtiene la dependencia de la densidad bosónica  $\rho_B$  con el potencial químico  $\mu_B$ , como se ilustra en la figura 34(a). Al igual que en el caso repulsivo se observa que si el acoplamiento es pequeño ( $U_{BF} = -1$ ), únicamente aparecen las fases aislantes triviales en densidades  $\rho_B$  enteras. Cuando el acoplamiento es  $U_{BF} = -8$ , la física del sistema se vuelve más interesante y se confirma que entre los lóbulos triviales se crean dos estados aislantes independientemente del signo de la interacción bosón-fermión, siendo este hecho una de las conclusiones principales del presente estudio. Para el caso atractivo surgen dos fases aislantes no triviales en las densidades  $\rho_B = 1/4$  y  $\rho_B = 5/4$  que se caracterizan porque el número total de partículas no es conmesurable con el tamaño de la red y cumplen con la relación  $\rho_B - \frac{1}{2}\rho_F = n$ , donde  $n$  toma los valores 0 y 1 respectivamente. Al comparar estos resultados con los obtenidos en el caso repulsivo, se observa que también surgen estados aislantes para las densidades  $\rho_B = 1/2$  y  $\rho_B = 3/2$ , pero ahora su origen físico es diferente. El gap de carga para cada una de estas fases aislantes se presenta en el recuadro de la figura 34(a) como función del tamaño del sistema.

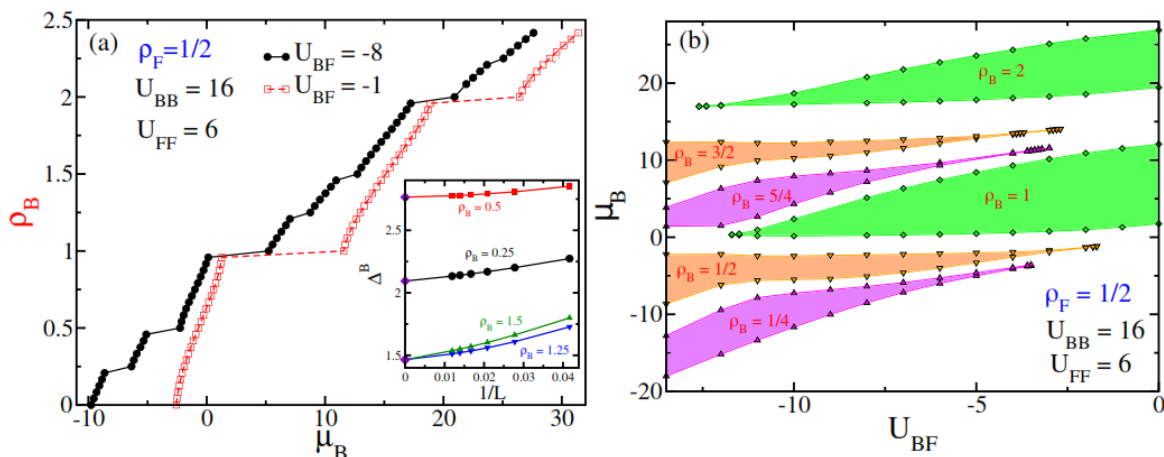


Figura 34: (a) Densidad bosónica como función del potencial químico para un llenado  $\rho_F = 1/2$ . **Recuadro** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las diferentes densidades  $\rho_B$ . (b) Diagrama de fases del estado base en el plano  $\mu_B - U_{BF}$  para un parámetro de interacción entre fermiones fijo de  $U_{FF} = 6$ , interacción bosón-bosón  $U_{BB} = 16$  y densidad fermiónica de  $\rho_F = 1/2$ .

Al fijar la densidad fermiónica en  $\rho_F = 1/3$ , se obtienen cuatro lóbulos no triviales que cumplen

## 6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

con las relaciones de no conmesurabilidad  $\rho_B - \frac{1}{2}\rho_F = n$  y  $\rho_B - \rho_F = n$  que conducen a aislantes en las densidades  $\rho_B = 1/6, 1/3, 7/6$  y  $4/3$ . Para el caso particular  $\rho_F = 1/2$ , se presentan los lóbulos aislantes en  $\rho_B = 1/2$  y  $3/2$ , lo cual podría sugerir que la red y el número total de portadores están conmesurados. Sin embargo, debemos notar que para el caso de  $\rho_F = 1/3$ , los estados aislantes que satisfacen la relación  $\rho_B - \rho_F = n$ , tienen un número total de cargas que es inconmesurable con el tamaño de la red, por lo que nos encontramos con un nuevo caso en el que la fase aislante, es no conmesurada.

En la figura 34(b) se presenta el diagrama de fases en el plano  $\mu_B - U_{BF}$  manteniendo constante los parámetros  $\rho_F = 1/2$ ,  $U_{BB} = 16$  y  $U_{FF} = 6$ . Este diagrama de fases se obtuvo replicando la gráfica 34(a), para otros valores negativos del acoplamiento bosón-fermión. Las regiones en blanco corresponden a estados superfluidos que rodean las fases aislantes que se encuentran en las regiones con color. La gráfica muestra, como a medida que se aumenta la interacción atractiva  $U_{BF}$  el gap de los lóbulos triviales se hace más angosto hasta que desaparece para valores de  $U_{BF}^* \approx -11.7$  y  $-12.6$  para  $\rho_B = 1$  y  $2$  respectivamente. Los lóbulos no triviales surgen para un valor finito del acoplamiento bosón-fermión y su valor es  $U_{BF}^* \approx -3.5, -1.7, -3.4$  y  $-3.0$  para las densidades  $\rho_B = 1/4, 1/2, 5/4$  y  $3/2$  respectivamente.

En la figura 35 se muestra la evolución de la densidad de fermiones  $\rho_F$  como función del potencial químico fermiónico  $\mu_F$ , manteniendo fija la densidad de bosones en  $\rho_B = 1/4$ . Esta figura corresponde a la versión atractiva de la figura 32(a) y como en el caso repulsivo, solo la fase aislante de Mott emerge para valores pequeños del acoplamiento y disminuye a medida que el ancho de los lóbulos no triviales que se presentan en las densidades  $\rho_F = 1/4, 1/2$  y  $5/4$  aumenta. Estos resultados confirman que el acoplamiento bosón-fermión atractivo genera fases aislantes diferentes que las que se presentan para el caso repulsivo. En el recuadro de la figura 35 se presenta el ancho del gap de carga como función del tamaño del sistema para las densidades  $\rho_F$  no triviales.

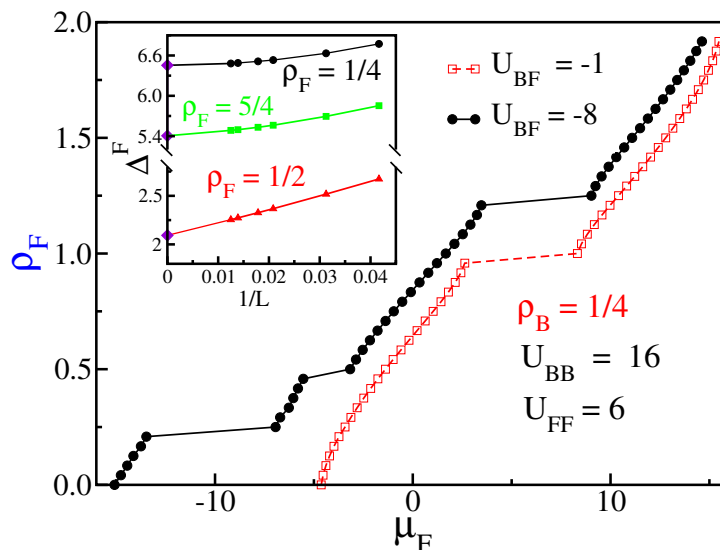


Figura 35: Densidad fermiónica  $\rho_F$  como función del potencial químico  $\mu_F$  para un llenado  $\rho_B = 1/4$ . **Recuadro.** Gap de carga como función del tamaño del sistema para las diferentes densidades  $\rho_F$ .

## 6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

Este mismo procedimiento se realizó para las densidades  $\rho_F = 1/3$  y  $\rho_F = 1/6$  (no se muestran) y se encontró que también es posible determinar las fases aislantes no triviales al considerar el acoplamiento bosón-fermión atractivo, mediante las relaciones  $\rho_B - \rho_F = n + 1$  y  $\rho_B - \frac{1}{2}\rho_F = n + 1$  con  $n = 0, -1$ .

La posibilidad de variar experimentalmente las densidades tanto bosónicas como fermiónicas, estimuló el estudio en este trabajo de un modelo en el cual se considera la densidad de fermiones constante en  $\rho_F = 1$  y un número variable de bosones, examinando los casos de acoplamiento repulsivo y atractivo. Los resultados de este modelo se muestran en la figura 36.

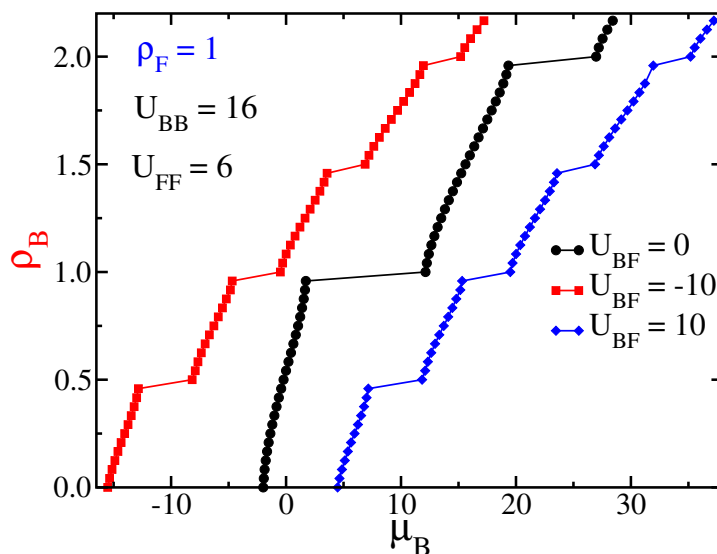


Figura 36: Densidad bosónica  $\rho_B$  como función del potencial químico  $\mu_B$  para acoplamientos bosón-fermión atractivo  $U_{BF} = -10$ , repulsivo  $U_{BF} = 10$  y sin acoplamiento  $U_{BF} = 0$ .

En medio llenado fermiónico sin bosones, aparece solo una fase aislante que corresponde al bien conocido estado aislante de Mott, donde cada uno de los sitios es ocupado por un solo fermión a lo largo de la red. Al adicionar bosones al sistema, pero sin considerar el acoplamiento entre bosones y entre fermiones, se espera que los bosones hagan una transición desde el estado superfluido hasta la fase aislante de Mott con un trans fondo de Mott fermiónico, que toma lugar cuando la densidad de bosones alcanza valores enteros. Esto establece en el sistema la coexistencia de las fases aislantes de Mott bosónicas y fermiónicas como se observa en la figura 36 para  $U_{BF} = 0$ . Cuando se enciende el acoplamiento bosón-fermión se observa que los lóbulos bosónicos triviales se contraen a medida que crece  $U_{BF}$ . Por lo tanto el aislante de Mott bosónico y fermiónico coexisten en el sistema para valores finitos de  $U_{BF}$ . Independientemente del signo de la interacción bosón-fermión, solo emerge un lóbulo no trivial entre los lóbulos bosónicos triviales, es decir, en las densidades  $\rho_B = 1/2$  y  $3/2$ . Esto coincide con las relaciones encontradas para los casos atractivos y repulsivos.

Cuando el parámetro de acoplamiento bosón-fermión es débil y considerando  $\rho_F = \rho_B = 1$ , se encuentra una completa miscibilidad <sup>16</sup>, en la que coexisten las fases aislantes de Mott

<sup>16</sup>Una fase miscible se caracteriza principalmente por un completo solapamiento de las densidades bosónicas

6. FERMIONES CON DOS GRADOS DE LIBERTAD INTERNOS Y BOSONES ESCALARES EN EL LÍMITE “SOFT-CORE”

---

bosónicas y fermiónicas con un bosón y un fermión por sitio, como se observa en la figura 37 para los casos atractivo y repulsivo. Esta fase se ha reportado tanto teórica [28, 56, 151] como experimentalmente [174].

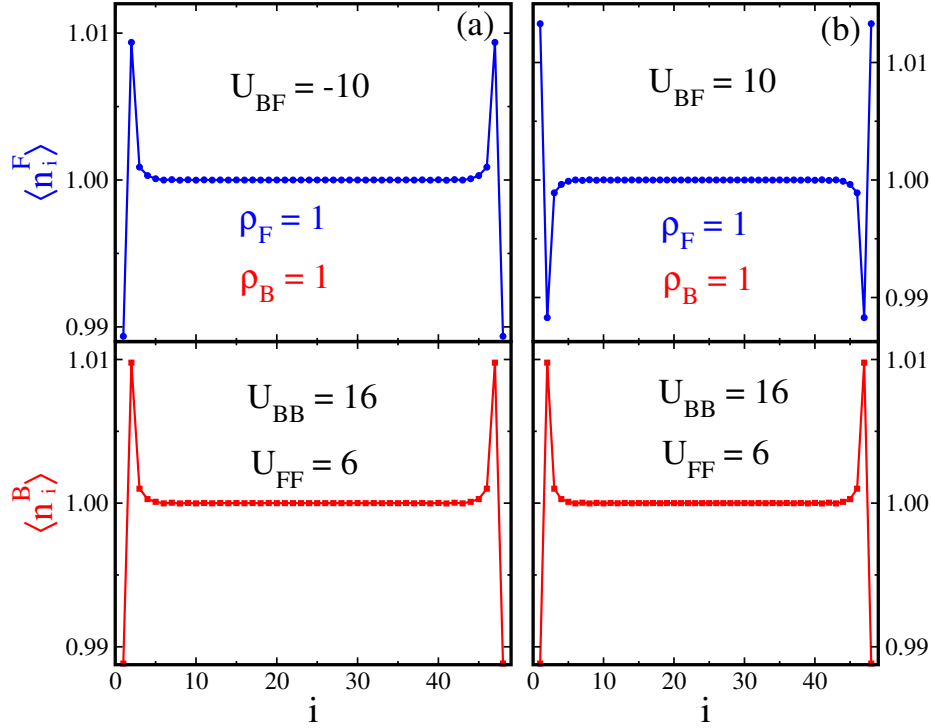


Figura 37: Distribución de fermiones (círculos azules) y bosones (cuadrados rojos) en la red, considerando acoplamiento bosón-fermión repulsivo (a) y atractivo (b). Los parámetros usados son:  $\rho_F = \rho_B = 1$ ,  $U_{BB} = 16$ ,  $U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = \pm 10$ . En ambos paneles se observa que el estado base corresponde a la coexistencia de las fases aislantes de Mott bosónicas y fermiónicas. En ambas figuras las líneas son ayudas visuales.

