



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Efectos de temperatura finita en la transición de
fases Superfluido-Aislante Mott

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Miguel Alejandro Pérez Contreras

TUTOR

Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez

2016



Ciudad Universitaria, CDMX



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1.-Datos del alumno

Apellido paterno
Apellido materno
Nombre(s)
Teléfono
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Carrera
Número de cuenta

2. Datos del tutor

Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

3. Datos del sinodal 1

Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

4. Datos del sinodal 2

Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

5. Datos del sinodal 3

Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

6. Datos del sinodal 4

Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

7.Datos del trabajo escrito.

Título
Subtítulo
Número de páginas
Año

1.-Datos del alumno

Pérez
Contreras
Miguel Alejandro
57736189
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
305054186

2.- Datos del tutor.

Dr
Francisco Javier
Sevilla
Pérez

3.-Datos del sinodal 1

Dr
Mauricio
Fortes
Besprosvani

4.-Datos del sinodal 2

Dra
Rosario
Paredes
Gutiérrez

5.-Datos del sinodal 3

Dr
Fernando
Ramírez
Martínez

6.-Datos del sinodal 4

Dra
Vicenta
Sánchez
Morales

7.-Datos del trabajo escrito

Efectos de temperatura finita en la transición de fases
Superfluido-Aislante Mott
78
2016

Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México por haberme permitido realizar en ella mi formación profesional, y que a lo largo de mi vida académica ha sido un segundo hogar.

A mi asesor el Dr Francisco Javier Sevilla Pérez, gracias por su paciencia, su tiempo, sus consejos, motivación y aliento para la realización de esta tesis.

A todos los sinodales por su paciencia y correcciones para este trabajo.

A mis compañeros y amigos: Toño, Silvinha, Linda, Athziri, Yessenia, Arturo, Gaby, Lalo, Marisol, Javitt, Norberto, gracias por todo el apoyo que siempre me brindaron, por todas esas horas de trabajo juntos, por todas esas risas y momentos de alegría que gracias a ustedes pase en esta etapa de mi vida.

Agradezco sobre todo a mi familia; a mis padres, por su cariño, su comprensión, por el buen ejemplo que siempre me han dado, y por que siempre han confiado en mi, hasta en los momentos donde yo he perdido la confianza; porque todo lo que he logrado y lograre siempre sera gracias a ellos; a mis mis hermanos Cristina, Fernando y Alfredo, por estar siempre ahí, en los momentos difíciles y en los momentos de alegría.

Al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PA-PIIT) de la UNAM: IN113114, Fenómenos colectivos en sistemas de agentes brownianos en interacción, por el apoyo económico que me fue brindado.

Índice general

1. Introducción	1
2. Marco teórico	6
2.1. Segunda cuantización	6
2.1.1. Estados en la representación de número de ocupación	10
2.2. Interacción en segunda cuantización	13
2.3. Estados coherentes	15
2.4. Gran función de Partición	16
2.5. Transiciones de Fase	20
3. El Hamiltoniano Bose Hubbard	22
3.1. El modelo	23
3.2. Expansión del campo $\hat{\psi}(\vec{x})$ usando la base de funciones de Wannier	23
3.3. Solución de los casos límite y diagrama de fase de la transición superfluida-aislante Mott a temperatura cero	25
3.3.1. $J = 0$ Sistema Aislante Mott	26
3.3.2. Gas ideal $U = 0$	27
3.4. Esquema de transición: BEC, Superfluido, Mott	30
3.5. Diagrama de transición a $T = 0$	31
4. Casos límite a temperatura finita	37
4.1. Aislante Mott a temperatura finita	37
4.2. Gas ideal de bosones en potencial periódico: temperatura finita	41

5. Diagrama de transición entre las fases superfluida y aislante a temperatura finita	47
5.1. La función de partición asociada al Hamiltoniano Bose Hubbard	48
6. Conclusión	58
Referencias	60
A. Interacción entre pares de partículas en sistemas a bajas energías	65
B. Integrales Gaussianas y Transformación de Hubbard-Stratonovich	70
C. Correcciones a la energía en teoría de perturbaciones	72

Índice de figuras

1.1. Imágenes de absorción del condensado de Bose-Einstein. Esta imagen muestra la absorción vs dos dimensiones espaciales, las imágenes muestran una transición a un condensado, con un número de átomos en la transición aproximadamente de 7×10^5 y la temperatura de transición de $2\mu K$ [28].	2
1.2. Imágenes de absorción de múltiples patrones de interferencia de las ondas de materia, después de ser liberados de potenciales de profundidad a) $0E_r$, b) $3E_r$, c) $7E_r$, d) $10E_r$, e) $13E_r$, f) $14E_r$, g) $16E_r$, y h) $20E_r$, donde $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Tomado de [20]	3
3.1. Diagrama de transición de fase, los lóbulos internos corresponden a la fase aislante Mott, y la región externa a la fase superfluido.	35
4.1. Número de partículas como función de μ y T	40
4.2. Fluctuación del número de partículas como función de μ , para temperaturas de: $k_B T = 0.001U$ (azul), $k_B T = 0.005U$ (café), $k_B T = 0.05U$ (verde) y $k_B T = 0.1U$ (rojo).	41
4.3. Densidad de partículas como función de la temperatura crítica de condensación, para un sistema con $d = 3$	46
5.1. Acción efectiva como función del parámetro de orden a) $a_2(T, \mu, J) > 0$, b) $a_2(T, \mu, J) < 0$	54
5.2. Diagrama de transición de fase para temperaturas $k_B T = 0.001U$ (azul) $k_B T = 0.01U$ (café) $k_B T = 0.05U$ (verde) $k_B T = 0.1U$ (rojo) y $z = 4$	57

Capítulo 1

Introducción

Los sistemas cuánticos sólo pueden estar constituidos por dos tipos de partículas, a saber, fermiones o bosones. Las primeras son partículas cuyo valor de espín es una fracción semi entera de \hbar , sus funciones de onda son antisimétricas ante el intercambio de dos partículas, cumplen el principio de exclusión de Pauli, el cual prohíbe que dos fermiones ocupen el mismo estado cuántico y siguen la estadística de Fermi-Dirac. En contraparte los Bosones tienen espín entero, funciones de onda simétricas y no cumplen el principio de exclusión de Pauli [35], por lo que un número arbitrario de partículas pueden ocupar el mismo estado cuántico. Es así que es posible que un número macroscópico de bosones, del orden del número total de partículas, ocupe el estado de mínima energía cuando la temperatura del sistema se disminuye del valor de una temperatura umbral característica, llamada temperatura crítica T_c . En esta temperatura se produce una transición a una fase llamada condensado de Bose Einstein (BEC Por sus siglas en Ingles Bose Einstein Condensation), donde los efectos cuánticos se hacen presentes a escala macroscópica. Esta transición fue predicha teóricamente en los años 20 del siglo pasado por Albert Einstein [11] al aplicar a bosones con masa la estadística previamente obtenida por Satyendra Nath Bose para fotones, y con la cual se puede derivar la ley de Plank que da la densidad de energía por modo en la radiación del cuerpo negro [32].

La realización experimental de un CBE tuvo que esperar alrededor de 70 años, esto debido a la dificultad de llegar a las temperaturas necesarias para alcanzar la fase condensada. No fue sino hasta 1995 que se logró observar la CBE en átomos de ^{87}Rb [3], ^{23}Na [8] y

en ${}^7\text{Li}$ [5]. En estos experimentos los sistemas fueron confinados por trampas magnéticas y enfriados por evaporación, hasta alcanzar temperaturas del orden de $100\text{nK} - 400\text{nK}$ con densidades en el centro del condensado del orden de $10^{12} - 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Estas temperaturas son tan bajas que los gases se pueden considerar como gases ideales aunque estrictamente no lo son pues las interacciones siguen presentes, y de hecho son indispensables en el proceso de enfriamiento. Para la observación experimental, la trampa de confinamiento es retirada y se mide la distribución de velocidades para diferentes temperaturas, observándose que al alcanzar la temperatura crítica de CBE la distribución [28] tiene un pico muy marcado en velocidades alrededor del cero, lo que indica la ocupación macroscópica del estado base. Esto se puede observar en la (figura 1.1).

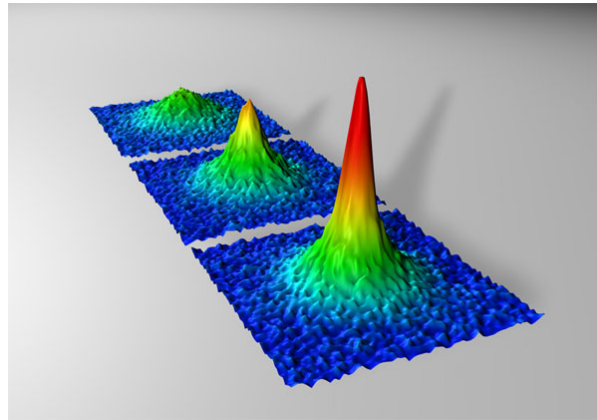


Figura 1.1: Imágenes de absorción del condensado de Bose-Einstein. Esta imagen muestra la absorción vs dos dimensiones espaciales, las imágenes muestran una transición a un condensado, con un número de átomos en la transición aproximadamente de 7×10^5 y la temperatura de transición de $2\mu\text{K}$ [28].