Al aumentar el acoplamiento  $U_{BF}$  y considerando el caso repulsivo, los fermiones y los bosones ocupan diferentes sitios a lo largo de la red, estableciéndose de esta manera una separación de fases como se ilustra en la figura 38(a) para  $U_{BF} = 20$ .

---

y fermiónicas [179]

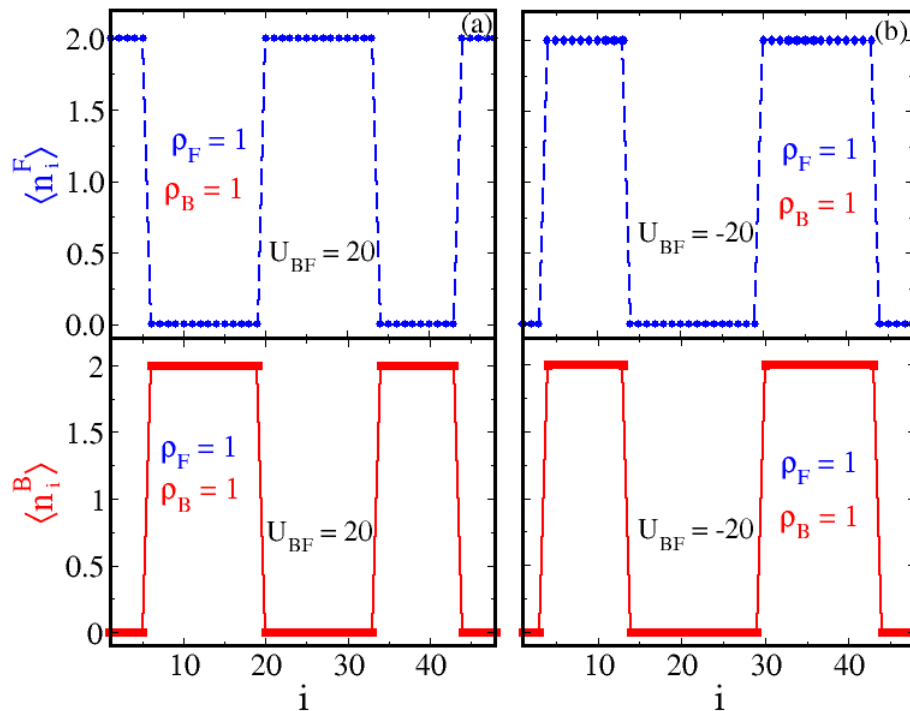


Figura 38: Distribución de fermiones (círculos azules) y bosones (cuadrados rojos) en la red, considerando acoplamiento bosón-fermión repulsivo (a) y atractivo (b). Los parámetros usados son:  $\rho_F = \rho_B = 1$ ,  $U_{BB} = 16$ ,  $U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = \pm 20$ . En ambos paneles se observa que el estado base corresponde a una separación de fase. En ambas figuras las líneas son ayudas visuales.

Para el caso atractivo el estado base de la mezcla, presenta una transición desde el estado aislante de Mott bosónico y fermiónico a un estado de separación de fases para valores grandes del acoplamiento. Esta fase se caracteriza por dominios con o sin portadores como se observa en la figura 38(b).

### 6.3. Conclusiones

En esta sección se estudió por medio del grupo de renormalización de la matriz densidad un sistema conformado por fermiones con espín 1/2 que interactúan con bosones en el límite “soft-core”. Este estudio se realizó para un sistema unidimensional, considerando que en cada uno de los sitios la densidad bosónica se encuentra en el intervalo  $0 \leq \rho_B \leq 3$  y la densidad de fermiones en el intervalo  $0 \leq \rho_F \leq 2$ . Con estas consideraciones el espacio de Hilbert local tiene una dimensión  $d = 16$ . Para tratar el problema con mayor profundidad se estudiaron los casos de acoplamiento bosón-fermión atractivo  $U_{BF} < 0$  y repulsivo  $U_{BF} > 0$ , considerando diferentes densidades bosónicas y fermiónicas para construir los diagramas de fases.

Para el acoplamiento bosón-fermión de tipo repulsivo ( $U_{BF} > 0$ ) y con una densidad fija de fermiones  $\rho_F$ , se encontró la dependencia de la densidad de bosones  $\rho_B$  con el potencial

químico  $\mu_B$  que mostró la aparición de dos fases aislantes no triviales que surgen entre las fases aislantes de Mott triviales a medida que se incrementa desde cero el número de bosones. Estos aislantes satisfacen las relaciones  $\rho_B + \rho_F = n$  y  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = n$  con  $n$  entero. Al aumentar el acoplamiento bosón-fermión, las fases aislantes no triviales emergen a medida que las fases aislantes de Mott desaparecen, estableciendo puntos críticos para cada una de las fases. Estos resultados generalizan los hallazgos previos para átomos polarizados y mezclas de fermiones con dos grados de libertad y bosones escalares en el límite “hard-core”.

Con la expectativa acerca de cómo se verían los resultados anteriores cuando variara la cantidad de fermiones, fijamos la densidad bosónica y encontramos el aislante trivial de Mott y tres aislantes no triviales que cumplían con las relaciones dadas anteriormente.

Para el acoplamiento bosón-fermión de tipo atractivo ( $U_{BF} < 0$ ) y manteniendo fija la densidad de fermiones, se encontraron fases aislantes para densidades bosónicas enteras y fraccionarias, donde la última puede o no ser conmesurada con el tamaño de la red, estableciendo de esta manera una diferencia con el caso repulsivo. Por lo tanto las relaciones que determinan los estados aislantes no triviales para el acoplamiento repulsivo son diferentes al caso “hard-core” y cumplen con las relaciones  $\rho_B - \rho_F = n - 1$  y  $\rho_B - \frac{1}{2}\rho_F = n - 1$  con  $n = 0, \pm 1$ .

En esta sección también se encontró que para un acoplamiento bosón-fermión finito coexisten los estados aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos en el sistema.

En la siguiente capítulo se estudiará un sistema unidimensional, constituido por fermiones con espín  $1/2$  que interactúan con bosones sin espín en el límite “soft-core” y que se encuentra confinado en un potencial armónico. Se construirán los perfiles de densidad a temperatura cero, considerando interacciones de tipo repulsivo.



# 7

## MEZCLA DE BOSONES Y FERMIONES CONFINADOS EN UN POTENCIAL ARMÓNICO

*Luego de explorar y caracterizar las fases aislantes que surgen de una mezcla Bose-Fermi confinada en una red óptica unidimensional, es necesario considerar, que intrínsecamente estas mezclas en los montajes experimentales se encuentran confinadas en potenciales armónicos, es por ello que vale la pena preguntarse, ¿Qué sucede con un sistema conformado por fermiones con dos grados de libertad internos que interactúan con bosones escalares en el límite soft-core, cuando la mezcla se confina en un potencial de tipo armónico?*

En los capítulos anteriores se estudiaron las mezclas Bose-Fermi compuestas por fermiones con dos grados de libertad internos y bosones sin espín modelados en los límites “hard-core” y “soft-core”. Como principales resultados se encontraron y determinaron las condiciones que se deben cumplir para el surgimiento de nuevas fases aislantes y se caracterizaron las transiciones superfluido-aislante que se presentan en estos sistemas, considerando que el potencial de confinamiento externo es uniforme (y tomado como cero). Sin embargo, experimentalmente los átomos experimentan un potencial de confinamiento adicional al potencial de la red óptica, por lo cuál, la pregunta a resolver ahora es, ¿Qué sucede experimentalmente con los montajes de mezclas Bose-Fermi confinadas en una pequeña región del espacio? Esta pregunta resulta relevante puesto que para disminuir la velocidad y por tanto la temperatura de un gas de átomos, es necesario confinar el sistema. Para dar respuesta a esta pregunta, primero se revisaran por separado los gases cuánticos degenerados compuestos por bosones y por fermiones confinados en trampas armónicas, para al final abordar el problema de las mezclas Bose-Fermi.

Uno de los confinamientos más sencillos que se ha estudiado ampliamente por la posibilidad de realizarlo experimentalmente corresponde a trampas armónicas, debido a que cualquier potencial puede aproximarse a un oscilador armónico en un mínimo local [153] y a que como consecuencia del confinamiento, las diferentes fases de los sistemas de muchos cuerpos coexisten al interior de la trampa [21].

Intrínsecamente los gases cuánticos son no homogéneos debido al potencial de confinamiento externo adicional, que generalmente es aproximadamente armónico para trampas dipolares, pero también es posible diseñar sistemas cuasi homogéneos [165]. Los sistemas atrapados en trampas armónicas presentan estados aislantes que se caracterizan por surgir en densidades enteras y por pequeñas fluctuaciones en el número átomos. Estos estados aislantes se encuentran rodeados por regiones espaciales donde las fluctuaciones en el número de partículas es alto y las densidades no son enteras, es decir, regiones en estados superfluidos. Este comportamiento se ha observado experimentalmente [154, 155].

Existen algunas diferencias entre los sistemas que se confinan en potenciales armónicos y los

modelos homogéneos. Por ejemplo, los sistemas atrapados armónicamente no presentan gap, ni siquiera en el dominio de Mott [156], debido a que este estado coexiste con la fase superfluida. Otra de las diferencias se presenta en la visibilidad de los patrones de interferencia, que se producen por la distribución de densidad de los gases bosónicos, luego de una expansión libre [157]. Esto se debe a que en los sistemas homogéneos, la visibilidad de la interferencia es función monótona de la razón entre los elementos de la matriz de tunelamiento  $t$  y la energía de interacción en cada uno de los sitios de la red  $U$  ( $t/U$ ), en el modelo confinado se encuentran tanto cambios repentinos de la pendiente como un comportamiento no monótono, debido a las correlaciones entre dominios superfluidos desconectados.

Los estudios teóricos usados en la investigación de las partículas bosónicas confinadas en potenciales armónicos, han reportado la transición de fase desde el aislante de Mott al estado superfluido y una fase en la cual la densidad local de bosones cambia de sitio en sitio [21]. También se ha reportado la coexistencia de diferentes regiones con densidad entera y no entera [160] y se ha encontrado que los estados aislantes surgen para densidades globales menores que las reportadas para los sistemas homogéneos; estos estados se pueden manipular mediante los diferentes parámetros del sistema [161, 162, 163, 164]. Como resultado se forman regiones en el espacio con diferentes fases, por ejemplo, fases tipo líquido de Fermi, fases aislantes de banda y fases aislantes de Mott, lo que conduce a perfiles de densidad con una estructura conocidas como “wedding cake” [166]. Un ejemplo experimental de este tipo de estructuras se ilustra en la figura 39, donde se observa la transición desde el estado metálico al aislante de Mott al variar la interacción fermión-fermión.

## 7. MEZCLA DE BOSONES Y FERMIONES CONFINADOS EN UN POTENCIAL ARMÓNICO

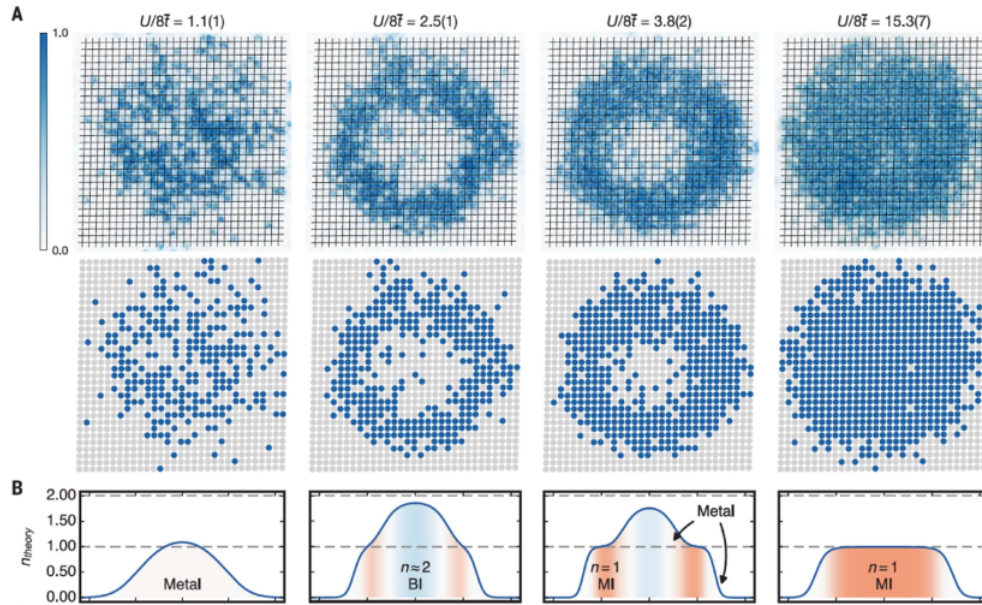


Figura 39: Imágenes experimentales de isótopos fermiónicos de  ${}^6\text{Li}$  confinados en una red cuadrada. Cada una de las imágenes muestra cambios drásticos en la distribución de ocupación al incrementar la interacción entre fermiones  $U_{FF}$  (en la gráfica  $U$ ) en la razón  $U/8\bar{t}$ , manteniendo constante el número de átomos. En la expresión anterior  $\bar{t}$  representa la energía de salto promedio de los fermiones  $t_f$ . La primera fila son las imágenes experimentales, mientras que la tercera fila son los perfiles de densidad para los parámetros experimentales. Para  $U/8\bar{t} = 1.1$  se observa un comportamiento metálico donde hay una gran variación de la ocupación en cada uno de los sitios. En  $U/8\bar{t} = 2.5$ , se observa la coexistencia entre las fases metálicas y aislantes de banda en los extremos y en el centro del potencial. Cuando  $U/8\bar{t} = 3.8$ , se observa la estructura “wedding cake” en la cual coexisten las fases metálica, aislante de Mott y en los extremos del potencial con un número de ocupación igual cero la fase aislante de banda. Para interacciones fuertes  $U/8\bar{t} = 15.37$  se observa una fase aislante de Mott. Figura tomada de [166].

Uno de los fenómenos que no se pueden observar en los confinamientos de tipo armónico y que se presentan en trampas anarmónicas, es la resonancia inducida por confinamiento (RIC), que se presenta para sistemas en bajas dimensiones y que puede entenderse como un tipo novedoso de resonancia Feshbach [165]. Las trampas anarmónicas presentan mezclas no lineales, que son análogas a los efectos de frecuencias mezcladas encontradas en óptica no lineal, proporcionando nuevas oportunidades para el estudio en física atómica, fotónica y acústica [167].

Teóricamente se ha propuesto confinar las partículas en un potencial no homogéneo, conocido como confinamiento no diagonal. Para este sistema el parámetro de tunelamiento  $t$  no es constante y se anula en los extremos del sistema, haciendo que los términos del Hamiltoniano que se encuentran fuera de la diagonal no sean constantes a lo largo de la red.

### 7.1. Mezclas Bose-Fermi en potenciales armónicos

Las mezclas Bose-Fermi confinadas en potenciales armónicos tuvieron su origen cuando se intentó confinar y enfriar gases fermiónicos mediante la técnica de enfriamiento evaporativo, que resultó ineficiente debido al principio de exclusión de Pauli. La solución a este inconveniente se logró mediante la técnica de enfriamiento simpático, que utiliza mezclas Bose-Fermi confinadas en potenciales armónicos. En esta técnica se disminuye la temperatura de los fermiones por medio de enfriamiento evaporativo y luego se enfrían aún más por contacto térmico con el gas de bosones que se encuentra en el estado condensado [14, 169, 170].

Dentro de las mezclas Bose-Fermi confinadas en potenciales armónicos que se han reportado experimentalmente se encuentran: mezclas entre isótopos bosónicos de  $^{87}\text{Rb}$  con átomos fermiónicos de  $^{40}\text{K}$  [171, 172], mezclas entre isótopos fermiónicos de  $^{173}\text{Yb}$  e isótopos bosónicos de  $^{174}\text{Yb}$  considerando el acoplamiento bosón-fermión de tipo repulsivo, mezclas entre isótopos fermiónicos de  $^{173}\text{Yb}$  con isótopos bosónicos de  $^{170}\text{Yb}$  para interacción bosón-fermión de tipo atractivo [21],  $^7\text{Li} - ^6\text{Li}$  [170],  $^{39}\text{K} - ^{40}\text{K}$  y  $^{41}\text{K} - ^{40}\text{K}$  [173]. Uno de los resultados más interesantes que se han encontrado con mezclas entre átomos bosónicos de  $^{41}\text{K}$  e isótopos fermiónicos de  $^6\text{Li}$ , es la separación de fases. Este fenómeno se presenta en la figura 40(a), por medio de los perfiles de densidad para la mezcla, considerando diferentes valores del potencial de acoplamiento bosón-fermión. En la figura 40(b) se observa una pequeña caída en el perfil de densidad de la columna radial de la nube fermiónica, indicando una reducción de la superposición entre los fermiones y los bosones.

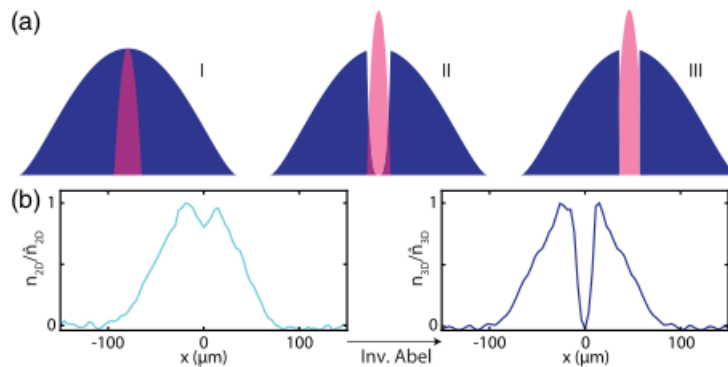


Figura 40: Surgimiento de la separación de fases en mezclas con confinamiento armónico. (a). Representación esquemática de los perfiles de densidad bosónico (magenta) y fermiónico (azul) para diferentes valores de acoplamiento bosón-fermión. En I se observa que para un parámetro de interacción pequeño hay una completa superposición de los perfiles de densidad de las dos especies. Al aumentar el parámetro de interacción (II), la densidad de los fermiones en el centro de la trampa disminuye y con esto la superposición entre las especies. Para una interacción fuerte (III), los bosones permanecen en el centro del potencial, mientras que los fermiones se ubican en la periferia del potencial de confinamiento. (b). Resultados experimentales de la densidad de columna normalizada. Figura tomada de [174].

Los estudios teóricos para sistemas unidimensionales conformados por bosones y fermiones sin espín con masas aproximadamente iguales, han encontrado que al disminuir el potencial

## 7. MEZCLA DE BOSONES Y FERMIONES CONFINADOS EN UN POTENCIAL ARMÓNICO

de confinamiento los bosones se expanden, mientras que los fermiones tienden a ubicarse en los extremos del potencial o exhiben un comportamiento delocalizado en toda la red [179].

Considerando los anteriores resultados, se procederá en este capítulo a extender los estudios de las mezclas Bose-Fermi confinadas en potenciales armónicos, investigando una mezcla de fermiones con dos grados de libertad internos<sup>17</sup> que interactúan con bosones escalares en el límite “soft-core”. Una representación del modelo se ilustra en la figura 41.

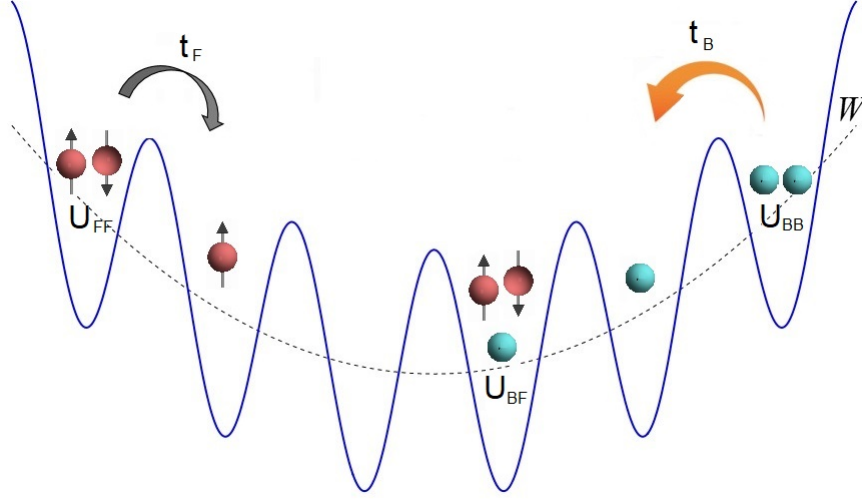


Figura 41: Modelo del Hamiltoniano Bose-Fermi-Hubbard para el caso confinado, considerando dos grados de libertad internos fermiónicos (círculos rojos) y bosones (círculos magenta) en el límite “soft-core”. Los parámetros de interacción bosón-bosón, fermión-fermión y bosón-fermión se representan en la figura por medio de  $U_{BB}$ ,  $U_{FF}$  y  $U_{BF}$  respectivamente.  $W$  representa la profundidad del pozo de confinamiento.

Para llevar a cabo este estudio se incluye en el Hamiltoniano de Bose-Fermi-Hubbard (ecuación (22)) un término de confinamiento externo igual para bosones y para fermiones, y que se expresa de la forma  $W \sum_i \left(i - \frac{L}{2}\right)^2 \hat{n}_i^B$  y  $W \sum_{i,\sigma} \left(i - \frac{L}{2}\right)^2 \hat{n}_{i,\sigma}^F$  respectivamente, donde  $W$  es la amplitud de la trampa. De esta manera se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BF} = & -t_B \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c \right) + \frac{U_{BB}}{2} \sum_i \hat{n}_i^B (\hat{n}_i^B - 1) - t_F \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left( \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} + h.c \right) \\ & + \frac{U_{FF}}{2} \sum_{i,\sigma \neq \sigma'} \hat{n}_{i,\sigma}^F \hat{n}_{i,\sigma'}^F + W \sum_{i,\sigma} \left( i - \frac{L}{2} \right)^2 \left( \hat{n}_i^B + \hat{n}_{i,\sigma}^F \right) + U_{BF} \sum_i \hat{n}_i^B \hat{n}_i^F. \end{aligned} \quad (48)$$

En la investigación de este modelo se considera que el número máximo de bosones escalares por sitio es  $n_{max}^B = 3$  e interactúan con fermiones con dos grados de libertad internos, por

<sup>17</sup>Debido a que se están considerando partículas fermiónicas, cuyo espín es semientero  $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ , es posible considerar 2, 4, 6... grados de libertad internos [240] respectivamente.

lo que la densidad de fermiones por sitio se encuentra en el intervalo  $0 \leq \rho_F \leq 2$ . Debido a la posibilidad experimental de confinar gases cuánticos en potenciales armónicos con hasta un centenar de sitios, se considerará que el sistema en estudio se encuentra confinado en un potencial armónico con  $L = 60$  sitios.

Para caracterizar el estado base del sistema se utilizarán cantidades locales como el número local de bosones (fermiones)  $\langle \hat{n}_i^{B(F)} \rangle = \langle \sum_{\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}^{B(F)} \rangle$ , y el número total de átomos por sitio  $\langle \hat{n}_i^T \rangle = \langle \hat{n}_i^B + \sum_{\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}^F \rangle$ . El estado base del sistema se caracterizará por medio de la compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B(F)} = \partial \rho_i^{B(F)} / \partial \mu_i^{B(F)}$ . En las regiones donde  $\kappa_i^{B(F)} = 0$ , el estado base del sistema se encuentra en una fase aislante de banda; en las regiones donde la compresibilidad es constante y diferente de cero, el estado base es un aislante de Mott, y si la compresibilidad fluctúa fuertemente de sitio en sitio, el estado base se encuentra en una fase superfluida. Esta cantidad se puede medir experimentalmente midiendo la respuesta del sistema a un cambio en el confinamiento externo [241].

## 7.2. Efecto de la amplitud de la trampa.

La exploración del estado base del sistema en estudio, se realiza inicialmente considerando interacciones inter e intra especies de carácter repulsivo ( $U_{BB} = 8, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ ), fijando la densidad global de bosones  $\rho_B$  y de fermiones  $\rho_F$  en el sistema y variando la amplitud de la trampa. Debido a que se está trabajando con un confinamiento armónico, únicamente se debe considerar el conjunto de parámetros que confinen a todas las partículas. Los resultados para esta exploración se presentan en la figura 42.

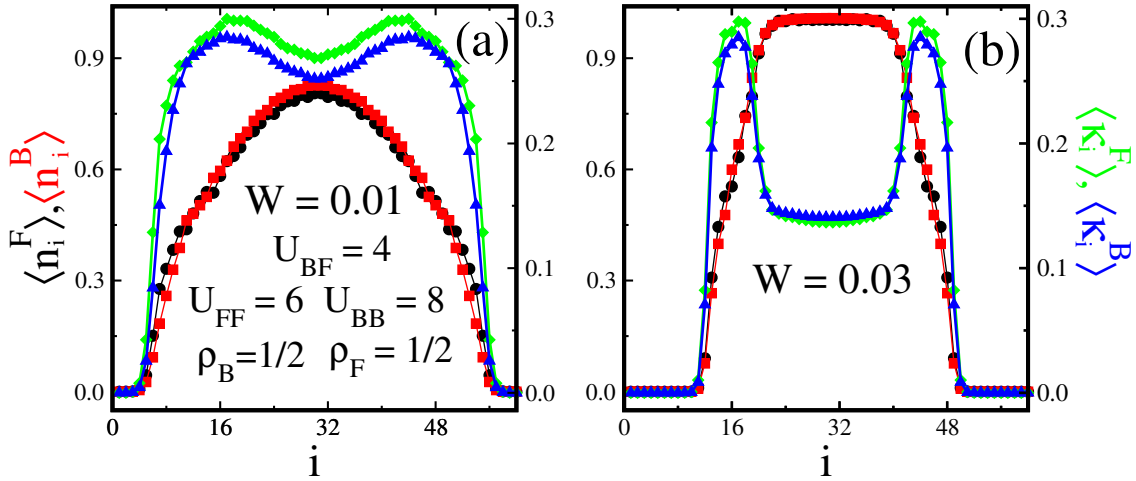


Figura 42: Distribución de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para diferentes potenciales de confinamiento. (a)  $W = 0.01$  y (b)  $W = 0.03$ . En este modelo se consideran interacciones repulsivas  $U_{BB} = 8, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ , con densidades globales  $\rho_F = \rho_B = 1/2$ . El número local de bosones (fermiones)  $\langle n_i^{B(F)} \rangle$  se representa por medio de cuadrados rojos (punto negro). La compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B(F)}$  se representa por medio de triángulos azules (diamantes verdes).