El perfeccionamiento de las técnicas de confinamiento y enfriamiento empleando potenciales de redes ópticas, en donde se utiliza el efecto Stark y la resonancia de Feshbach permitió generar sistemas donde es posible tener con control sobre la fuerza de interacción entre las partículas, a partir de variaciones de los parámetros de la red óptica. [2, 16, 23, 33], este control da la posibilidad de estudiar los efectos de la interacción en las fases de los sistemas.

Usando estas técnicas de confinamiento, en 2002 Greiner y colaboradores [20], lograron observar una transición de fase en un condensado de partículas de ^{87}Rb , confinadas por un potencial periódico. Este potencial fue generado por tres fuentes laser contrapropagantes, teniendose así control sobre la profundidad de los pozos de potencial, la cual se encuentra relacionada con la intensidad de los láseres empleados. La transición fue observada al variar la profundidad de los pozos, pasando de una fase superfluida en donde existe una coherencia de fase de las funciones de onda de las partículas, que se ve reflejada en el experimento como un patrón de interferencia; a una fase donde no existe coherencia y por tanto las partículas se encuentran localizadas (ver figura 1.2).

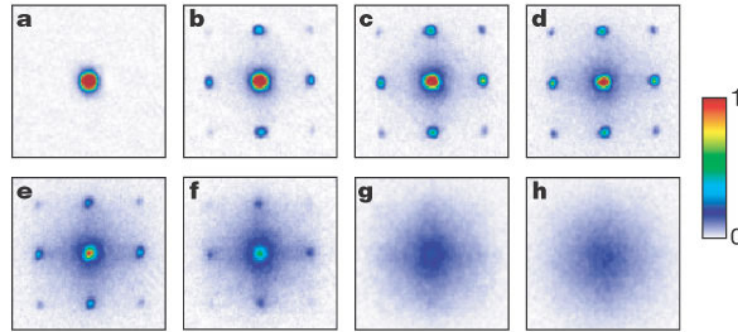


Figura 1.2: Imágenes de absorción de múltiples patrones de interferencia de las ondas de materia, después de ser liberados de potenciales de profundidad a) $0E_r$, b) $3E_r$, c) $7E_r$, d) $10E_r$, e) $13E_r$, f) $14E_r$, g) $16E_r$, y h) $20E_r$, donde $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Tomado de [20]

La transición observada por Greiner fue predicha teóricamente en 1989 por Fisher y colaboradores [15], donde proponen el estudio de un sistema de bosones con interacción repulsiva, en analogía con los sistemas de fermiones que exhiben transiciones de fase metal-aislante[30].

El sistema estudiado por Mathew Fisher consistió en un gas de bosones con interacción de corto alcance inmerso en un potencial periódico y/o aleatorio. Para su descripción, modeló el sistema con la versión bosónica del Hamiltoniano de Hubbard [25] (originalmente introducido para estudiar sistemas de fermiones fuertemente correlacionados) y que posteriormente se le llamaría Hamiltoniano de Bose-Hubbard. Este sistema queda definido por dos parámetros: el coeficiente de tunelamiento o de salto que describe la transición de los

bosones entre sitios de la red, relacionado con la energía cinética y el potencial externo periódico; y un término de interacción entre pares de partículas. La competencia entre estos dos términos lleva al sistema a una transición de fase a temperatura cero, es por tanto una transición debida solo a efectos cuánticos. Fisher deduce que el sistema presentará una transición de fase entre una fase superfluida, cuando el término de salto domina sobre la interacción, a una fase aislante caracterizada por una brecha en el espectro de excitaciones y compresibilidad nula, cuando la interacción domina sobre el término de tunelamiento o salto.

A partir del estudio de Fisher se despertó un gran interés por estudiar a fondo este hamiltoniano así como sus generalizaciones, con aproximaciones teóricas [9, 10, 26, 42], numéricas [31][7] [27] y experimentales [40] [12] [38].

Aunque el hamiltoniano de Bose Hubbard es uno de los más sencillos que consideran las interacciones resulta no ser soluble exactamente de manera analítica. Existe entonces en la literatura una gran cantidad de trabajos que estudian este sistema bajo aproximaciones analíticas y cálculos numéricos Monte Carlo, aunque la mayoría de estos se reducen a el límite de temperatura cero. En esta tesis se pretende extender el estudio a temperatura finita y analizar los efectos que esta presenta en la transición de fase, empleando un enfoque de integrales funcionales, bajo una aproximación de tipo campo medio y las ideas de transiciones de fase de la teoría de Ginzburg-Landau.

Aunque estrictamente hablando la transición de fase Superfluido-Aislante Mott ocurre sólo a temperatura cero. En temperaturas diferentes de cero, existe una transición de fase clásica es decir una transición inducida por fluctuaciones térmicas, entre una fase superfluida y una fase normal y hay sólo un cruce entre la fase normal y un aislante Mott. Es importante mencionar que un aislante Mott es por definición incompresible, por lo tanto en principio sólo existe a temperatura cero, sin embargo, existe una región en la que para todo propósito práctico la compresibilidad es muy cercana a cero y se justifica entonces llamar a esta región aislante Mott.

Esta tesis está organizada de tal modo que resulte lo más autocontenida posible, así en

el capítulo dos se hace una presentación de los métodos y formalismos empleados para el estudio del sistema de interés. A continuación realiza un resumen del desarrollo del formalismo de segunda cuantización, para posteriormente describir la construcción de la función de partición en el ensamble gran canónico en un formalismo de integrales funcionales. Por último, se realiza una breve descripción de la teoría de Landau de transiciones de fases.

En el capítulo tres se realiza la presentación del modelo del sistema a estudiar, el cual corresponde al descrito por el hamiltoniano de Bose-Hubbard, que se construye a partir del desarrollo en funciones de Wannier del hamiltoniano en segunda cuantización. Se realiza un estudio preliminar en temperatura cero, estudiando en primera instancia los casos límite del Hamiltoniano, es decir, en ausencia del término de salto ($J = 0$) y en ausencia de interacción ($U = 0$), y por último se presenta el cálculo del diagrama de transición de fase del sistema bajo una aproximación de campo medio usando la teoría de Landau para definir la transición.

En el capítulo cuatro, siguiendo la línea del capítulo anterior, se estudian los casos límite ahora en temperatura finita, se calcula la gran función de partición del sistema para $J = 0$ empleando estados de Fock. Posteriormente, empleando ahora el formalismo de integral funcional, se calcula la función de partición del sistema cuando $U = 0$ encontrando la temperatura de transición al estado condensado como función de J .

Por último, en el capítulo cinco se realiza el estudio de la transición del sistema a temperatura finita, obteniéndose una gráfica de la frontera de la transición entre la fase superfluida y una fase térmica, así como el paso a una región que puede considerarse Aislante Mott. Se emplea la teoría de Landau para definir la frontera, construyendo una acción efectiva como serie de potencias en el parámetro de orden, identificando esta con la funcional de Landau, cuyos mínimos determinan el estado de equilibrio de las dos fases.

Capítulo 2

Marco teórico

En este capítulo se introduce de manera breve el marco teórico y los métodos utilizados en el desarrollo de esta tesis. En primer lugar se presenta el formalismo de *segunda cuantización* el cual resulta ser la descripción más natural para el estudio de sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Para una revisión más profunda del tema se sugiere ver [13], [1], [21]. A continuación se hace énfasis en el formalismo de segunda cuantización cuando se considera la interacción entre partículas. Después se presenta la base de estados coherentes en el espacio de Hilbert de segunda cuantización, la cual nos permite escribir la gran función de partición del sistema en términos de funcionales integrales [24]. Escrita de esta manera la función de partición es el punto de partida para estudiar los efectos de temperatura finita en el sistema. Por último se hace un resumen de la teoría fenomenológica de transiciones de fase de Landau con la cual se establecen las fronteras de fases en la transición que presenta el sistema que se estudia en este trabajo.

2.1. Segunda cuantización

Para la descripción "completa" de un sistema cuántico de N partículas se requiere la función de onda del sistema, la cual es solución de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N, t) = \left[\sum_{i=1}^N \left(\frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V_{ext}(\vec{x}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \right] \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N, t), \quad (2.1)$$

donde $V_{ext}(\vec{x})$ denota un potencial externo y $V(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ la interacción entre pares de partículas.

Resolver esta ecuación cuando el número de partículas es muy grande resulta ser una tarea extremadamente compleja y muy poco práctica, por tanto, es conveniente pasar a una formulación de la mecánica cuántica de muchos cuerpos en la que se cambia la descripción estándar, en términos de operadores y funciones de onda con grados de libertad finitos, a una en términos de *campos cuántizados* con grados de libertad infinitos. Esta corresponde a la llamada *segunda cuantización*.

Esta formulación tiene como ventaja que los efectos estadísticos debidos a la indistinguibilidad de las partículas (Bose o Fermi), se encuentra contenida de manera natural dentro de la propia definición de las reglas de conmutación de los operadores de campo, contrario a la formulación estándar de la mecánica cuántica, donde, al resolver la ecuación de Schrödinger se tiene que imponer la simetría apropiada de la función de onda ante el intercambio de pares de partículas, simétrica (Bosones) o antisimetría (Fermiones). Otra de las ventajas es la simplificación en la descripción del estado del sistema, ya que en *segunda cuantización* se requiere simplemente de la especificación del número de partículas que ocupan el mismo estado de una sola partícula, en lugar de precisar todos los números cuánticos de cada una de las partículas en un estado de N de ellas con la simetría adecuada.

Para facilitar la introducción de los conceptos y el desarrollo de este formalismo de la mecánica cuántica de muchos cuerpos, por el momento omitiremos el término de interacción entre partículas, en posteriores secciones de este capítulo se realizará una generalización de la teoría para incluirlo explícitamente.

El marco teórico de *segunda cuantización* se basa en proponer a la función de onda $\psi(\vec{x}, t)$, solución de la ecuación de Schrödinger de una partícula

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t), \quad (2.2)$$

como un campo clásico de partículas para cuantizarlo de manera canónica posteriormente, de ahí que se le llame *segunda cuantización*, nombrándose en ocasiones a la formulación de Schrödinger de la mecánica cuántica de muchos cuerpos como primera cuantización.

Podemos considerar entonces, que la ecuación de Schrödinger (2.2) corresponde a las ecuaciones de Euler-Lagrange para el campo $\psi(\vec{x}, t)$. De esto podemos construir la densidad Lagrangiana $\mathcal{L} = \mathcal{L}[\psi(\vec{x}, t), \dot{\psi}(\vec{x}, t), \nabla\psi(\vec{x}, t)]$ tal que las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}(\vec{x}, t)} \right) + \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi(\vec{x}, t)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi(\vec{x}, t)} = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*(\vec{x}, t)} \right) + \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \psi^*(\vec{x}, t)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*(\vec{x}, t)} = 0 \quad (2.4)$$

corresponden a la ecuación 2.2 que bajo este enfoque es la ecuación de movimiento del campo.

Por sustitución directa se puede demostrar que la densidad Lagrangiana que cumple esto es, explícitamente:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[\psi(\vec{x}, t), \nabla\psi(\vec{x}, t), \dot{\psi}(\vec{x}, t)] &= i\hbar\psi^*(\vec{x}, t)\dot{\psi}(\vec{x}, t) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi^*(\vec{x}, t)\nabla\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x})\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para "cuantizar el campo", primero pasamos a la descripción de Hamilton, es decir, se encuentran las funciones de \vec{x} y t que corresponden al campo de momento conjugado $\pi(\vec{x}, t)$, dado por

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar\psi^*(\vec{x}, t) \quad (2.6)$$

Con este se calcula la densidad Hamiltonia simplemente con una transformación de Legendre, a decir

$$\mathcal{H} = \pi(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \mathcal{L} = i\hbar\psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \mathcal{L} \quad (2.7)$$

y se llega a que la densidad Hamiltoniana está dada por

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi^*(\vec{x}, t)\nabla\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t)\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t). \quad (2.8)$$

Cuando se integra esta densidad sobre todo el espacio usando integración por partes y la condición a la frontera de que el campo en el infinito debe anularse, el hamiltoniano

del sistema queda como

$$H = \int dx^3 \psi^*(\vec{x}, t) \left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \right] \psi(\vec{x}, t) \quad (2.9)$$

Una vez que se pasa a la descripción hamiltoniana, el campo $\psi(\vec{x}, t)$ se cuantiza de manera canónica, es decir, como se hace al cuantizar \vec{x} y \vec{p} en primera cuantización [22], así los campos se promueven a operadores $\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}(\vec{x}, t)$, $\psi^*(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t)$ y se establecen las siguientes relaciones de conmutación entre ellos

$$[\hat{\psi}_B(\vec{x}, t), \hat{\psi}_B^\dagger(\vec{x}', t)] = \delta^3(\vec{x}, \vec{x}') \quad (2.10)$$

$$[\hat{\psi}_B(\vec{x}, t), \hat{\psi}_B(\vec{x}', t)] = [\hat{\psi}_B^\dagger(\vec{x}, t), \hat{\psi}_B^\dagger(\vec{x}', t)] = 0 \quad (2.11)$$

para bosones (de aquí el subíndice B) y

$$[\hat{\psi}_F(\vec{x}, t), \hat{\psi}_F^\dagger(\vec{x}', t)]_+ = \delta^3(\vec{x}, \vec{x}') \quad (2.12)$$

$$[\hat{\psi}_F(\vec{x}, t), \hat{\psi}_F(\vec{x}', t)]_+ = [\hat{\psi}_F^\dagger(\vec{x}, t), \hat{\psi}_F^\dagger(\vec{x}', t)]_+ = 0 \quad (2.13)$$

para fermiones, donde $[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P}$ denota el conmutador entre los operadores \hat{P} y \hat{Q} ; y $[\hat{P}, \hat{Q}]_+ = \hat{P}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{P}$ anticonmutador.

Los operadores de los observables de la teoría son ahora escritos en términos de estos operadores de campo $\hat{\psi}(\vec{x}, t)$ y $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t)$. El más directo de ellos es el operador Hamiltoniano, que corresponde al de la ecuación 2.9 cambiando las funciones de onda por los operadores de campo

$$\hat{H} = \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \right] \hat{\psi}(\vec{x}, t). \quad (2.14)$$

De igual forma se deduce que el operador de energía cinética es

$$\hat{T} = \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}(\vec{x}, t). \quad (2.15)$$

Así mismo de manera general un operador en *segunda cuantización* que representa un

observable físico se relaciona con los operadores en primera cuantización como:

$$\hat{O} = \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \hat{O}_{[1]}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}, t), \quad (2.16)$$

donde $\hat{O}_{[1]}$ hace referencia al operador de un cuerpo en primera cuantización, posteriormente se mostrara la generalización de operadores de dos cuerpos.

Se define también el operador de número total de partículas

$$\hat{N} = \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \hat{\psi}(\vec{x}, t) \quad (2.17)$$

Este operador se puede interpretar de la siguiente manera; si $\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$ representa una densidad del campo clásico en la posición \vec{x} al tiempo t al integrar esta densidad sobre todo el espacio se obtiene el numero total de partículas, por lo tanto al extender esta idea al campo cuantizado podemos asociar a \hat{N} con al número total de partículas.

2.1.1. Estados en la representación de número de ocupación

Así como las funciones de onda, los operadores de campo se pueden escribir como un desarrollo en términos de una base ortonormal $\{\varphi_i(x)\}$, donde los coeficientes de la expansión tienen el carácter de operador

$$\hat{\psi}(\vec{x}, t) = \sum_i \varphi_i(\vec{x}) \hat{a}_i(t) \quad (2.18)$$

y

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) = \sum_i \varphi_i^*(\vec{x}) \hat{a}_i^\dagger(t). \quad (2.19)$$

Los operadores $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ se conocen como operadores de creación y aniquilación de una partícula en el estado $\varphi_i(\vec{x})$ y satisfacen las siguientes relaciones de conmutación

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad (2.20a)$$

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad (2.20b)$$

como puede demostrarse directamente de (2.10) y (2.11).

De manera general se puede usar cualquier base de funciones ortonormales, la elección

dependerá del problema y de las ventajas que presente una base u otra. En el siguiente desarrollo se empleará como base a las funciones propias del hamiltoniano de una partícula, $\varphi_i(\vec{x})$,

$$\hat{H}_{[1]} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}), \quad (2.21)$$

esto debido a la simplificación que esta base presenta en el caso sin interacción.

Las funciones $\varphi_i(\vec{x})$ satisfacen

$$\hat{H}_{[1]} \varphi_i(\vec{x}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{x}), \quad (2.22a)$$

$$\int \varphi_i^*(\vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) d^3 \vec{x} = \delta_{ij}. \quad (2.22b)$$

Usando está base el Hamiltoniano del sistema en *segunda cuantización* 2.14 se escribe como

$$\hat{H} = \sum_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \int d\vec{x}^3 \varphi_i^*(\vec{x}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}) \right) \varphi_j(\vec{x}) = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i, \quad (2.23)$$

donde $\epsilon_i = \int d\vec{x}^3 \varphi_i^*(\vec{x}) \hat{H}_{[1]} \varphi_i(\vec{x})$ y $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$. Análogamente el operador que da el número total de partículas queda como

$$\hat{N} = \int d\vec{x}^3 \varphi_i^*(\vec{x}, t) \varphi_i(\vec{x}, t) \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \hat{n}_i. \quad (2.24)$$

Hasta este punto se ha hablado solo de los operadores de la teoría, introduciremos ahora los estados sobre los que actúan estos operadores. Para ello construiremos primero los estados propios de los operadores de número de partículas \hat{n}_i .

A partir de las reglas de conmutación (2.22) se puede demostrar que los operadores \hat{n}_i conmutan entre sí para todo i , es decir $[\hat{n}_i, \hat{n}_j] = 0$, y sus valores propios son números enteros y positivos, por tanto existe un conjunto de estados propios comunes a todos los operadores de número \hat{n}_i , el cual definimos de manera formal como:

$$\hat{n}_i |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle = n_i |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (2.25)$$

en la que interpretamos los valores propios n_i como el número de partículas en el estado $\varphi_i(\vec{x})$.