Al considerar el conjunto de parámetros antes escogido para un potencial de confinamiento de  $W = 0.01$ , figura 42(a), se encuentra que la ocupación de los bosones y de los fermiones entre los sitios  $0 \lesssim i \lesssim 4$  ( $54 \lesssim i \lesssim 60$ ) en los extremos de la red es cero ( $\langle n_i^{B,(F)} \rangle = 0$ ), al igual que la compresibilidad bosónica y fermiónica  $\kappa_i^{B,(F)} = 0$ . Esto indica que las partículas se encuentran confinadas dentro del pozo y que en los extremos del potencial existe una región aislante de banda bosónica y fermiónica. Al movernos desde los extremos de la cadena al centro de la trampa, se observa que el número de ocupación bosónico y fermiónico se incrementa desde cero a partir de  $i \approx 4$ , exhibiendo un incremento monótono cerca al centro de la trampa como se espera para un potencial armónico. También se observa que la compresibilidad pasa de ser constante ( $\kappa_i^{B,(F)} = 0$ ) en los extremos de la red, a ser variable, indicando que el estado base del sistema se encuentra en un estado superfluido. Este comportamiento también se evidencia con un número de ocupación ( $\langle n_i^{B,(F)} \rangle$ ) variable de ambas especies en cada sitio. Como conclusión para este valor del potencial de confinamiento, se encuentra que el estado base se encuentra compuesto por una coexistencia de regiones aislantes de banda sin partículas y regiones superfluidas bosónicas y fermiónicas en el centro de la cadena.

Cuando la profundidad del pozo de confinamiento tiene un valor de  $W = 0.03$ , se observa en los extremos de la cadena un incremento del aislante de banda, pues este pasa de estar entre los sitios  $0 \lesssim i \lesssim 4$  a estar entre  $0 \lesssim i \lesssim 12$ , lo cual indica un mayor confinamiento del sistema como se evidencia en la figura 42(b). Luego de esta región el número de ocupación bosónico y fermiónico nuevamente se incrementa monótonamente entre los sitios  $12 \lesssim i \lesssim 21$  y  $\kappa_i^{B,(F)}$  es variable en cada uno de los sitios, indicando de esta manera una región superfluida. Alrededor del centro de la trampa la ocupación bosónica y fermiónica es de un portador por sitio  $\langle n_i^{B,(F)} \rangle = 1$ , lo cual corresponde a un dominio en el que coexisten las regiones aislantes de Mott bosónica y fermiónica. La región aislante de Mott se verifica por medio de la compresibilidad de cada una de las especies  $\kappa_i^{B,(F)}$ , las cuales exhiben un comportamiento constante y diferente de cero.

Como conclusión para este valor existe una coexistencia de estados aislantes de banda en los extremos de la cadena, estados superfluidos y aislantes de Mott para ambos portadores en el centro del potencial de confinamiento. Para valores superiores de  $W$ , las partículas se mantienen confinadas y se destruye el estado aislante de Mott. El estado base se constituye por la coexistencia de estados aislantes de banda y estados superfluidos. La variación del potencial de confinamiento  $W$ , hace que el estado base experimente diferentes cambios de estado. Uno de los resultados más relevantes que se han encontrado en este estudio es la coexistencia de aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos en el centro de la trampa, que ya se ha encontrado en el caso homogéneo.

### 7.3. Efecto del cambio en el número de bosones y de fermiones

En el estudio anterior se encontró que cuando la profundidad del pozo de confinamiento es de  $W = 0.03$ , surge un estado particular en el que coexiste un aislante de Mott bosónico y un aislante de Mott fermiónico en el centro de la trampa. El siguiente paso es conocer cómo la variación de los diferentes parámetros alteran este estado particular. La primera

## 7. MEZCLA DE BOSONES Y FERMIONES CONFINADOS EN UN POTENCIAL ARMÓNICO

consideración es variar el número de bosones manteniendo fijas las interacciones en  $U_{BF} = 4$ ,  $U_{BB} = 8$  y  $U_{FF} = 6$  y la densidad global fermiónica  $\rho_F = 1/2$  ( $N_F = 30$ ). En la figura 43(a) se observa que cuando la densidad de bosones es  $\rho_B = 1$  ( $N_B = 60$ ) y debido al acoplamiento bosón-fermión, los bosones tienden a ocupar una mayor región en la trampa. También se evidencia que en los extremos del potencial, los fermiones tienden a estar más confinados que los bosones, exhibiendo un aislante de banda que se extiende desde  $0 \lesssim i \lesssim 12$ , mientras que el aislante de banda bosónico se extiende entre  $0 \lesssim i \lesssim 7$ . Este comportamiento da origen a una separación de fases entre los sitios  $7 \lesssim i \lesssim 12$ , donde no se tienen fermiones pero si un número de ocupación bosónico variable. Para esta densidad bosónica se manifiesta una región aislante de Mott fermiónica, pero debido a la competencia entre el potencial de confinamiento y el acoplamiento bosón-fermión, para el sistema es energéticamente más favorable tener una alta ocupación de bosones en el centro de la trampa, destruyendo la posibilidad de tener un aislante de Mott bosónico.

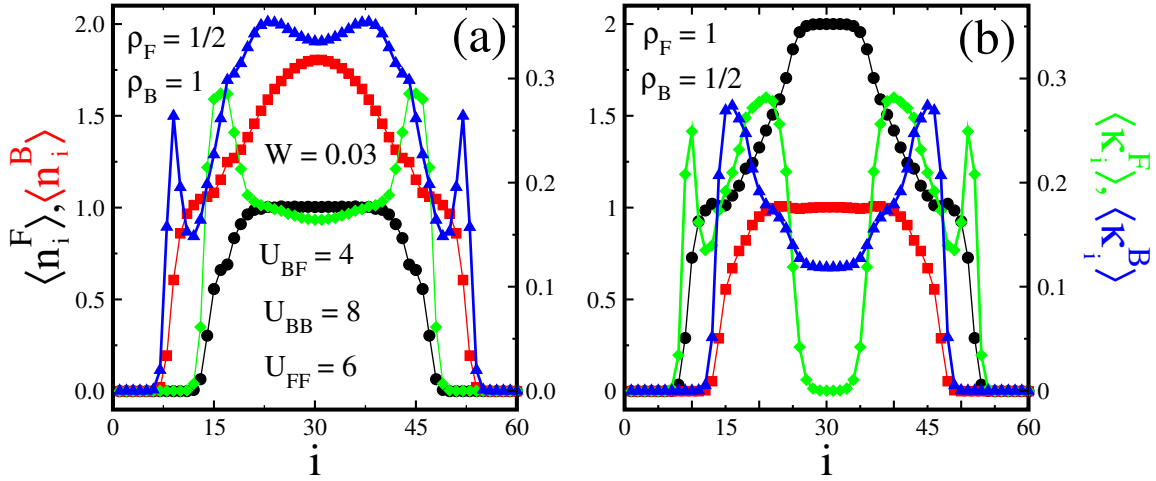


Figura 43: Distribución de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para un potencial de confinamiento  $W = 0.03$ , manteniendo constante las interacciones en  $U_{BB} = 8$ ,  $U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ . (a)  $\rho_F = 1/2$  y  $\rho_B = 1$ . (b)  $\rho_F = 1$  y  $\rho_B = 1/2$ . El número local de bosones (fermiones)  $\langle n_i^{B,(F)} \rangle$  se representa por medio de cuadrados rojos (puntos negros). La compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B,(F)}$  se representa por medio de triángulos azules (diamantes verdes).

Para una densidad global de fermiones  $\rho_F = 1$  y  $\rho_B = 1/2$ , se observa que en el centro de la cadena se genera un aislante de banda fermiónico que se caracteriza por tener dos partículas por sitio  $\langle n_i^F \rangle = 2$  y una compresibilidad constante e igual a cero  $\kappa_i^F = 0$ , que coexiste con un aislante de Mott bosónico con una partícula por sitio  $\langle n_i^B \rangle = 1$  y una compresibilidad constante y diferente de cero  $\kappa_i^B \neq 0$  como se ilustra en la figura 43 (b). En esta figura se hace evidente una región de separación de fases entre los sitios  $8 \lesssim i \lesssim 12$ , la cual es diferente del caso anterior, permitiendo evidenciar la riqueza de estados que pueden surgir al variar las densidades. Para este caso no hay bosones y el número de ocupación fermiónico es diferente de cero.



#### 7.4. Efecto del cambio en los parámetros de interacción

Para entender el efecto de las interacciones, en esta sección se fijaran las densidades bosónicas y fermiónicas en  $\rho_F = \rho_B = 1/2$  al igual que la profundidad del pozo de confinamiento en  $W = 0.03$ . En la figura 44(a) se mantienen constantes las interacciones  $U_{BB} = 8$  y  $U_{FF} = 6$  y se fija el acoplamiento bosón-fermión en  $U_{BF} = 7.9$ . Para este conjunto de parámetros se encuentra, que en los extremos de la trampa existe un mayor confinamiento de los fermiones con respecto a los bosones, lo cual da lugar a una completa separación de fases entre los sitios  $10 \lesssim i \lesssim 19$ , donde los fermiones se encuentran en un aislante de banda, mientras que los bosones se encuentran en un estado superfluido. Este estado es nuevo en el presente estudio, pues no se había encontrado en las anteriores exploraciones. En el centro de la trampa se establece una separación de fases, que a diferencia de la anterior se caracteriza por dos fermiones en cada sitio  $\langle n_i^F \rangle = 2$  y cero bosones  $\langle n_i^B \rangle = 0$ . Las compresibilidades bosónicas y fermiónicas en esta región se hacen cero  $\kappa_i^{B,(F)} = 0$ , indicando que tanto los bosones como los fermiones se encuentran en un estado aislante de banda. Concluimos que al incrementar la interacción boson-fermión se destruye la coexistencia de aislantes de Mott bosónico y fermiónico (ver figura 42(b)), y se generan nuevos estados.

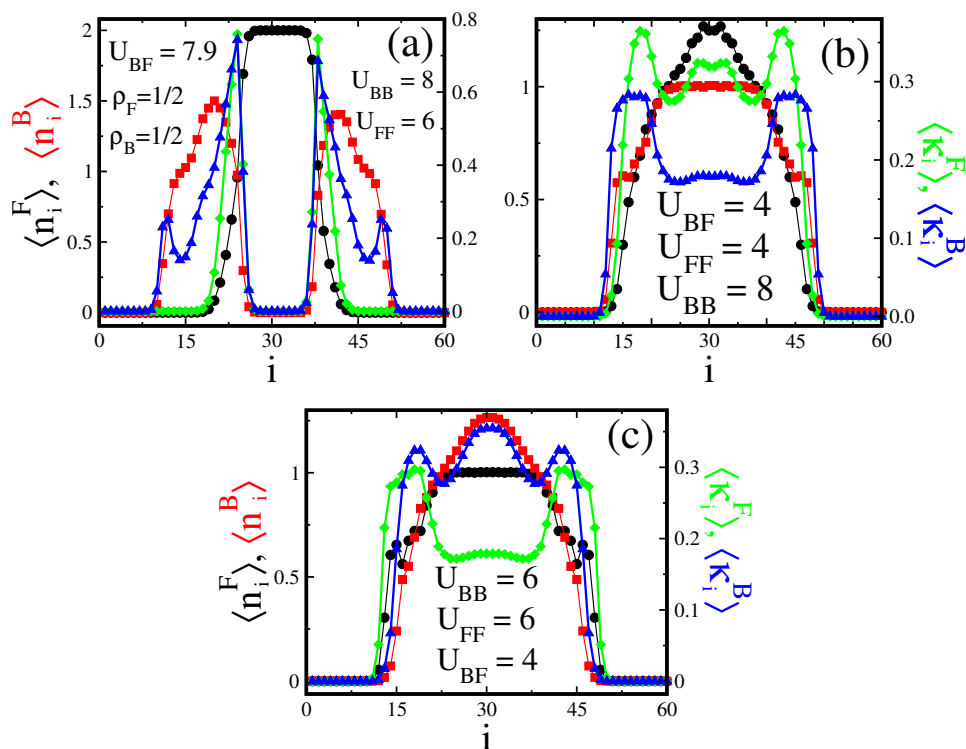


Figura 44: Distribución de partículas bosónicas y fermiónicas a lo largo de la red para diferentes parámetros de acoplamiento repulsivo fijando las densidades en  $\rho_B = \rho_F = 1/2$  y la profundidad del pozo en  $W = 0.03$ . (a).  $U_{BB} = 8, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 7.9$ . (b).  $U_{BB} = 8, U_{BF} = 4$  y  $U_{FF} = 4$ . (c).  $U_{BB} = 6, U_{FF} = 6$  y  $U_{BF} = 4$ . El número local de bosones (fermiones)  $\langle n_i^{B,(F)} \rangle$  se representa por medio de cuadrados rojos (punto negro). La compresibilidad local para bosones (fermiones)  $\kappa_i^{B,(F)}$  se representa por medio de triángulos azules (diamantes verdes).

Ahora se quiere explorar lo que sucede con el sistema cuando la interacción fermión-fermión toma el valor  $U_{FF} = 6$  manteniendo constantes las interacciones  $U_{BB} = 8$  y  $U_{BF} = 4$  como se observa en la figura 44(b). Al igual que en la figura 42(b), tanto el número de ocupación como la compresibilidad bosónica y fermiónica son cero en los extremos de la trampa (entre  $0 \lesssim i \lesssim 12$ ), indicando que ambas especies se encuentran en una región aislante de banda. Entre los sitios  $12 \lesssim i \lesssim 23$  el número de ocupación bosón fermión crece de forma monótona y la compresibilidad es variable, lo cual caracteriza a las fases superfluidas. La ocupación de fermiones en el centro de la trampa disminuye, lo que conlleva a un aumento de la ocupación bosónica en esta región y da origen a una coexistencia entre una región superfluida fermiónica y un dominio aislante de Mott con una ocupación de un bosón por sitio en el centro de la trampa, destruyéndose la coexistencia entre el aislante de Mott bosónico y fermiónico en el centro de la trampa. Debido a que los bosones se acumulan en esta región y a la interacción repulsiva bosón-fermión y bosón-bosón, éstos tienden a ocupar una mayor región al interior del potencial.

Por último se explorarán los cambios en el sistema al variar la interacción bosón-bosón dejando constantes todos los otros parámetros (figura 44(c)). Para  $U_{BB} = 6$  se observa que en los extremos de la trampa, entre  $0 \lesssim i \lesssim 12$  ambas especies se encuentran en una fase aislante de banda. Entre  $12 \lesssim i \lesssim 23$  tanto bosones como fermiones se encuentran en un dominio superfluido y en el centro de la cadena la ocupación promedio de los fermiones es uno, presentando una compresibilidad constante, lo cual establece la presencia de una región aislante de Mott fermiónica que coexiste con una dominio superfluido bosónica con una ocupación mayor que uno.