Por otra parte, se tiene también que si $|n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle$ es un estado propio de \hat{n}_i con valor propio n_i , entonces $\hat{a}_i |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle$ y $\hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle$ también es un estado propio de \hat{n}_i , a decir

$$\hat{n}_i \hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_i \dots n_\infty\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (2.26a)$$

$$= \hat{a}_i^\dagger (1 + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (2.26b)$$

$$= \hat{a}_i^\dagger (1 + \hat{n}_i) |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (2.26c)$$

$$= \hat{a}_i^\dagger (1 + n_i) |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (2.26d)$$

$$= (1 + n_i) \hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (2.26e)$$

de manera análoga para el operador de aniquilación se tiene

$$\hat{n}_i \hat{a}_i |n_i\rangle = (n_i - 1) \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \quad (2.27)$$

se llega entonces a que $\hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_i \dots n_\infty\rangle$ es un estado propio de \hat{n}_i con valor propio $n_i + 1$ y $\hat{a}_i |n_1, n_2 \dots n_i \dots n_\infty\rangle$, es un estado propio con valor propio $n_i - 1$, es por esto que \hat{a}_i^\dagger y \hat{a}_i se les llama operadores de creación y aniquilación, ya que al aplicarlos sobre los estados $|n_1, n_2 \dots n_\infty\rangle$ incrementan o disminuyen el número de partículas en el estado $\phi_i(x)$.

El resultado anterior permite entonces construir los estados de número de ocupación a partir de los operadores de creación, postulando la existencia de un estado vacío $|\vec{0}\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 0_\infty\rangle$ [36], con la propiedad $\hat{a}_i |0_1, 0_2, \dots, 0_\infty\rangle = 0$, es decir, un estado que representa la ausencia de partículas en cualquier estado.

Al ser \hat{n}_i operadores Hermitianos sus estados propios forman una base ortonormal

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = C_{n_1, n_2, \dots, n_N} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_N^\dagger)^{n_N} |0_1, 0_2, \dots, 0_N\rangle \quad (2.28)$$

con la constante de normalización $C_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \frac{1}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots \sqrt{n_N!}}$.

Es así que todo estado en segunda cuantización puede ser expresado como combinación lineal de elementos de la base de número de ocupación. El espacio generado por esta base

cuando los n_i pueden tomar cualquier valor positivo, es decir, cuando no hay restricción en el número de partículas, es llamado espacio de Fock, que resulta ser un espacio generado por el producto infinito de espacios de Hilbert (\mathcal{H}_i) donde i indica el número de partículas del espacio.

$$\mathcal{F} \equiv \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3 \otimes \dots \quad (2.29)$$

2.2. Interacción en segunda cuantización

En las secciones anteriores se omitió el término de interacción en el desarrollo del formalismo, ahora se corrige el camino para tomar en cuenta una interacción de dos cuerpos, la cual es la de mayor importancia en sistemas suficientemente diluidos, por lo que es necesario hacer una generalización de la teoría a partir de la densidad Lagrangiana 2.32 y de la ecuación de campo clásica 2.2.

Ya que en *segunda cuantización* las partículas se consideran cuantos de un campo de materia, una interacción entre dos partículas es por tanto una interacción del campo consigo mismo y para considerar entonces todos los pares de partículas que interactúan es necesario agregar a la ecuación 2.2 un potencial producido por la cantidad total de materia.

De esta forma si dos unidades del campo en las posiciones \vec{x} y \vec{x}' interactúan por medio de un potencial $\mathcal{V}(x, x')$ el potencial de interacción total en el punto \vec{x} producido por todos los elementos del campo sera:

$$V_{int}(\vec{x}) = \int d^3\vec{x}' \psi^*(\vec{x}') \mathcal{V}(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}') \quad (2.30)$$

La ecuación de campo generalizada es

$$\left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x}) + V_{int}(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \quad (2.31)$$

Es fácil ver que la densidad Lagrangiana que reproduce esta ecuación de campo es

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[\psi(\vec{x}, t), \nabla\psi(\vec{x}, t), \dot{\psi}(\vec{x}, t)] = & i\hbar\psi^*(\vec{x}, t)\dot{\psi}(\vec{x}, t) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*(\vec{x}, t)\nabla\psi(\vec{x}, t) + \\ & V(\vec{x})\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) + \int d\vec{x}'\psi^*(\vec{x}', t)\psi^*(\vec{x}, t)\mathcal{V}(\vec{x}, \vec{x}')\psi(\vec{x}', t)\psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Ya que el término que se agregó no depende de $\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t)$ el momento conjugado es nuevamente $\pi(\vec{x}, t) = i\hbar\psi^*(\vec{x}, t)$, por lo que la densidad Hamiltoniana es entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*(\vec{x}, t)\nabla\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t)\psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t) \\ & + \int d^3\psi(\vec{x}', t)\psi^*(\vec{x}, t)\mathcal{V}(\vec{x}', \vec{x})\psi(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}', t) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Integrando y cuantizando los campos como se hizo en el caso sin interacción se llega a la expresión general del Hamiltoniano en segunda cuantización con interacción de dos cuerpos, a decir

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \right) \hat{\psi}(\vec{x}, t) \\ & + \int d\vec{x}^3 \int d\vec{x}'^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}', t)\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t)\mathcal{V}(\vec{x}', \vec{x})\hat{\psi}(\vec{x}, t)\hat{\psi}(\vec{x}', t). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Algunos ejemplos de interacción de dos cuerpos son: la interacción de Coulomb

$$\hat{V}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{2} \int d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}_1)\hat{\psi}(\vec{x}_2) \frac{e_0^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \hat{\psi}(\vec{x}_1)\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}_2) \quad (2.35)$$

y el potencial de interacción espín-espín, frecuentemente encontrada en problemas de magnetismo cuántico

$$\hat{V}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{2} \int d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} J(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \hat{S}_{\alpha\beta} \cdot \hat{S}_{\alpha'\beta'} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\vec{x}_1)\hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\vec{x}_2)\hat{\psi}_{\beta'}(\vec{x}_2)\hat{\psi}_\beta(\vec{x}_1) \quad (2.36)$$

donde $J(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ denota la interacción de intercambio y $\hat{S}_{\alpha\beta}$ el operador de spin en segunda cuantización.

2.3. Estados coherentes

El concepto de estados coherentes fue introducido por primera vez por E. Schrödinger en 1926 en el estudio del oscilador armónico simple pero fue Glauber quien en 1963 les dio el nombre al introducirlos en estudios de óptica cuántica para describir la coherencia de los campos de radiación[18].

Los estados coherentes introducidos por Schrödinger se definen de manera formal como los estados propios del operador de aniquilación del oscilador armónico. Dado que los operadores de creación y aniquilación de partículas en el formalismo de segunda cuantización satisfacen la misma álgebra que los correspondientes operadores de oscilador armónico, resulta natural nombrar también a sus estados propios como estados coherentes, siendo ahora en el estados en el espacio de Fock de segunda cuantización, definiéndose entonces como:

$$\hat{a}_i |\phi\rangle = \phi_i |\phi\rangle, \quad (2.37)$$

ya que el conjunto de operadores \hat{a}_i conmutan entre si para todo i , los estados coherentes son simultáneamente estados propios de todos los operadores de aniquilación, además al no ser estos operados Hermitianos, sus valores en general son números complejos en el continuo.

A partir la definición se puede mostrar que los estados coherentes son explícitamente de la forma

$$|\phi\rangle = e^{\sum_i \phi_i \hat{a}_i^\dagger} |0\rangle, \quad (2.38a)$$

donde la suma va sobre todos los estados etiquetados por i . Los estados coherentes corresponden a una superposición de estados de Fock con diferente número de partículas.

Una de las principales propiedades de los estados coherentes es que cumplen la siguiente relación de completez [24]

$$\mathbb{I} = \int \prod_i \frac{d\phi_i^* d\phi_i}{2\pi i} e^{-\sum_i \phi_i^* \phi_i} |\phi\rangle \langle \phi|, \quad (2.39)$$

donde la integral se realiza sobre todo el plano complejo. Estos estados no son ortonormales

y satisfacen la relación

$$\langle \phi'_i | \phi_i \rangle = e^{\sum_i \phi'_i \phi_i}. \quad (2.40)$$

De esta última propiedad y de la definición es posible mostrar que un observable en la representación de *segunda cuantización* puede escribirse en términos de operadores de creación y aniquilación ordenados normalmente como sigue¹

$$\langle \phi | \hat{A}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) | \phi' \rangle = e^{\sum_i \phi_i \phi'_i} A(\phi_i^*, \phi'_i). \quad (2.41)$$

Por lo tanto, el valor esperado del observable $\hat{A}(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ entre estados coherentes, transforman el operador $\hat{A}(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ en una función de los valores propios de los estados coherentes multiplicada por un factor que considera todos los valores propios del operador de aniquilación. Por ejemplo para el operador de número $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ se tiene que

$$\langle \phi | \hat{N} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \phi \rangle = \phi^* \phi e^{\sum_i \phi_i^* \phi_i} \quad (2.42)$$

2.4. Gran función de Partición

En el capítulo 4 se analizará los efectos de fluctuaciones térmicas en un sistema cuántico de muchas partículas, por lo que necesitaremos calcular la gran función de partición del sistema de la cual es posible obtener toda la termodinámica. En esta sección mostramos como la función de partición en el ensamble gran canónico se puede escribir en términos de integrales funcionales usando los estados coherentes.

La función de partición correspondiente al ensamble gran canónico esta dada por

$$Z(T, \mu) = Tr \{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \} \quad (2.43)$$

donde $Tr\{\}$ denota el operador que da la traza del argumento. Si usamos los estados de

¹Se dice que los operadores están ordenados normalmente, cuando se tiene el mismo número de operadores de creación que de aniquilación y todos los operadores de creación se encuentran a la derecha de los operadores de aniquilación

número de ocupación en el espacio de Fock $|n_1 \dots n_\infty\rangle$ para calcular la traza tenemos que

$$Z(T, \mu) = \sum_{n_1 \dots n_\infty} \langle n_1 \dots n_\infty | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | n_1 \dots n_\infty \rangle, \quad (2.44)$$

Se introduce ahora la propiedad de completitud 2.39

$$Z(T, \mu) = \sum_{n_1 \dots n_\infty} \langle n_1 \dots n_\infty | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \int \prod_\alpha \frac{d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} |\phi\rangle \langle \phi | n_1 \dots n_\infty \rangle \quad (2.45)$$

Usando que para bosones se cumple $\langle n | \phi \rangle \langle \psi | n \rangle = \langle \psi | n \rangle \langle n | \phi \rangle$, se llega a que la función de partición se puede escribir como

$$Z(T, \mu) = \int \prod_\alpha \frac{d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha}{2\pi i} e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle \phi | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi \rangle. \quad (2.46)$$

De este modo se ha expresado la gran función de partición como una integral sobre los planos complejos generado por los valores propios de los estados coherentes, como último paso es necesario expresar el elemento de matriz $\langle \phi | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi \rangle$ como una función de los valores propios. Se podría pensar en usar entonces la propiedad 2.41 pero no es posible ya que el operador exponencial no tiene los operadores de creación y aniquilación ordenados normalmente. Por lo tanto se recurre a un procedimiento análogo a la construcción de integral de trayectoria de Feynman [14]. Para ello primero notamos que el operador $e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$ es idéntico al operador de evolución temporal $e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})t}$ haciendo $t = -i\hbar\beta$. Por lo cual siguiendo el desarrollo de Feynman, se divide el intervalo $[0, \beta]$, en L intervalos, para ello se escribe el operador de evolución temporal como $e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = e^{-\epsilon \sum_{l=0}^{L-1} (\hat{H} - \mu\hat{N})}$, donde $\epsilon = \frac{\beta}{L}$, y se introducen $L - 1$ identidades 2.39.

$$Z = \int \prod_i \frac{d\phi_i^* d\phi_i}{2\pi i} e^{-\sum_i \phi_i^* \phi_i} \langle \phi | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} \mathbb{I}_1 e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} |\phi\rangle \mathbb{I}_2 \dots \mathbb{I}_{L-1} e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi \rangle. \quad (2.47)$$

Escribiendo explícitamente las identidades se tiene

$$\begin{aligned}
Z = \int \prod_i \frac{d\phi_i^* d\phi_i}{2\pi i} e^{-\sum_i \phi_i^* \phi_i} & \left[\langle \phi | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} \int \prod_i \frac{d\phi_{i_1}^* d\phi_{i_1}}{2\pi i} e^{-\sum_i \phi_{i_1}^* \phi_{i_1}} | \phi_1 \rangle \right. \\
& \langle \phi_1 | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} \int \prod_i \frac{d\phi_{i_2}^* d\phi_{i_2}}{2\pi i} e^{-\sum_i \phi_{i_2}^* \phi_{i_2}} | \phi_2 \rangle \\
& \dots \langle \phi_{L-2} | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} \int \prod_i \frac{d\phi_{i_{L-1}}^* d\phi_{i_{L-1}}}{2\pi i} e^{-\sum_i \phi_{i_{L-1}}^* \phi_{i_{L-1}}} | \phi_{L-1} \rangle \langle \phi_{L-1} | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi \rangle \left. \right].
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Es posible agrupar términos en productos, definiendo $\langle \phi | = \langle \phi_0 |$ y $|\phi\rangle = |\phi_L\rangle$, esto implica $\phi_\alpha = \phi_{\alpha_0} = \phi_{\alpha_L}$

$$Z = \int \prod_l^{L-1} \left[\prod_{i_l} \frac{d\phi_{i_l}^* d\phi_{i_l}}{2\pi i} e^{-\sum_{i_l} \phi_{i_l}^* \phi_{i_l}} \langle \phi_l | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_{l+1} \rangle \right]. \tag{2.49}$$

Evaluamos ahora por separado los elementos de matriz del operador $e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})}$.

$$\langle \phi_l | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_{l+1} \rangle = \langle \phi_l | \left(1 - \epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N}) + O(\epsilon^2) + \dots \right) | \phi_{l+1} \rangle \tag{2.50a}$$

$$\cong \langle \phi_l | \phi_{l+1} \rangle (1 - \epsilon(H(\phi_l^*, \phi_{l+1}) - \mu N(\phi_l^*, \phi_{l+1}))) \tag{2.50b}$$

$$\cong \langle \phi_l | \phi_{l+1} \rangle \left(1 - \epsilon(H(\phi_l^*, \phi_{l+1}) - \mu N(\phi^*, \phi)) + O(\epsilon^2) + \dots \right) \tag{2.50c}$$

$$= e^{\sum_{i_l} \phi_{i_l}^* \phi_{i_{l+1}}} \left(e^{-\epsilon(H(\phi_l^*, \phi_{l+1}) - \mu N(\phi^*, \phi))} \right). \tag{2.50d}$$

En este último desarrollo, primero se han despreciado todos los términos de orden igual o mayor a ϵ^2 ya que cuando L tiende a infinito como se hará posteriormente, estos términos se van a cero. Por lo tanto en (2.50c) es posible usar la propiedad (2.41) y posteriormente volver a tomar la exponencial.

Sustituyendo éste resultado en (2.52)

$$Z = \int \prod_{l=0}^{L-1} \left[\prod_{i_l} \frac{d\phi_{i_l}^* d\phi_{i_l}}{2\pi i} e^{-\sum_{i_l} \phi_{i_l}^* \phi_{i_l}} e^{\sum_{i_l} \phi_{i_l}^* \phi_{i_{l+1}}} \left(e^{-\epsilon(H(\phi^*, \phi) - \mu N(\phi^*, \phi))} \right) \right], \quad (2.51)$$

$$Z = \int \prod_{l=0}^{L-1} \left[\prod_{i_l} \frac{d\phi_{i_l}^* d\phi_{i_l}}{2\pi i} \right] e^{-\epsilon \sum_{i_l} \sum_{l=0}^{L-1} \left(-\phi_{i_l}^* \frac{(\phi_{i_{l+1}} - \phi_{i_l})}{\epsilon} \right) - \epsilon(H(\phi^*, \phi) - \mu N(\phi^*, \phi))}. \quad (2.52)$$

Hacemos tender L a infinito, lo cual implica que la partición se hace cada vez más fina hasta pasar al continuo por tanto la etiqueta l se cambia por una variable continua $\tau = \frac{\beta l}{L}$, las sumas pasan a integrales $\epsilon \sum_{l=0}^{L-1} \rightarrow \int_0^\beta$ y la diferencia en los campos se transforma en derivadas con respecto la variable continua $\frac{(\phi_{i_{l+1}} - \phi_{i_l})}{\epsilon} \rightarrow \frac{\partial \phi_i(\tau)}{\partial \tau}$

Poniendo todo esto junto se llega a la expresión de la gran función de partición

$$Z = \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_i \phi_i^* \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_i + H(\phi_i^*, \phi_i)}, \quad (2.53)$$

donde la medida de integración se define de manera formal como

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \prod_l \frac{d\phi_{i_l}^* d\phi_{i_l}}{2\pi i} = D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau). \quad (2.54)$$

La expresión (2.53) representa una integral funcional, que se puede interpretar como una integral sobre todos los posibles campos complejos $\phi(\tau)$ y $\phi^*(\tau)$ que cumplen con la condición de periodicidad $\phi(0) = \phi(\beta)$, esta condición resulta de la misma construcción.

2.5. Transiciones de Fase

De manera cotidiana estamos expuestos diariamente a los cambios de fase, la transición de líquido a sólido o sólido a líquido del agua u otras sustancias son algunos ejemplos de ello, pero ¿Qué es una transición de fase? Una transición de fase puede definirse como un cambio radical de las propiedades macroscópicas ante la variación de algún parámetro del sistema. Una primer clasificación de las transiciones fue dada por Ehrenfest en 1933, su clasificación estaba basada en el comportamiento de la energía libre de Gibbs. Ehrenfest ordenó las transiciones de acuerdo a la discontinuidad que presentara esta energía[43], así una transición de primer orden corresponde a una discontinuidad de las primeras derivadas de la energía libre, transiciones de líquido-sólido-gas para sustancias simples pertenecen a este tipo de transiciones. Siguiendo este criterio, las transiciones de segundo orden son aquellas donde las primeras derivadas son continuas pero las segundas derivadas, como el calor específico y la compresibilidad, no lo son, y así sucesivamente.