Al comparar los resultados obtenidos en la figura 44 con los resultados de la figura 42(b), se observa que al variar la interacción bosón-fermión de  $U_{BF} = 4$  a  $U_{BF} = 6$ , los fermiones pasan de un estado aislante de Mott a un aislante de banda, destruyendo el aislante de Mott bosónico y también el fermiónico, haciendo que los bosones se localicen en los extremos del potencial en un estado superfluido. Para el caso del cambio en la interacción entre fermiones desde  $U_{FF} = 6$  a  $U_{FF} = 4$ , se observa que debido a la menor interacción entre fermiones, estos tienden permanecer en un estado superfluido en el centro de la trampa, mientras que se mantiene el estado aislante de Mott bosónico. Al variar la interacción entre bosones desde  $U_{BB} = 8$  a  $U_{BB} = 6$ , los fermiones tienden a permanecer en el estado aislante de Mott y debido a la menor interacción entre bosones, surge un estado superfluido para los bosones en el centro de la trampa.

## 7.5. Conclusiones

En este capítulo se estudió el estado base de un sistema constituido por fermiones con espín  $1/2$  que interactúan con bosones escalares en el límite “soft-core”. Esta mezcla se encuentra confinada en un potencial armónico unidimensional igual para bosones y fermiones. Se consideró una cadena de  $L = 60$  sitios y que en cada sitio hay máximo tres bosones y dos fermiones con diferente espín, por lo que el espacio de Hilbert de un sitio tiene una dimensión  $d = 16$  como se ilustra en el cuadro 8 del capítulo 6. En este estudio se variaron los parámetros de interacción, la densidad de partículas de cada una de las especies y el potencial de confina-

miento. Se encontró que el estado fundamental se encuentra compuesto por la coexistencia de estados aislantes de banda, regiones de separación de fases, coexistencia de aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos, regiones donde coexisten fases aislantes de Mott de una especie con estados superfluidos del otro portador. También se puede concluir que la coexistencia de aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos alrededor del centro de la trampa, se puede obtener al variar los diferentes parámetros del sistema. Por último se observó la generación de diversos tipos de separación de fases donde la ocupación de bosones era cero y en otros que la ocupación de fermiones era cero. Esto permite concluir que este confinamiento presenta regiones de no miscibilidad.

Los resultados presentados en este capítulo son debidos a una pequeña exploración del modelo en cuestión, que puede ser ampliada a diversos conjuntos de parámetros, con lo que se espera una física más rica e interesante.

Es importante tener en cuenta que los parámetros del modelo de Hubbard  $U_{BB}, U_{FF}, U_{BF}, t_B$  y  $t_F$ , pueden ser controlados experimentalmente [93], por ejemplo, las interacciones boson-boson y boson-fermion, se controlan variando la profundidad de los patrones de interferencia de la red óptica, la longitud de onda del laser y las longitudes de dispersión  $a_{BB}$  y  $a_{BF}$ , que a su vez se pueden ajustar por medio de resonancia Feshbach. La relación entre las masas de las diferentes especies, se puede ajustar variando la profundidad de la red, lo que permite tener control sobre el hopping  $t_B$  y  $t_F$ . Debido a esto es posible ajustar de forma razonable los parámetros a las escalas de energía trabajadas en esta investigación, considerando por ejemplo sistemas conformados por isótopos bosónicos y fermiónicos con masas similares, como por ejemplo:  ${}^6\text{Li} - {}^7\text{Li}$ [14],  ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ [15],  ${}^{173}\text{Yb} - {}^{174}\text{Yb}$  [21] y  ${}^{40}\text{K} - {}^{41}\text{K}$ [242].

Para el caso de las mezclas Bose-Fermi conformadas por  ${}^{173}\text{Yb} - {}^{174}\text{Yb}$  se consideran longitudes de dispersión  $a_{FF} = 10.55nm$ ,  $a_{BB} = 5.55nm$  y una longitud de dispersión  $a_{BF} = 7.34nm$  con una constante de red de 266nm [21].

# 8

## CONCLUSIONES

Las realizaciones experimentales con mezclas Bose-Fermi han permitido observar transiciones de fase bosónicas y fermiónicas desde el estado superfluido a la fase aislante de Mott [33, 36, 37, 38, 59]. También han permitido generar partículas compuestas, separación de fases [21] e investigar las longitudes de dispersión elástica usando isótopos de  $^{173}\text{Yb}$  y  $^7\text{Li}$  [23].

Motivados por las investigaciones experimentales y los estudios teóricos previos, se estudió en este trabajo mediante el Hamiltoniano de Bose-Fermi-Hubbard (HBFH), un modelo que considera únicamente dos grados de libertad internos para fermiones, que interactúan con bosones escalares considerando el límite “hard-core” y “soft-core”. Como parte del estudio también se consideró que el sistema con bosones en el límite “soft-core” puede ser confinado en un potencial armónico. La solución aproximada para el HBFH se encontró mediante la técnica del grupo de renormalización de la matriz densidad.

Los hallazgos en los modelos investigados en este trabajo son:

1. Mezcla entre fermiones con espín  $1/2$  y bosones en el límite “hard-core”. Considerando diferentes densidades fermiónicas y variando los parámetros de interacción fermión-fermión y bosón-fermión se determinó lo siguiente:
  - a) En medio llenado fermiónico ( $\rho_F = 1$ ) se halló un único estado aislante que cumple con la relación  $\rho_B = 1 - \frac{1}{2}\rho_F$  y presenta una transición de fase que es función del acoplamiento entre partículas  $U_{BF}$ . La transición se da desde un aislante de Mott con un fermión por sitio y un bosón compartido por dos sitios, a un estado aislante de banda intercalado, donde cada celda unitaria se encuentra constituida por dos sitios: uno con dos fermiones y el otro sitio con un bosón.
  - b) Para  $1/4$  de llenado fermiónico ( $\rho_F = 1/2$ ) se encontraron dos estados aislantes, que cumplen con las relaciones  $\rho_B = 1 - \frac{1}{2}\rho_F$  y  $\rho_B = 1 - \rho_F$ . Cada una de las relaciones se caracteriza por un estado base, que para el caso de  $\rho_F = 1/2$  y  $\rho_B = 3/4$  se mantiene cualitativamente constante al variar el término de acoplamiento  $U_{BF}$ . Sin embargo, pero para valores inferiores a  $\rho_B = 1/2$ , se presenta una transición de fase cuántica desde una onda de densidad de carga a una separación de fases.
  - c) Los lóbulos aislantes surgen a partir de un valor crítico finito del término de acoplamiento  $U_{BF}^*$  y depende del parámetro de interacción entre fermiones.
  - d) Al considerar que la masa de los bosones y de los fermiones es diferente, se observó una reducción en el ancho de los lóbulos que cumplían con la relación  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = 1$ , mientras que los otros desaparecían dependiendo de la magnitud de los parámetros de interacción.
2. Para el sistema conformado por fermiones con espín  $1/2$  y bosones en el límite “soft-core” se estudiaron los casos de acoplamiento bosón-fermión atractivo  $U_{BF} < 0$  y repulsivo

$U_{BF} > 0$ , considerando diferentes densidades bosónicas y fermiónicas. Este modelo permitió encontrar lo siguiente:

- a) Para el caso repulsivo ( $U_{BF} > 0$ ) y fijando la densidad de fermiones, se encontró la dependencia de la densidad de bosones con el potencial químico, mostrando dos fases aislantes no triviales que surgen entre las fases aislantes de Mott a medida que se incrementa desde cero el número de bosones. Al considerar el mismo modelo pero fijando la densidad de bosones y variando el número de fermiones, se encontró el aislante trivial de Mott y tres aislantes no triviales. Todas las fases aislantes satisfacen las relaciones  $\rho_B + \rho_F = n$  y  $\rho_B + \frac{1}{2}\rho_F = n$ .
  - b) Para el acoplamiento bosón-fermión de tipo atractivo ( $U_{BF} < 0$ ) con una densidad establecida, se encontraron fases aislantes para densidades bosónicas enteras y fraccionarias, donde las últimas no son conmesuradas con el tamaño de la red. Esto establece una diferencia con el caso repulsivo.
  - c) Como resultados generales de este modelo se encontró, que para un acoplamiento bosón-fermión finito coexisten los estados aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos. Otro de los resultados interesantes es que independientemente del signo de la interacción bosón-fermión, surgen dos estados aislantes entre los lóbulos triviales.
3. Al confinar el modelo “soft-core” en un potencial armónico se encontró lo siguiente para diferentes conjuntos de parámetros:
- a) El estado fundamental se encuentra compuesto por la coexistencia de estados aislantes de banda, regiones de separación de fases, coexistencia de aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos, y regiones donde coexisten fases aislantes de Mott de una especie con un estado superfluido del otro portador.
  - b) Es posible obtener fases donde coexisten aislantes de Mott bosónicos y fermiónicos alrededor del centro de la trampa, al variar los diferentes parámetros del sistema.
  - c) La generación de diversos tipos de separación de fases caracterizada por una ocupación de bosones igual a cero o casos en los que la ocupación de fermiones es cero, permite concluir que este confinamiento presenta regiones de no miscibilidad.

### 8.1. Perspectivas

Dentro de las perspectivas de este trabajo, se puede considerar los siguientes caminos de investigación:

1. Un estudio más amplio para el modelo en el que se considera que los bosones y los fermiones tienen diferentes masas, puede realizarse considerando parámetros de hopping diferentes a los usados en esta investigación.
2. Para extender el presente estudio, es posible considerar un sistema con más grados de libertad, por ejemplo, una mezcla en la que los bosones tengan uno o dos grados de libertad internos e interactúen con fermiones con espín un medio  $s = 1/2$ . Este sistema puede mostrar una física más rica e interesante.

## 8. CONCLUSIONES

---

3. Un estudio más amplio e interesante puede presentarse al explorar sistemas en los que el confinamiento armónico para bosones y fermiones sea diferente [142]. Este mismo sistema se puede ampliar considerando diferentes las masas de cada una de las especies.
4. El estudio del estado de una mezcla Bose-Fermi considerando temperatura finita puede presentar un diagrama de fase enormemente rico y diverso [22, 23].

## Referencias

- [1] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*. Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*. Science **269**, 198 (1995).
- [3] J. Klaers, J. Schmitt, F. Vewinger and M. Weitz. *Bose-Einstein condensation of photons in an optical microcavity*. Nature **468**, 7323 (2010).
- [4] J. D. Plumhof, T. Stöferle, L. Mai, U. Scherf and R. F. Mahrt. *Room-temperature Bose-Einstein condensation of cavity exciton-polaritons in a polymer*. Nat. Mat. **13**, 247 (2014).
- [5] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, Cambridge (1999).
- [6] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, P. Zoller. *Cold bosonic atoms in optical lattices*. Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).
- [7] W. Hofstetter, J.I. Cirac, P. Zoller, E. Demler, and M.D. Lukin. *High-temperature superfluidity of fermionic atoms in optical lattices*. Phys. Rev. Lett. **89**, 220407, (2002).
- [8] I. Bloch , J. Dalibard and W. Zwerger. *Many-body physics with ultracold gases*. Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [9] T. Byrnes, K. Wen and Y. Yamamoto. *Macroscopic quantum computation using Bose-Einstein condensates*. Phys. Rev. A **85**, 040306(R) (2012).
- [10] D. Becker, M. D. Lachmann and E. M. Rasel. *Space-borne Bose-Einstein condensation for precision interferometry*. Nature **562**, 391 (2018).
- [11] N. Lundblad, R.A. Carollo, C. Lannert, *et al.* *Shell potentials for microgravity Bose-Einstein condensates*. npj Microgravity **5**, 30 (2019).
- [12] P. G. Matthew, A. Niayesh and B. M. Robert. *Bose-Einstein condensates as gravitational wave detectors*. Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **2019**, 032 (2019).
- [13] B. DeMarco, and D. Jin. *Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas*. Science **285**, 1703. (1999).
- [14] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon. *Quasipure Bose-Einstein condensate immersed in a Fermi sea*. Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001).

- [15] J. M. McNamara, T. Jelten, A. S. Tychkov, W. Hogervorst, and W. Vassen. *Degenerate Bose-Fermi mixture of metastable atoms*. Phys. Rev. Lett. **97**, 080404 (2006).
- [16] T. Fukuhara, Y. Takasu, M. Kumakura, and Y. Takahashi. *Degenerate Fermi gases of ytterbium*. Phys. Rev. Lett. **98**, 030401 (2007).
- [17] B. J. DeSalvo, M. Yan, P. G. Mickelson, Y. N. Martinez de Escobar, and T. C. Killian. *Degenerate Fermi gas of  $^{87}\text{Sr}$* . Phys. Rev. Lett. **105**, 030402 (2010).
- [18] M. Lu, N. Q. Burdick, and B. L. Lev. *Quantum degenerate dipolar Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **108**, 215301 (2012).
- [19] K. Aikawa, *et al.* *Reaching Fermi degeneracy via universal dipolar scattering*. Phys. Rev. Lett. **112**, 010404 (2014).
- [20] Naylor, B. *et al.* *Chromium dipolar Fermi sea*. Phys. Rev. A **91**, 011603(R) (2015).
- [21] S. Sugawa, K. Inaba, S. Taie, R. Yamazaki, M. Yamashita and Y. Takahashi. *Interaction and filling-induced quantum phases of dual Mott insulators of bosons and fermions*. Nature Phys. **7**, 642 (2011).
- [22] I. Ferrier-Barbut, M. Delehaye, S. Laurent, A. Grier, M. Pierce, B. Rem, F. Chevy, and C. Salomon. *A mixture of Bose and Fermi superfluids*. Science, **345**, 1035 (2014).
- [23] F. Schäfer, N. Mizukami, P. Yu, S. Koibuchi, A. Bouscal, and Y. Takahashi. *Experimental realization of ultracold  $\text{Yb} - ^7\text{Li}$  mixtures in mixed dimensions*. Phys. Rev. A **98**, 051602(R) (2018).
- [24] M.-J. Zhu, H. Yang, L. Liu, D.-C. Zhang, Y.-X. Liu, J. Nan, J. Rui, B. Zhao, J.-W. Pan, and E. Tiemann. *Feshbach loss spectroscopy in an ultracold  $^{23}\text{Na} - ^{40}\text{K}$  mixture*. Phys. Rev. A **96**, 062705 (2017).
- [25] V. Vaidya, J. Tiamsuphat, S. Rolston, J. Porto. *Degenerate Bose-Fermi mixtures of rubidium and ytterbium*. Phys. Rev. A **92**, 043604 2015.
- [26] M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, A. Schirotzek and W. Ketterle. *Direct observation of the superfluid phase transition in ultracold Fermi gases*. Nature **442**, 54 (2006).
- [27] Z. Hadzibabic, C. A. Stan, K. Dieckmann, S. Gupta, M. W. Zwierlein, A. Görlitz, and W. Ketterle *Two-Species Mixture of Quantum Degenerate Bose and Fermi Gases*. Phys. Rev. Lett. **88**, 160401 (2002).
- [28] L. Mathey and D. W. Wang. *Phase diagrams of one-dimensional Bose-Fermi mixtures of ultracold atoms*. Phys. Rev. A **75**, 013612 (2007).
- [29] M. Lewenstein, L. Santos, M. Baranov, and H. Fehrmann. *Atomic Bose-Fermi mixtures in an optical lattice*. Phys. Rev. Lett. **92**, 050401 (2004).
- [30] I. Titvinidze, M. Snoek, and W. Hofstetter. *Supersolid Bose-Fermi mixtures in optical lattices*. Phys. Rev. Lett. **100**, 100401 (2008).