Esta clasificación tiene un enfoque puramente macroscópico, pues solo hace referencia a los potenciales y las variables termodinámicas, no incluye los aspectos microscópicos de los sistemas. Es hasta 1937 que Landau presenta una formulación que describe las transiciones de fase, usando un enfoque microscópico, basada en observaciones fenomenológicas e introduce el concepto de parámetro de orden η . Su teoría se basa en la observación de que en la mayoría de las transiciones de fase existe el rompimiento de alguna simetría, siendo el parámetro de orden capaz de caracterizar las simetrías del sistema, tomando un valor cero en la fase con mayor simetría y diferente de cero en la fase de menor simetría.

Usando la teoría de Landau es posible redefinir los criterios para la clasificación de Ehrenfest a partir del comportamiento del parámetro de orden, siendo las transiciones de fase de primer orden aquellas donde el cambio del parámetro de orden es discontinuo y las transiciones de segundo orden aquellas donde el cambio es continuo[37].

La transición Aislante Mott-superfluido estudiada en esta tesis cae dentro de esta segunda categoría, algunos otros ejemplos son las transiciones ferromagneto-paramagneto, metal-superconductor y el paso del helio líquido a un estado superfluido[24]

Landau propone que es posible construir una densidad de energía $F(X, Y, Z; \eta)$, que depende de todas las variables termodinámicas que definen al sistema incluyendo al parámetro de orden, y realizar una expansión en serie de potencias alrededor $\eta = 0$, que para transiciones continuas de segundo orden será de la forma

$$F(X, Y, Z; \eta) = A(X, Y, Z) + B(X, Y, Z)\eta^2 + C(X, Y, Z)\eta^4. \quad (2.55)$$

El funcional de Landau debe cumplir con la simetría del sistema además de que el estado de equilibrio debe quedar especificado por sus mínimos respecto al parámetro de orden. A partir de el cambio en el comportamiento de los mínimos de este funcional, es posible determinar un cambio significativo en las propiedades del sistema y por tanto definir la transición una transición de fase [19].

Capítulo 3

El Hamiltoniano Bose Hubbard

En este capítulo se introduce el hamiltoniano de Bose Hubbard, sistema de estudio de esta tesis. Presentado como el análogo para bosones del Hamiltoniano de Hubbard, en 1989 Matthew P. A. Fisher [15] introduce el estudio del hamiltoniano de Bose Hubbard, el cual describe un sistema de bosones, con interacción repulsiva y de corto alcance, inmersos en un potencial periódico. En el artículo de Fisher se va un poco mas allá y se estudian también los efectos de introducir un potencial aleatorio. En este capítulo y en general a lo largo de todo este trabajo nos restringiremos al caso homogéneo, es decir en ausencia de potencial aleatorio, o cualquier otro potencial externo que rompa la simetría de traslación sobre sitios de la red. El sistema descrito por Fisher presenta una transición de fase de segundo orden, en el caso homogéneo, entre una fase deslocalizada sobre los sitios (superfluida) y una fase localizada (Aislante Mott). Esta transición se observa aún en el límite de temperatura cero, es por tanto una transición debido sólo a efectos de fluctuaciones cuánticas, ya que a temperatura cero las fluctuaciones térmicas son nulas. En este capítulo se presenta un estudio preliminar del hamiltoniano de Bose Hubbard a temperatura cero, es decir sólo nos limitamos al cálculo de los estados y energía base del sistema. Para comenzar se estudiaron los casos límite del sistema dados por los dos únicos parámetros libres, a decir la interacción y la energía cinética debida a saltos en la red, para posteriormente realizar el cálculo del diagrama de transición de fase que experimenta el sistema debido a la competencia entre estos dos parámetros.

3.1. El modelo

Consideramos el hamiltoniano

$$\hat{H} = \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_p(\vec{x}) \right) \hat{\psi}(\vec{x}) + \frac{1}{2} \int d\vec{x}^3 d\vec{x}'^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}') V(\vec{x} - \vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}'), \quad (3.1)$$

el cual describe un sistemas de bosones con interacción sólo por pares de partículas, con $V(\vec{x} - \vec{x}')$ el potencial de interacción, e inmersos en un potencial externo periódico $V_p(\vec{x})$; $\hat{\psi}(\vec{x})$ es el operador de campo de Bose que satisface las reglas de conmutación (2.10) y (2.11).

Se considera un potencial de interacción entre partículas de corto alcance y se aproxima, en el caso de un gas diluido y bajas temperaturas, como un potencial efectivo de contacto

$$V(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_s \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (3.2)$$

donde a_s es la longitud de dispersión de onda s , ver apéndice A. De esta forma el Hamiltoniano se escribe:

$$\hat{H} = \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_p(\vec{x}) \right] \hat{\psi}(\vec{x}) + \frac{2\pi\hbar^2}{m} a_s \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}). \quad (3.3)$$

3.2. Expansión del campo $\hat{\psi}(\vec{x})$ usando la base de funciones de Wannier

Una manera de tratar el término de interacción es considerar que es pequeño y tomarlo como una perturbación al hamiltoniano sin interacción (como en el caso del gas de bose homogéneo en interacción débil [13]). Bajo esta aproximación, es posible describir un sistema que presenta superfluidez, pero no es posible describir una fase aislante, ya que como se mostrará más adelante la localización es debida a los efectos de interacción fuerte.

Este resultado es mostrado de manera clara en [10]. Por tanto es necesario pasar a una expansión que permite simplificar el término de interacción sin recurrir a la aproximación de interacción débil. Para ello resulta útil la expansión en funciones de Wannier.

Las funciones de Wannier se definen como:

$$\omega(\vec{x} - \vec{x}_i) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_i} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}), \quad (3.4)$$

donde $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x})$ corresponde a la función de Bloch, solución al hamiltoniano

$$\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_p(\vec{x}),$$

cumpliendo con la relación de ortogonalidad

$$\int d^3x w^*(\vec{x} - \vec{x}_i) w(\vec{x} - \vec{x}_j) = \delta_{ij}. \quad (3.5)$$

Es así que los operadores de campo se escriben en esta base como

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \sum_j^M \hat{b}_j w(\vec{x} - \vec{x}_j)$$

y

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) = \sum_j^M \hat{b}_j^\dagger w^*(\vec{x} - \vec{x}_j),$$

donde \hat{b}_i y \hat{b}_i^\dagger corresponden al operador de creación y aniquilación en el sitio i y M el número de sitios. Sustituyendo en el Hamiltoniano (3.1) se llega a

$$\hat{H} = - \sum_{ij}^M J_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^M U_{ijkl} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l \quad (3.6)$$

siendo

$$J_{ij} = - \int d^3\vec{x} w^*(\vec{x} - \vec{x}_i) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_p(\vec{x}) \right) w(\vec{x} - \vec{x}_j), \quad (3.7)$$

$$U_{ijkl} = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \int d^3\vec{x} w^*(\vec{x} - \vec{x}_i) w^*(\vec{x} - \vec{x}_j) w(\vec{x} - \vec{x}_k) w(\vec{x} - \vec{x}_l). \quad (3.8)$$

Es aquí donde la elección de las funciones de Wannier permite simplificar la interacción, ya que si la profundidad de los pozos del potencial periódico es mucho mayor que el término de energía cinética, resulta que las funciones de Wannier son localizadas en los sitios dados por los pozos de la red. Es así que, dado el potencial de confinamiento periódico, se encuentra que el elemento de matriz de interacción U_{ijkl} para dos sitios diferentes de la red, es despreciable, comparado con el término de interacción entre partículas en el mismo sitio [4]. Por tanto se puede tomar la siguiente aproximación: $U_{ijkl} = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \int d^3x |w(x)|^4 = U$ si $i = j = k = l$ y $U_{ijkl} = 0$ si $i \neq j \neq k \neq l$. De igual forma para el elemento de matriz J_{ij} se tiene que los términos que más pesan son aquellos en donde i y j son sitios contiguos en la red de manera que este término se aproxima como: $J_{ij} = \int dx^3 w^*(x - x_j) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_0 \right) w(x - x_j) = J$ si i y j son primeros vecinos

Aplicando estas aproximaciones al hamiltoniano del sistema, este queda de la siguiente forma:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (3.9)$$

Este es el hamiltoniano de Bose-Hubbard ², donde $\langle ij \rangle$ es la suma sobre los primeros vecinos y $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ es el operador de número de bosones en el sitio i de la red; los operadores de creación y aniquilación cumplen con las reglas de conmutación $[\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger] = \delta_{ij}$, $[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0$

3.3. Solución de los casos límite y diagrama de fase de la transición superfluida-aislante Mott a temperatura cero

Las características del sistema descrito por el hamiltoniano de Bose Hubbard quedan determinadas por los parámetros U y J , y a partir de estos se establece el comportamiento

²El primer término $-J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ cumple con la propiedad de ser hermitiano pues la suma se realiza sobre todos los sitios de la red apareciendo siempre el conjugado de $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ para todo i y j

del mismo. Este sistema presenta una transición de fase cuántica, es decir una transición del estado base como función de los parámetros del sistema. En esta sección se obtienen las propiedades del estado base del sistema, para los casos en que el factor $U \ll J$ y $J \ll U$. Por último se calcula el diagrama de transición de fase Superfluido Aislante Mott en la aproximación de campo medio.