- [31] C. Lai and C. Yang. *Ground-state energy of a mixture of fermions and bosons in One dimension with a repulsive  $\delta$ -function interaction.* Phys. Rev. A **3**, (1971).
- [32] R. Roy, A. Green, R. Bowler, and S. Gupta. *Two-element mixture of Bose and Fermi superfluids.* Phys. Rev. Lett. **118**, 055301 (2017).
- [33] S. Ospelkaus, C. Ospelkaus, O. Wille, *et al.* *Localization of bosonic atoms by fermionic impurities in a three-dimensional optical lattice.* Phys. Rev. Lett. **96**, 180403 (2006).
- [34] T. Ikemachi, A. Ito, Y. Aratake, Y. Chen, M. Koashi. *et al.* *All- optical production of dual Bose-Einstein condensates of paired fermions and bosons with  $^6\text{Li}$  and  $^7\text{Li}$ .* J. Phys. B **50**, 01LT01 (2017).
- [35] J. Scaramazza, B. Kain, and H. Ling. *Competing orders in a dipolar Bose-Fermi mixture on a square optical lattice: mean-field perspective.* Eur. Phys. J. D **70**, 147 (2016).
- [36] K. Günter, T. Stöferle, H. Moritz, *et al.* *Bose-Fermi mixtures in a three-dimensional optical lattice.* Phys. Rev. Lett. **96**, 180402 (2006).
- [37] Th. Best, S. Will, U. Schneider, L. Hackermüller, D. van Oosten, I. Bloch, and D. S. Lühmann. *Role of interactions in  $^{87}\text{Rb}-^{40}\text{K}$  Bose-Fermi mixtures in a 3D optical lattice.* Phys. Rev. Lett. **102**, 030408 (2009).
- [38] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch. *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms.* Nature **415**, 39 (2002).
- [39] A. Zujev, A. Baldwin, R. T. Scalettar, V. G. Rousseau, P. J. H. Denteneer, and M. Rigol *Superfluid and Mott-insulator phases of one-dimensional Bose-Fermi mixtures.* Phys. Rev. A. **78**,033619. (2008).
- [40] W. Q. Ning, S. J. Gu, C. Q. Wu and H. Q. Lin. *Phase diagrams of Bose-Fermi mixture in a one dimensional optical lattice in terms of fidelity and entanglement.* Arxiv:07083.3178v1 (2007).
- [41] L. Pollet, M. Troyer, K. Van Houcke, and S. M. A. Rombouts. *Phase diagram of Bose-Fermi mixtures in one-dimensional optical lattices.* Phys. Rev. Lett **96**, 190402 (2006).
- [42] A. Mering and M. Fleischhauer. *One-dimensional Bose-Fermi-Hubbard model in the heavy-fermion limit.* Phys. Rev. A **77**, 023601 (2008).
- [43] K. Noda, R. Peters y N. Kawakami *Many-body effects in a Bose-Fermi mixture.* Phys. Rev. A **85**, 043628 (2012).
- [44] S. Sinha y K. Sengupta. *Phases and collective modes of a hardcore Bose-Fermi mixture in an optical lattice.* Phys. Rev. B **79**, 115124 (2009).
- [45] A. Albus , F. Illuminati , J. Eisert. *Mixtures of bosonic and fermionic atoms in optical lattices.* Phys. Rev. A **68**, 023606 (2003).
- [46] L. Mathey. *Commensurate mixtures of ultracold atoms in one dimension.* Phys. Rev. B **75**, 144510 (2007).

- [47] X. Barillier-Pertuisel, S. Pittel, L. Pollet, and P. Schuck. *Boson-fermion pairing in Bose-Fermi mixtures on one-dimensional optical lattices*. Phys. Rev. A **77**, 012115 (2008).
- [48] A. Imambekov and E. Demler. *Exactly solvable case of a one-dimensional Bose-Fermi mixture*. Phys. Rev. A **73**, 021602(R) (2006).
- [49] H. Frahm and G. Palacios. *Correlation functions of one-dimensional Bose-Fermi mixtures*. Phys. Rev. A **72**, 061604(R) (2005).
- [50] M. Rizzi and A. Imambekov. *Pairing of one-dimensional Bose-Fermi mixtures with unequal masses*. Phys. Rev. A **77**, 023621 (2008).
- [51] P. Sengupta and L. Pryadko. *Quantum degenerate Bose-Fermi mixtures on one-dimensional optical lattices*. Phys. Rev. B **75**, 132507 (2007).
- [52] Y. Takeuchi and H. Mori. *Mixing-demixing transition in one-dimensional boson-fermion mixtures*. Phys. Rev. A **72**, 063617 (2005).
- [53] G. Bertaina, E. Fratini, S. Giorgini and P. Pieri. *Probing the interface of a phase-separated state in a repulsive Bose-Fermi mixture*. Phys. Rev. Lett. **120**, 243403. (2018).
- [54] A. Guidini, G. Bertaina, D. E. Galli, and P. Pieri. *Condensed phase of Bose-Fermi mixtures with a pairing interaction*. Phys. Rev. A **91**, 023603. (2015).
- [55] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac, and M. Rigol, *One dimensional bosons: From condensed matter systems to ultracold gases*. Rev. Mod. Phys. **83**, 1405. (2011).
- [56] L. Mathey, D. Wang, W. Hofstetter, M. Lukin, and E. Demler. *Luttinger liquid of polarons in one-dimensional boson-fermion mixtures*. Phys. Rev. Lett. **93**, 120404 (2004).
- [57] M. Batchelor, M. Bortz, X. Guan, and N. Oelkers. *Exact results for the one-dimensional mixed boson-fermion interacting gas*. Phys. Rev. A **72**, 061603(R) (2005).
- [58] A. P. Albus, F. Illuminati, and M. Wilkens. *Ground-state properties of trapped Bose-Fermi mixtures: Role of exchange correlation*. Phys. Rev. A **67**, 063606 (2003).
- [59] K. Gunter, T. Stoferle, H. Moritz, M. Kohl and T. Essling. *Bose-fermi mixtures in a three-dimensional optical lattice*. Phys. Rev. Lett. **96**, 180402 (2009).
- [60] F. Hébert, G. G. Batrouni, X. Roy, and V. G. Rousseau. *Supersolids in one-dimensional Bose-Fermi mixtures*. Phys. Rev. B **78**, 184505 (2008)
- [61] H. Fehrmann, M. Baranov, B. Damski, M. Lewenstein and L. Santos. *Meanfield theory of bose-fermi mixtures in optical lattices*. Opt. Comm. **243**, 23 (2004).
- [62] M. Bukov and L. Pollet. *Mean-field phase diagram of the Bose-Fermi Hubbard model*. Phys. Rev. B **89**, 094502 (2014).
- [63] D. Wang. *Strong-Coupling Theory for the Superfluidity of Bose-Fermi Mixtures*. Phys. Rev. Lett. **96**, 140404 (2006).

- [64] L. Mathey, S. W. Tsai, and A. H. Net. *Exotic superconducting phases of ultracold atom mixtures on triangular lattices*. Phys. Rev. B. **75**, 174516 (2007).
- [65] L. Mathey, S.-W. Tsai, and A. H. Castro Neto. *Competing Types of Order in Two-Dimensional Bose-Fermi Mixtures*. Phys. Rev. Lett. **97**, 030601 (2006).
- [66] A. Mering and M. Fleischhauer. *Fermion-mediated long-range interactions of bosons in the one-dimensional Bose-Fermi-Hubbard model*. Phys. Rev. A **81**, 011603 (2010).
- [67] A. Masaki and H. Mori. *Mott transition of Bose-Fermi mixtures in optical lattices induced by attractive interactions*. J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 074002 (2013).
- [68] L. Pollet, C. Kollath, U. Schollwöck, and M. Troyer. *Mixture of bosonic and spin-polarized fermionic atoms in an optical lattice*. Phys. Rev. A **77**, 023608 (2008).
- [69] F. Illuminati and A. Albus. *High-temperature atomic superfluidity in lattice Bose-Fermi mixtures*. Phys. Rev. Lett. **93**, 090406 (2004).
- [70] S. White. *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. **69**, 2863 (1992).
- [71] S. White. *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [72] O. Legeza, J. Röder, and B. A. Hess. *Controlling the accuracy of the density matrix renormalization group method: The Dynamical Block State Selection approach*. Phys. Rev. B **67**, 125114 (2003).
- [73] P. Stoliar, M. Rozenberg, E. Janod, B. Corraze, J. Tranchant, and L. Cario. *Nonthermal and purely electronic resistive switching in a Mott memory*. Phys. Rev. B **90**, 045146 (2014).
- [74] Y. Cui *et al.* *Thermochromic VO<sub>2</sub> for Energy-Efficient Smart Windows*. Joule, 2 1707 (2018)
- [75] Kim, Hyun-Tak. *Metal-Insulator Transition Mechanism and Sensors Using Mott Insulator VO<sub>2</sub>*. isbn **978-94-017-9004-8** (2015).
- [76] W. Lingfei, L. Yongfeng, *et al.* *Device Performance of the Mott Insulator LaVO<sub>3</sub> as a Photovoltaic Material*. Phys. Rev. Applied **3**, 064015 (2015).
- [77] G. Pupillo, Ana Maria Rey, G. Brennen, C. J. Williams and Charles W. Clark *Scalable quantum computation in systems with Bose-Hubbard dynamics*. Journal of Modern Optics **51**, 2395 (2004).
- [78] H.J. Briegel, T. Calarco, D. Jaksch, J.I. Cirac, P. Zoller *Quantum computing with neutral atoms* J.Mod.Opt. **47**, 415 (2000).
- [79] R. Raussendorf, H.J. Briegel. *A One-Way Quantum Computer* Phys.Rev.Lett. **86**, 5188 (2001).

- [80] S. Lee, J. Thompson, S. Raeisi, P. Kurzynski and D. Kaszlikowski. *Quantum information approach to Bose-Einstein condensation of composite bosons*. New Journal of Physics **17**, 30 (2015).
- [81] W. Ketterle. *Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser*. Rev. Mod. Phys. **74**, 1131, (2002).
- [82] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak. *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen*. Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [83] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet. *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*. Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1997).
- [84] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C. I. Westbrook and A. Aspect. *A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms*. Science **292**, 461 (2001).
- [85] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R. J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio. *Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympathetic Cooling*. Science **294**, 1320 (2001).
- [86] P. A. Altin *et al.*  *$^{85}\text{Rb}$  tunable-interaction Bose-Einstein condensate machine*. Rev. Sci. Instrum. **81**, 063103 (2010).
- [87] D. J. McCarron, H. W. Cho, D. L. Jenkin, M. P. Köppinger, and S. L. Cornish. *Dual-species Bose-Einstein condensate of  $^{87}\text{Rb}$  and  $^{133}\text{Cs}$* . Phys. Rev. A **84**, 011603(R) (2011).
- [88] T. Fukuhara, S. Sugawa, and Y. Takahashi. *Bose-Einstein condensation of an ytterbium isotope*. Phys. Rev. A **76**, 051604(R) (2007).
- [89] T. Fukuhara and S. Sugawa and Y. Takasu, and Y. Takahashi. *All-optical formation of quantum degenerate mixtures*. Phys. Rev. A **79**, 021601(R) (2009).
- [90] G. Salomon, L. Fouché, S. Lepoutre, A. Aspect, and T. Bourdel. *All-optical cooling of  $^{39}\text{K}$  to Bose-Einstein condensation*. Phys. Rev. A **90**, 033405. (2014).
- [91] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau. *Bose-Einstein Condensation of Chromium*. Phys. Rev. Lett. **94**, 160401 . (2005).
- [92] J. F. Bertelsen, H. K. Andersen, S. Mai, and M. Budde. *Mixing of ultracold atomic clouds by merging of two magnetic traps*. Phys. Rev. A. **75**, 013404 (2007).
- [93] A. Albus, F. Illuminati, and J. Eisert. *Mixtures of bosonic and fermionic atoms in optical lattices*. Phys Rev A **68**, 023606 (2003).
- [94] I. Bloch. *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Phys. **1**, 23 (2005).
- [95] N. Gemelke, X. Zhang, C. Hung and C. Chin. *In situ observation of incompressible Mott-insulating domains in ultracold atomic gases*. Nature **460**, 995 (2009).