3.3.1. $J = 0$ Sistema Aislante Mott

En el límite cuando $J \ll U$, es posible despreciar el término de salto J simplificándose el hamiltoniano a

$$\hat{H} = \frac{1}{2}U \sum_i^M \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i^M \hat{n}_i. \quad (3.10)$$

Este hamiltoniano ya se encuentra en su forma diagonal siendo sus funciones propias las funciones del operador de número

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \quad (3.11)$$

$$\psi = |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = (b_1^\dagger)^{n_1} (\hat{b}_1^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{b}_M^\dagger)^{n_M} |0\rangle, \quad (3.12)$$

para un potencial químico fijo, es decir se permite intercambio de partículas del sistema con un reservorio. Ahora la energía del sistema será:

$$E = \frac{1}{2}U \sum_i^M n_i(n_i - 1) - \sum_i^M \mu n_i \quad (3.13)$$

Se busca ahora el mínimo de energía como función del número de partículas por sitio

$$\frac{\partial}{\partial n_j} \left(\frac{1}{2}U \sum_i^M n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right) = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{2}U(2n_j - 1) - \mu = 0 \quad (3.15)$$

$$n_j = \left\lfloor \frac{\mu}{U} + \frac{1}{2} \right\rfloor \quad (3.16)$$

donde $\lfloor x \rfloor$ indica la parte entera de x , esto último es debido a que n_j debe ser entero pues

corresponde al número de ocupación en los estados de Fock.

Es así que el número de partículas en el estado base g como función de μ queda dado por:

$$g(\mu/U) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mu/U < 0 \\ 1 & \text{si } 0 < \mu/U < 1 \\ \vdots & \\ n & \text{si } n-1 < \mu/U < n \end{cases} \quad (3.17)$$

La función del estado base es

$$\psi = \prod_i^M (b_i^\dagger)^g |0\rangle \quad (3.18)$$

con la condición $g-1 < \mu/U < g$. Que corresponde a un estado con un número de partículas bien definido localizadas en los sitios de la red. Esto último implica que las fluctuaciones en el número de partículas para un potencial químico fijo son cero. Por tanto, dada la relación entre las fluctuaciones y la compresibilidad de un sistema: $\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} = \frac{1}{n^2} \frac{\partial n}{\partial \mu} \propto \delta n$ por tanto este sistema tendrá una compresibilidad cero, la cual es una característica de los aislantes. Es por esto que se le denomina a esta fase Aislante Mott en analogía con los sistemas fermionicos descritos por el hamiltoniano de Hubbard.

3.3.2. Gas ideal $U = 0$

Cuando el término de salto y de la energía cinética, dado por J , es mucho mayor que la interacción, es decir $J \gg U$ el Hamiltoniano (3.9) es simplemente

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^M \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j, \quad (3.19)$$

donde $\langle ij \rangle$ representa la suma a primeros vecinos.

Realizamos una transformación discreta de Fourier para diagonalizar este hamiltoniano

$$\hat{b}_i = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \hat{C}_{\vec{k}} \quad (3.20)$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \quad (3.21)$$

donde los sitios quedan especificados por el vector $\vec{R}_i = \sum_l^d n_l^i \vec{a}_l$, siendo \vec{a}_l los vectores de la base unitaria de la red periódica y d la dimensión del sistema. Los operadores $\hat{C}_{\vec{k}}$ y $\hat{C}_{\vec{k}}^\dagger$ los podemos interpretar como los operadores de creación y aniquilación de partículas con momento $\vec{k} = \sum_l^d k_l \vec{f}_l$ en el espacio recíproco, siendo $k_l = \frac{K_l}{M_l}$, con M_l el número de sitios en la dirección l y K_L un número entero. Se cumple que $\vec{a}_i \cdot \vec{f}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Estos operadores satisfacen las mismas reglas de conmutación que los \hat{b}_i y \hat{b}_i^\dagger .

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación (3.19) se obtiene

$$\hat{H} = -\frac{J}{M} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}_j}. \quad (3.22)$$

A partir de la definición de \vec{R}_i y \vec{k} tenemos que $\vec{k} \cdot \vec{R}_i = \sum_l^d 2\pi k_l n_l^i$, por lo que

$$\hat{H} = -\frac{J}{M} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} e^{-\sum_l^d 2\pi i k_l n_l^i} e^{\sum_l^d 2\pi i k_l n_l^j}. \quad (3.23)$$

Cambiando el orden de las sumas y definiendo \sum_j' como la suma sobre los primeros vecinos del sitio i

$$\hat{H} = -\frac{J}{M} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \sum_i \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} e^{-\sum_l^d 2\pi i k_l n_l^i} \sum_j' e^{\sum_l^d 2\pi i k_l n_l^j}. \quad (3.24)$$

Hasta este momento se ha considerado un red periodica de manera general, se resolvera ahora un caso particular, tomando una red cubica simple. En esta red los j vecinos del sitio i serán de la forman: $R_j = \sum_{l=1}^3 k_l (n_l^i \pm 1)$. Realizando explícitamente la suma sobre los sitios vecinos se tiene

$$\hat{H} = -\frac{J}{M} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_i \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} e^{-\sum_{l=1}^3 2\pi k_l n_l^i} \sum_n \left(e^{2\pi i \sum_{l=1, l \neq n}^3 k'_l n_l^i + 2\pi i k'_n (n_n^i + 1)} + e^{2\pi i \sum_{l=1, l \neq n}^3 k'_l n_l^i + 2\pi i k'_n (n_n^i - 1)} \right) \quad (3.25a)$$

$$= -\frac{J}{M} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_i \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} e^{-\sum_{l=1}^3 2\pi k_l n_l^i} \sum_n \left(e^{2\pi i \sum_{l=1}^3 k'_l n_l^i + 2\pi i k'_n} + e^{2\pi i \sum_{l=1}^3 k'_l n_l^i - 2\pi i k'_n} \right) \quad (3.25b)$$

$$= -\frac{J}{M} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_i \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} e^{\sum_{l=1}^3 2\pi i n_l^i (k'_l - k_l)} \sum_n \left(e^{-2\pi i k'_n} + e^{2\pi i k'_n} \right) \quad (3.25c)$$

$$= -\frac{J}{M} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}'} \left(\sum_i e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_i} \right) \sum_n 2 \cos(2\pi k'_n). \quad (3.25d)$$

Por último usando la propiedad de ortogonalidad $\sum_i e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_i} = M \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k, \quad (3.26)$$

siendo $\varepsilon_k = -2J \sum_{n=1}^3 \cos(2\pi k_n)$

Este hamiltoniano resulta ser diagonal en la base de estados:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_0! n_1! \dots n_M!}} (\hat{C}_0^\dagger)^{n_0} (\hat{C}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{C}_M^\dagger)^{n_M} |0_1, 0_2, \dots, 0_M\rangle \quad (3.27)$$

El estado de mínima energía del sistema corresponde a tener a todas las partículas en el estado de menor energía, es decir $k = 0$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (\hat{C}_0^\dagger)^N |0_1, 0_2, \dots, 0_N\rangle \quad (3.28)$$

Aplicando la transformación inversa

$$\hat{C}_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \hat{b}_j^\dagger, \quad (3.29)$$

$$\hat{C}_{\vec{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \hat{b}_j, \quad (3.30)$$

el estado base será:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{M}} \sum_j \hat{b}_j^\dagger \right)^N |0_1, 0_2, \dots, 0_N\rangle. \quad (3.31)$$

y la energía mínima

$$E_0 = -6JN. \quad (3.32)$$

Al suprimir la interacción el estado del sistema pasa a ser entonces un estado completamente deslocalizado pues resulta ser una superposición de estados de fock con un número arbitrario de partículas por sitio, contrastando completamente con el estado Mott donde hay una completa localización en los sitios de la red.

3.4. Esquema de transición: BEC, Superfluido, Mott

Es conveniente, antes de calcular cuantitativamente el diagrama de transición, dar un esquema general de las propiedades del sistema en función de los parámetros U y J , para así definir las regiones donde se está trabajando en términos de estos parámetros.

En el límite extremo donde $U = 0$, el sistema corresponde a un gas ideal de Bose que a temperatura cero se encuentra en una fase condensada (BEC), donde todos los bosones se encuentran en el estado de mínima energía de una sola partícula y el número de partículas en los sitios de la red fluctua. Es importante hacer notar que dado que se ha suprimido completamente la interacción entre partículas, el sistema no presenta superfluidez. Esto se puede hacer ver usando el criterio de Landau, quien encuentra una velocidad crítica por debajo de la cual el sistema puede fluir sin disipación de energía (superfluido), la existencia de dicha velocidad requiere un espectro de excitaciones colectivas el cual debe ser lineal con el momento k [13], esto no ocurre en un sistema sin interacción.