- [96] M. Greiner, C. A. Regal, and D. S. Jin. *Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas*. Nature **426**, 537 (2003).
- [97] A. Imambekov, M. Lukin and E. Demler. *Applications of exact solution for strongly interacting one dimensional bose-fermi mixture: low-temperature correlation functions, density profiles and collective modes*. Phys. Rev. A **68**, 063602 (2003).
- [98] R. Jördens, N. Strohmaier, *et al.* *A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice*. Nature **455**, 204 (2008).
- [99] C. Regal, M. Greiner, and D. Jin. *Observation of Resonance Condensation of Fermionic Atom Pairs*. Phys. Rev. Lett. **92**, 040403 (2004).
- [100] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. H. Denschlag, and R. Grimm. *Crossover from a Molecular Bose-Einstein Condensate to a Degenerate Fermi Gas*. Phys. Rev. Lett. **92**, 120401 (2004).
- [101] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman, and W. Ketterle. *Condensation of pairs of fermionic atoms near a Feshbach resonance*. Phys. Rev. Lett. **92**, 120403 (2004).
- [102] G. Roati, E. de Mirandes, F. Ferlaino, H. Ott, G. Modugno, and M. Inguscio. *Atom Interferometry with Trapped Fermi Gases*. Phys. Rev. Lett. **92**, 230402 (2004).
- [103] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöoferle, K. Günter, and T. Esslinger. Phys. Rev. Lett. **94**, 080403 (2005).
- [104] H. Hu, L. Guan and S. Chen. *Strongly interacting Bose-Fermi mixtures in one dimension*. New J. Phys. **18** 025009 (2016).
- [105] U. Schünemann, H. Engler, M. Zielonowski, M. Weidemüller, and R. Grimm. *Magneto-optic trapping of lithium using semiconductor lasers*. Opt. Comm. **158**, 263 (1998)
- [106] W. Zheng and H. Zhai. *Quasiparticle Lifetime in a Mixture of Bose and Fermi Superfluids*. Phys. Rev. Lett **113**, 265304 (2014).
- [107] R. Zhang, W. Zhang, H. Zhai, and P. Zhang *Calibration of the interaction energy between Bose and Fermi superfluids*. Phys. Rev. A **90**, 063614 (2014).
- [108] A. Truscott and K. Strecker and W. McAlexander and G. Partridge, and R. Hulet. *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*. Science **91**, 2570 (2001)
- [109] G. Roati and F. Riboli and G. Modugno, and M. Inguscio. *Fermi-Bose Quantum Degenerate  $^{40}\text{K} - ^{87}\text{Rb}$  Mixture with Attractive Interaction*. Phys. Rev. Lett. **89**, 150403 2002.
- [110] M. Tey and S. Stellmer and R. Grimm, and F. Schreck. *Double-degenerate Bose-Fermi mixture of strontium*. Phys. Rev. A **82**, 11608 (2010).
- [111] C. Silber and S. Günther and C. Marzok and B. Deh and W. Courteille, and C. Zimmermann. *Quantum-degenerate mixture of fermionic lithium and bosonic rubidium gases* Phys. Rev. Lett. **95**, 170408 (2005)

- [112] B. Deh, W. Gunton, B. Klappauf, Z. Li, M. Semczuk, J. Van Dongen, and K. Madison. *Giant Feshbach resonances in  $^6\text{Li} - ^{85}\text{Rb}$  mixtures* Phys. Rev. A **82**, 020701(R) (2010).
- [113] S. Tung and C. Parker and J. Johansen and C. Chin and Y. Wang, and P. Julienne. *Ultracold mixtures of atomic  $^6\text{Li}$  and  $^{133}\text{Cs}$  with tunable interactions*. Phys. Rev. A **87**, 010702(R) 2013.
- [114] Y. Wu, X. Yao, H. Chen, *et al.* *A quantum degenerate Bose-Fermi mixture of  $^{41}\text{K} - ^6\text{Li}$* . J. Phys. B **50**, 094001 (2017).
- [115] H. Edri, B. Raz, N. Matzliah, N. Davidson and R. Ozeri. *Observation of spin-spin fermion-mediated interactions between ultra-cold bosons*. arXiv:1910.01341v1 [physics.atom-ph] . (2019).
- [116] A. Auerbach. *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer, New York (1994).
- [117] G. Kotliar and D. Vollhardt. *Strongly correlated materials: insights from dynamical mean-field theory*. Physics Today, **57**, 53 (2004).
- [118] J. Hubbard. *Electron correlations in narrow energy bands*. Proc. R. Soc. London, Ser **A** **276**, 238 (1963).
- [119] C. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, (2002).
- [120] V. V. Meshkov, A. V. Stolyarov, and R. J. Le Roy. *Rapid Accurate Calculation of the s-wave Scattering Length* J. Chem. Phys. **135**, 154108. (2011).
- [121] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger. *Ultracold Atoms in Optical Lattices Simulating quantum many-body systems*. Oxford University press (2012).
- [122] *Quantum Degenerate Fermi-Bose Mixtures of  $^{40}\text{K}$  and  $^{87}\text{Rb}$  in 3D Optical Lattices*. S. Ospelkaus Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades des Departments Physik der Universität Hamburg. (2006).
- [123] C. Kim and Z.-X. Shen. *Separation of spin and charge excitations in one-dimensional  $\text{SrCuO}_2$* . Phys. Rev. B. **56**, 15589. (1997).
- [124] K. Held, G. Keller, V. Eyert, D. Vollhardt, and V. I. Anisimov. *Mott-Hubbard metal-insulator transition in paramagnetic  $\text{V}_2\text{O}_3$ : an LDA+DMFT(QMC) Study*. Phys. Rev. Lett. **86**, 5345 (2001).
- [125] D. K. Campbell, J. Tinka Gammel, and E. Y. Loh, Jr. *Modeling electron-electron interactions in reduced-dimensional materials: Bond-charge Coulomb repulsion and dimerization in Peierls-Hubbard models*. Phys. Rev. B **42**, 11608 (1990).
- [126] M. J. Rozenberg. *Integer-filling metal-insulator transitions in the degenerate Hubbard model*. Phys. Rev. B **55**, R4855 (1997).
- [127] E. H. Lieb, and F. Y. Wu. *Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range one-band model in one dimension*. Phys. Rev. Lett. **20**, 1445. (1968).

- [128] E. H. Lieb, and F. Y. Wu,. *The one-dimensional hubbard model: a reminiscence*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **321**, 1. (2003).
- [129] B. Kumar. *Exact solution of the infinite-U Hubbard problem and other models in one dimension*. Phys. Rev. B **79**, 155121 (2009).
- [130] R. T. Scalettar. *An Introduction to the Hubbard Hamiltonian*. in: quantum materials: experiments and theory **6** (2016).
- [131] S. Ejima, H. Fehske, and F. Gebhard. *Dynamic properties of the one-dimensional Bose-Hubbard model*. EPL. **93**, 30002 (2011).
- [132] D.S. Petrov, C. Salomon, G. V. Shlyapnikov . *Weakly bound dimers of fermionic atoms*. Phys. Rev. Lett. **93**, 090404 (2004).
- [133] Y. Murakami, P. Werner, N. Tsuji, and H. Aoki. *Supersolid phase accompanied by a quantum critical point in the intermediate coupling regime of the Holstein model*. Phys. Rev. Lett. **113**, 266404 (2014).
- [134] P. Anders, P. Werner, M. Troyer, M. Sigrist, and L. Pollet. *From the Cooper problem to canted supersolids in Bose-Fermi mixtures*. Phys. Rev. Lett. **109**, 206401. (2012).
- [135] I.V. Stasyuk and I.R. Dulepa. *Density of states of one-dimensional Pauli ionic conductor*. Cond. Matt. Phys. **10**, 259 (20078).
- [136] K. Sengupta, N. Dupuis, and P. Majumdar. *Bose-Fermi mixtures in an optical lattice*. Phys. Rev. A. **75**, 063625. (2007).
- [137] T. Ozawa, A. Recati, M. Delehaye, F. Chevy, and S. Stringari. *Chandrasekhar-Clogston limit and critical polarization in a Fermi-Bose superfluid mixture*. Phys. Rev. A **90**, 043608 (2014).
- [138] L. Mathey, S.-W. Tsai, and A. H. C. Neto. *Competing types of order in two-dimensional Bose-Fermi mixtures*. Phys. Rev. Lett. **97**, 030601. (2006).
- [139] F. Klironomos and S. Tsai. *Pairing and density-wave phases in boson-fermion mixtures at fixed filling*. Phys. Rev. Lett. **99**, 100401 (2007).
- [140] T. Bilitewski. *Exotic superconductivity through bosons in a dynamical cluster approximation*. Phys. Rev. B **92**, 184505 (2015).
- [141] X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and C. Lee. *Fermi gases in one dimension: From Bethe ansatz to experiments*. Rev. Mod. Phys. **85**, 1633 (2013).
- [142] N. Nygaard and K. Molmer. *Component separation in harmonically trapped boson-fermion mixtures*. Phys. Rev. A **59**, 2974 (1999).
- [143] K. Wilson. *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [144] J. W. Bray, S.T. Chui. *Computer renormalization-group calculations of  $2k_F$  and  $4k_F$  correlation functions of the one-dimensional Hubbard model*. Phys. Rev. B **19**, 4876 (1979).

- [145] S. J. Gu. *Fidelity approach to quantum phase transitions*. Int. J. Mod. Phys. B **24**, 4371 (2010).
- [146] U. Schollwöck. *The density-matrix renormalization group*. Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [147] C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Stand. *45*, 255 (1950). Res. Nat. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).
- [148] E. R. Davidson. *The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real- symmetric matrices*. J. Comput. Phys. **17**, 87 (1975).
- [149] K. Winkler, G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. H. Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Büchler, and P. Zoller. *Repulsively bound atom pairs in an optical lattice*. Nature **441**, 853. (2006).
- [150] T. D. Kühner, S. R. White, H. Monien. *One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbor interaction*. Phys. Rev. B **61**, 063602 (2000).
- [151] S. Sugawa, K. Inaba, S. Taie, R. Yamazaki, M. Yamashita, and Y. Takahashi Nat. Phys. **7**, 642. (2011).
- [152] R. Avella, J. J. Mendoza-Arenas, R. Franco, and J. Silva-Valencia. *Insulator phases of a mixture of spinor fermions and hard-core bosons*. Phys. Rev. A **100**, 063620 (2019).
- [153] E. K. Laird, Z.-Y. Shi, M. M. Parish, and J. Levinsen. *SU(N) fermions in a one-dimensional harmonic trap*. Phys. Rev. A **96**, 032701 (2017).
- [154] G. K. Campbell, J. Mun, M. Boyd, P. Medley, A. E. Leanhardt, L. G. Marcassa, D. E. Pritchard, and W. Ketterle. *Imaging the Mott insulator shells by using atomic clock shifts*. Science **313**, 649 (2006).
- [155] S. Fölling, A. Widera, T. Mueller, F. Gerbier, and I. Bloch, *Formation of spatial shell structure in the superfluid to Mott insulator transition*. Phys. Rev. Lett. **97**, 060403 (2006).
- [156] G. G. Batrouni, F. F. Assaad, R. T. Scalettar, and P. J. H. Denteneer *Many-body expansion dynamics of a Bose-Fermi mixture confined in an optical lattice*. Phys. Rev. A **72**, 031601(R)(2005).
- [157] F. Gerbier, A. Widera, S. Fölling, O. Mandel, T. Gericke, and I. Bloch. *Phase coherence of an atomic Mott insulator*. Phys. Rev. Lett. **95**, 050404 (2005).
- [158] T. Grining, M. Tomza, M. Lesiuk, M. Przybytek, M. Musia l, R. Moszynski, M. Lewenstein, and P. Massignan. *Crossover between Few and Many Fermions in a Harmonic Trap*. Phys. Rev. A **92**, 061601 (2015).
- [159] A. N. Wenz, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe and S. Jochim. *From few to many: observing the formation of a Fermi sea one atom at a time*. Science **342**, 457 (2013).



- [160] Y. Zhong, Y. Liu, and H.-G. Luo. *Simulating heavy fermion physics in optical lattice: Periodic Anderson model with harmonic trapping potential*. Front. Phys **12**, 127502 (2017).
- [161] J. Silva-Valencia and A. M. C. Souza. *Ground state of alkaline-earth fermionic atoms in one-dimensional optical lattices*. Eur. Phys. J. B **85**, 5 (2012).
- [162] J. Silva-Valencia and A. M. C. Souza. *Entanglement of alkaline-earth-metal fermionic atoms confined in optical lattices*. Phys. Rev. A **85**, 033612 (2012).
- [163] R. C. Caro, R. Franco, and J. Silva-Valencia. *Spin-liquid state in an inhomogeneous periodic Anderson model*. Phys. Rev. A **97**, 023630 (2018).
- [164] J. Silva-Valencia, R. Franco, M.S. Figueira. *Entanglement and the ground state of fermions trapped in optical lattices*. Physica B **404**, 3332 (2009).
- [165] T. Bergeman, M. G. Moore, and M. Olshanii. *Atom-atom scattering under cylindrical harmonic confinement: numerical and analytic studies of the confinement induced resonance*. Phys. Rev. Lett. **91**, 163201 (2003).
- [166] D. Greif, M. F. Parsons, A. Mazurenko, C. S. Chiu, S. Blatt, F. Huber, G. Ji and M. Greiner. *Site-resolved imaging of a fermionic Mott insulator*. Science **351**, 953 (2016).
- [167] Shi-Guo Peng, Hui Hu, Xia-Ji Liu, and Peter D. Drummond. *Confinement-induced resonances in anharmonic waveguides*. Phys. Rev. A **84**, 043619 (2011).
- [168] V. G. Rousseau, G. G. Batrouni, D. E. Sheehy, J. Moreno and M. Jarrell. *Pure Mott phases in confined ultracold atomic systems*. Phys. Rev. Lett. **104**, 167201 (2010).
- [169] W. Geist, L. You, and T. A. B. Kennedy. *Sympathetic cooling of an atomic Bose-Fermi gas mixture*. Phys Rev A **59** 1500 (1999).
- [170] Z. Akdeniz, P. Vignolo, A. Minguzzi, M.P. Tosi. *Phase separation in a boson-fermion mixture of lithium atoms*. J. Phys. B **35**, L105 (2002).
- [171] C. Klempt *et al.*. *Transport of a quantum degenerate heteronuclear Bose-Fermi mixture in a harmonic trap*. Eur. Phys. J. D **48**, 121 (2008).
- [172] T. Karpiuk, M. Brewczyk, and K. *Bright solitons in Bose-Fermi mixtures*. Phys Rev A **73**, 053602 (2006).
- [173] L. Vichi *et al.* *Quantum degeneracy and interaction effects in spin-polarized Fermi-Bose mixtures*. J. Phys. B **31** L899 (1998).
- [174] R. S. Lous, I. Fritsche, M. Jag, F. Lehmann and E. Kirilov. *Probing the Interface of a Phase-Separated State in a Repulsive Bose-Fermi Mixture*. Phys. Rev. Lett. **120**, 243403 (2018).
- [175] H. Hu, L. Pan, and S. Chen. *Strongly interacting one-dimensional quantum gas mixtures with weak p-wave interactions*. Phys Rev A **93**, 033636 (2016)

- [176] F. Deuretzbacher, D. Becker, J. Bjerlin, S. M. Reimann, and L. Santos. *Spin-chain model for strongly interacting one-dimensional Bose-Fermi mixtures*. Phys Rev A **95**, 043630 (2017).
- [177] A S Dehkharghani *et al.* *Hard-core Bose-Fermi mixture in one-dimensional split traps*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **50**, 144002 (2017).
- [178] J. Decamp *et al.* *Strongly correlated one-dimensional Bose-Fermi quantum mixtures: symmetry and correlations*. New J. Phys. **19**, 125001 (2017).
- [179] P. Siegl, S. I. Mistakidis, and P. Schmelcher. *Many-body expansion dynamics of a Bose-Fermi mixture confined in an optical lattice*. Phys. Rev. A **97**, 053626 (2018).
- [180] S. Peil, *et al.* *Patterned loading of a Bose-Einstein condensate into an optical lattice*. Phys. Rev. A **67**, 051603 (2003).
- [181] J. H. Denschlag, *et al.* *A Bose-Einstein condensate in an optical lattice*. J. Phys. B **35**, 3095 (2002).
- [182] 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 (1998).
- [183] P. J. Martin, B. G. Oldaker, A. H. Miklich, and D. E. Pritchard. *Scattering of atoms from a standing light wave*. Phys. Rev. Lett. **60**, 515 (1988).
- [184] C. S. Adams, M. Siegel y J. Mlynek. *Atom optics*. Phys. Rev. Rep. **240**, 143 (1994).
- [185] A. Hemmerich, and T. W. Hänsch. *Two-dimensional atomic crystal bound by light*. Phys. Rev. Lett. **70**, 410 (1993).
- [186] M. Weidmüller, A. Hemmerich, A. Gorlitz, T. Esslinger, and T. W. Hänsch. *Bragg diffraction in an atomic lattice bound by light*. Phys. Rev. Lett. **75**, 4583 (1995).
- [187] D. Yamamoto, T. Ozaki, C. A. R. S´a de Melo, and I. Danshita. *First-order phase transition and anomalous hysteresis of binary Bose mixtures in an optical lattice*. Phys. Rev. A **88**, 033624 (2013).
- [188] Tarruell, L. and Sanchez-Palencia, L. *Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices*. C. R. Phys. **19**, 365 (2018).
- [189] G. G. Batrouni y V. Rousseau *Mott Domains of Bosons Confined on Optical Lattices*. Phys. Rev. Lett. **89**, 117203 (2002).
- [190] B. Mukherjee, Z. Yan, P. B. Patel, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, J. Struck and M. W. Zwierlein. *Homogeneous atomic Fermi gases*. Phys. Rev. Lett. **118**, 123401 (2017).
- [191] M. Cramer, J. Eisert and F. Illuminati *Inhomogeneous atomic Bose-Fermi mixtures in cubic lattices*. Phys. Rev. Lett. **93**, 190405(2004).
- [192] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch, and I. Bloch. *Controlled collisions for multi-particle entanglement of optically trapped atoms*. Nature **415**, 39 (2003).

- [193] Y. Takasu and Y. Takahashi. *Condensed phase of Bose-Fermi mixtures with a pairing interaction*. J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 012001 (2009).
- [194] C. Gross, T. Zibold, E. Nicklas, J. Estéve, M. K. Oberthaler. *Nonlinear atom interferometer surpasses classical precision limit*. Nature **464**, 1165 (2010).
- [195] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl and T. Esslinger. *Exciting collective oscillations in a trapped 1d gas*. Phys. Rev. Lett. **91**, 250402 (2003).
- [196] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch and I. Bloch. *Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice*. Nature. **429**, 277 (2004).
- [197] D. Clément, N. Fabbri, L. Fallani, C. Fort and M. Inguscio. *Exploring correlated 1d Bose gases from the superfluid to the Mott-insulator state by inelastic light scattering*. Phys. Rev. Lett. **102**, 155301 (2009).
- [198] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz and S. Jochim. *Deterministic preparation of a tunable few-fermion system*. Nature Phys. **332**, 336 (2011).
- [199] G. Pagano *et al.* *A one-dimensional liquid of fermions with tunable spin*. Nature Phys. **10**, 198 (2014).
- [200] M. A. Cazalilla and A. M. Rey. *Ultracold Fermi gases with emergent  $SU(N)$  symmetry*. Rep. Prog. Phys. **77**, 124401 (2014).
- [201] S. Laurent, M. Pierce, M. Delehaye, T. Yefsah, F. Chevy, and C. Salomon. *Connecting few-body inelastic decay to quantum correlations in a many-body system: A weakly coupled impurity in a resonant Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **118**, 103403 (2017).
- [202] M. A. Cazalilla and A. F. Ho. *Instabilities in binary mixtures of one-dimensional quantum degenerate gases*. Phys. Rev. Lett. **91**, 150403 (2003).
- [203] F. Schreck, G. Ferrari, K. L. Corwin, J. Cubizolles, L. Khaykovich, M. O. Mewes, and C. Salomon. *Sympathetic cooling of bosonic and fermionic lithium gases towards quantum degeneracy*. Phys. Rev. A **64**, 011402(R) (2001).
- [204] M. Fisher, P. Weichman, G. Grinstein and D. Fisher. *Boson localization and the superfluid insulator transition*. Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
- [205] I. Stasyuk, T. Mysakovych, V. Krasnov *Phase diagrams of the Bose-Fermi-Hubbard model: Hubbard operator approach*. Condens. Matter Phys, **13**, 13003 (2010)
- [206] G. Bertaina, E. Fratini, S. Giorgini, and P. Pieri. *Quantum Monte Carlo Study of a Resonant Bose-Fermi Mixture*. Phys. Rev. Lett. **110**, 115303. (2013).
- [207] C.-H. Wu, I. Santiago, J. W. Park, P. Ahmadi, and M. W. Zwierlein. *Strongly interacting isotopic Bose-Fermi mixture immersed in a Fermi sea*. Phys. Rev. A **84**, 011601(R) (2011).
- [208] A. J. Leggett. *Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts*. Rev. Mod. Phys. **73** 333, (2001).

- [209] Z. Hadzibabic, S. Gupta, C. A. Stanm, C. H. Schunck, M. W. Zwierlein, K. Dieckmann, and W. Ketterle. *Fiftyfold improvement in the number of quantum degenerate fermionic atoms*. Phys. Rev. Lett. **91**, 160401 (2003).
- [210] I. Bloch, J. Dailbard, and W. Zwerger. *Many-body physics with ultracold gases*. Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [211] Houbiers, M., H. Stoof, W. McAlexander y R. Hulet. *Elastic and inelastic collisions of  $^6\text{Li}$  atoms in magnetic and optical traps*. Phys. Rev. A **57**, R1497. (1998).
- [212] A. Mering. *The one-dimensional Bose-Fermi-Hubbard model in the ultrafast-fermion limit: Charge density wave phase and MI-CDW phase separation*. arXiv:1408.4472v1 [cond-mat.quant-gas].
- [213] V. G. Rousseau, G. G. Batrouni, D. E. Sheehy, J. Moreno and M. Jarrell. *Pure Mott phases in confined ultracold atomic systems*. Phys. Rev. Lett. **104**, 167201 (2010).
- [214] K. Targonska and K. Sacha. *Self-localization of a small number of Bose particles in a superfluid Fermi system*. Phys. Rev. A **82**, 033601. (2010).
- [215] H. F. Hess, G. P. Kochanski, J. M. Doyle, N. Masuhara, D. Kleppner and T. J. Greytak. *Magnetic trapping of spin-polarized atomic hydrogen*. Phys. Rev.Lett. **59**, 672 (1987).
- [216] I. Stasyuk V. Krasnov. *Phase transitions in the hard-core Bose-Fermi-Hubbard model at non-zero temperatures in the heavy-fermion limit*. Condensed Matter **511**, 109 (2017).
- [217] I. Stasyuk V. Krasnov. *Phase transitions in Bose-Fermi-Hubbard model in the heavy fermion limit: Hard-core boson approach*. Condensed Matter Physics, **18**, 43702 (2015).
- [218] T. Polak. *Zero-temperature phase diagram of Bose-Fermi gaseous mixtures in optical lattices*. Phys. Rev. A **81**, 043612 (2010).
- [219] N. Oelkers, M. Batchelor, M. Bortz and X. Guan. *Bethe Ansatz study of one-dimensional Bose and Fermi gases with periodic and hard wall boundary conditions*. J. Phys. A: Math. **39**, 1073 (2006).
- [220] F. Zhou. *Mott states under the influence of fermion-boson conversion*. Phys. Rev. B **72**, 220501(R) (2005).
- [221] K. Sacha, K. Targonska, and J. Zakrzewski. *Frustration and time reversal symmetry breaking for Fermi and Bose-Fermi systems*. Phys. Rev. A **85**, 053613 (2012).
- [222] S. Modak, S. Tsai, and K. Sengupta. *Renormalization group approach to spinor Bose-Fermi mixtures in a shallow optical lattice*. Phys. Rev. B **84**, 134508 (2011).
- [223] L. Wen and J. Li. *Exotic superconductivity through bosons in a dynamical cluster approximation*. Phys. Rev. A **90**, 053621 (2014).
- [224] D. van Oosten, P. van der Straten, and H.T.C. Stoof. *Quantum phases in an optical lattice*. Phys. Rev. A. **63**, 053601, (2001).

- [225] J. Ruostekoski, G. V. Dunne, and J. Javanainen. *Particle number fractionalization of an atomic Fermi-Dirac gas in an optical lattice*. Phys. Rev. **88**, 180401 (2002).
- [226] J. Van Leeuwen and E. Cohen. *Phase separation in isotopic Fermi-Bose mixtures*. Phys. Rev. **176**, 385 (1968).
- [227] M. Tylutki, A. Recati, F. Dalfovo and S. Stringari. *Dark-bright solitons in a superfluid Bose-Fermi mixture*. New J. Phys. **18**, 053014 (2016).
- [228] C. Recher and H. Kohler. *From Hardcore Bosons to Free Fermions with Painlevé V*. J. Stat. Phys. **147**, 542 (2012).
- [229] L. Carr and M. Holland. *Quantum phase transitions in the Fermi-Bose Hubbard model*. Phys. Rev. A **72**, 031604 (R) (2005).
- [230] S. Bhongale and H. Pu. *Phase separation in a mixture of a Bose-Einstein condensate and a two-component Fermi gas as a probe of Fermi superfluidity*. Phys. Rev. A **78**, 061606 (R) (2008).
- [231] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg. *Density Matrix Renormalization, Series: Lecture Notes in Physics*. Springer, Berlin, Germany (1999).
- [232] Hui Hu and Xia-Ji Liu. *Thermodynamics of a trapped Bose-Fermi mixture*. Phys Rev A **68**, 023608 (2003).
- [233] L. Salasnich and F. Toigo. *Bright solitons in Bose-Fermi mixtures*. Phys Rev A **75**, 013623 (2007).
- [234] M. D. Girardeau, and A. Minguzzi. *Soluble models of strongly interacting ultracold gas mixtures in tight waveguides*. Phys. Rev. Lett. **99**, 230402 (2007).
- [235] S. K. Adhikari and L. Salasnich. *Superfluid Bose-Fermi mixture from weak coupling to unitarity*. Phys. Rev. A **78**, 043616 (2008).
- [236] X. La, X. Yin, and Y. Zhang. *Hard-core Bose-Fermi mixture in one-dimensional split traps*. Phys. Rev. A **81**, 043607 (2010).
- [237] B. Fang, P. Vignolo, M. Gattobigio, C. Miniatura, and A. Minguzzi. *Exact solution for the degenerate ground-state manifold of a strongly interacting one-dimensional Bose-Fermi mixture*. Phys. Rev. A **84**, 023626 (2011).
- [238] M. Snoek, I. Titvinidze, I. Bloch, and W. Hofstetter. *Effect of interactions on harmonically confined Bose-Fermi mixtures in optical lattices*. Phys. Rev. Lett. **106**, 155301 (2011).
- [239] J. Chen, J. M. Schurer, and P. Schmelcher. *Bunching-antibunching crossover in harmonically trapped few-body Bose-Fermi mixtures*. Phys Rev A **98**, 023602 (2018).
- [240] J. Sakuray. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company. Estados Unidos (1994).

- 
- [241] Schneider, U. and Hackermüller, L. and Will, S. and Best, Th. and Bloch, I. and Costi, T. A. and Helmes, R. W. and Rasch, D. and Rosch, A. *Metallic and Insulating Phases of Repulsively Interacting Fermions in a 3D Optical Lattice* Science **322**, 5907 (2008).
- [242] C.-H. Wu, I. Santiago, J. W. Park, P. Ahmadi, and M. W. Zwierlein *Metallic and Insulating Phases of Repulsively Interacting Fermions in a 3D Optical Lattice* Phys. Rev. A **84**, 011601 (2011).
- [243] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne and E. Tiesinga *Feshbach Resonances in Ultracold Gases* Rev. Mod. Phys **82**, 1225 (2010).