Ahora bien, si se considera una interacción muy pequeña pero finita, la teoría de Bogoliubov para gases débilmente interactuantes muestra que el espectro de excitaciones es lineal en el momento k [10] y por tanto el sistema presenta superfluidez. Si la interacción se incrementa se espera que la fase superfluida se mantenga hasta cierto límite donde los efectos de la interacción dominan sobre los efectos del término de salto entre sitios, en

este régimen $J \ll U$.

En el límite $J = 0$, como ya se vio en las secciones anteriores el sistema se encuentra en una fase aislante de Mott donde las partículas quedan localizadas. En esta fase se pueden encontrar tres tipos de excitación del sistema: la primera es añadir una partícula al sistema donde se requiere una energía

$$\Delta E_p = E_{n+1} - E_n = Un - \mu; \quad (3.33)$$

la segunda es remover una partícula del sistema, dicho proceso requiere una energía de

$$\Delta E_h = E_n - E_{n-1} = -U(n-1) + \mu, \quad (3.34)$$

y la última consiste en retirar una partícula de un sitio de la red para dejarla en otro sitio de la misma, es decir la energía necesaria para mover una partícula dentro de la red. Esta última esta caracterizada por la brecha $\Delta = \Delta E_p + \Delta E_h = U$, la cual es la energía necesaria para crear una excitación y es diferente de cero en la fase aislante de Mott e igual a cero en la fase superfluida.

Al aumentar el valor de J , pero pequeño comparado con el costo en energía para mover una partícula U , habrá una disminución en esta brecha pues el sistema ganará energía, pero seguirá existiendo una brecha de energía entre los estados excitados, por lo que podemos concluir que existirá una región para valores de $J > 0$ donde el sistema seguirá en una fase localizada. Al aumentar el término de salto se llegará a un punto en que el sistema, para minimizar su energía, tenderá a deslocalizarse, pasando así a una fase donde las partículas pueden moverse por todo el sistema, alcanzando a la fase superfluida. La reducción en la brecha de energía con el aumento de J hace suponer que el diagrama de transición tendrá una forma de tipo lóbulos.

3.5. Diagrama de transición a $T = 0$

Como podemos notar el término de salto (J) es el que no permite diagonalizar el hamiltoniano de Bose-Hubbard, por tanto para resolver este problema se desacoplan los términos de sitios vecinos haciendo una aproximación de campo medio, la cual consiste en

suponer que las fluctuaciones de los operadores de creación y aniquilación son pequeñas, es decir los operadores se pueden escribir como

$$\hat{b} = \langle \hat{b} \rangle + \delta \hat{b} \quad (3.35)$$

$$\hat{b}^\dagger = \langle \hat{b}^\dagger \rangle + \delta \hat{b}^\dagger \quad (3.36)$$

despreciando los términos cuadráticos en las fluctuaciones. El término de salto queda como:

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j = (\langle \hat{b}_i \rangle + \delta \hat{b}_i)(\langle \hat{b}_j^\dagger \rangle + \delta \hat{b}_j^\dagger) \quad (3.37a)$$

$$= \langle \hat{b}_i \rangle \langle \hat{b}_j^\dagger \rangle + \delta \hat{b}_i \langle \hat{b}_j^\dagger \rangle + \delta \hat{b}_j^\dagger \langle \hat{b}_i \rangle \quad (3.37b)$$

$$= \langle \hat{b}_i \rangle \langle \hat{b}_j^\dagger \rangle + (\hat{b}_i - \langle \hat{b}_i \rangle) \langle \hat{b}_j^\dagger \rangle + (\hat{b}_j^\dagger - \langle \hat{b}_j^\dagger \rangle) \langle \hat{b}_i \rangle \quad (3.37c)$$

$$= \phi_i^* \hat{b}_j + \hat{b}_i^\dagger \phi_j - \phi_i^* \phi_j \quad (3.37d)$$

siendo $\phi_i^* = \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle$ y $\phi = \langle \hat{b}_i \rangle$. Suponiendo que ϕ_i es real y dado que el sistema es uniforme también sera independiente de i , lo cual implica que no hay ninguna preferencia de salto de un sitio a otro se tiene entonces $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \approx \phi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) - \phi^2$. Sustituyendo este resultado en el hamiltoniano de Bose Hubbard se obtiene que

$$\hat{H}_{MF} = -J \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M (\phi (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) + Jz\phi^2) - \mu \sum_{i=1}^M \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1). \quad (3.38)$$

Realizando la suma sobre los j vecinos de i

$$\hat{H}_{MF} = -Jz \sum_{i=1}^M \phi (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + JzM\phi^2 - \mu \sum_{i=1}^M \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1). \quad (3.39)$$

siendo z el numero de vecinos por sitio, que dependera de la dimensión del sistema, para una red cubica será por ejemplo seis y para una red cuadrada en dos dimensiones, será cuatro.

Dado que el hamiltoniano ya no incluye sumas de operadores en diferentes sitios, queda entonces de la forma $\hat{H}_{MF} = \sum_i \hat{h}_{MF_i}$. Bastará por tanto con minimizar la energía por

sito. Es decir obtener la energía del estado base del hamiltoniano $\hat{h}_{MF} = -Jz\phi \left(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i \right) + Jz\phi^2 + \frac{U}{2}\hat{n}(\hat{n} - 1)$. (Omitimos el índice i ya que el hamiltoniano tiene la misma forma por sitio). Para ello empleamos teoría de perturbaciones hasta cuarto orden, considerando $h_{MF} = \hat{h}_0 + \phi\hat{h}^1$, con:

$$\hat{h}^1 = -Jz(\phi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i)) \quad (3.40)$$

$$\hat{h}_0 = Jz\phi^2 - \mu\hat{n}_i + \frac{U}{2}\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1). \quad (3.41)$$

Es importante hacer notar que contrario al tratamiento común de sistemas con interacción donde está es tratada como perturbación, en este desarrollo se emplea el término relacionado a la energía cinética como perturbación y la interacción como el hamiltoniano sin perturbar. Lo cual permite considerar interacción fuerte.

Como se mostró en la sección anterior los estados propios del hamiltoniano \hat{h}_0 son:

$$|g\rangle = \prod_{i=1}^M \frac{1}{\sqrt{g!}} (\hat{b}_i^\dagger)^g |0\rangle = |g, g, \dots, g\rangle \quad (3.42)$$

y la energía del estado base es

$$E_g = \frac{U}{2}g(g-1) - \mu g + Jz\phi^2 \quad (3.43)$$

con g el número de partícula por sitio en el estado base que cumple la condición $g-1 < \frac{\mu}{U} < g$. La corrección a primer orden es

$$E_0^{(1)} = \langle g | \hat{h}_1 | g \rangle = \langle g | -J\phi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) | g \rangle \quad (3.44a)$$

$$= -J\phi \left(\langle g | \sqrt{g+1} | g+1 \rangle + \langle g | \sqrt{g} | g-1 \rangle \right) \quad (3.44b)$$

$$= -J\phi \left(\sqrt{g+1}\delta_{g,g+1} + \sqrt{g}\delta_{g,g-1} \right) = 0 \quad (3.44c)$$

La corrección a segundo orden es

$$E_0^{(2)} = \sum_{m \neq g} \frac{|\langle m | h^1 | g \rangle|^2}{E_g - E_m} \quad (3.45a)$$

$$= -J\phi \sum_{m \neq g} \frac{|\langle m | (\hat{b}^\dagger + \hat{b}) | g \rangle|^2}{E_g - E_m} \quad (3.45b)$$

$$= J^2 z^2 \phi^2 \sum_{m \neq g} \frac{|(\sqrt{g+1}\delta_{m,g} + \sqrt{g}\delta_{m,g-1})|^2}{E_g - E_m} \quad (3.45c)$$

$$= J^2 z^2 \left(\frac{g+1}{E_g - E_{g+1}} + \frac{g}{E_g - E_{g-1}} \right) \phi^2 \quad (3.45d)$$

$$= J^2 z^2 \left(\frac{g+1}{\mu - Ug} + \frac{g}{U(g-1) - \mu} \right) \quad (3.45e)$$

donde se ha sustituido $E_g - E_{g+1} = \mu - Ug$ y $E_g - E_{g-1} = -\mu + U(g-1)$

De manera similar se encuentra el término de tercer orden y cuarto orden la expresiones para el calculo se muestran en el apéndice C, siendo cero para el tercer orden y para el de cuarto orden es:

$$E_0^{(4)} = J^4 z^4 \phi^4 \left[\frac{g(g-1)}{(E_g - E_{g-1})^2 (E_g - E_{g-2})} + \frac{(g+2)(g+1)}{(E_g - E_{g+1})(E_g - E_{g+2})(E_g - E_{g+1})} \right] \\ - J^4 z^4 \phi^4 \left(\frac{g+1}{E_g - E_{g+1}} + \frac{g}{E_g - E_{g-1}} \right) \left(\frac{g}{(E_g - E_{g-1})^2} + \frac{g+1}{E_g - E_{g+1}} \right) \quad (3.46)$$

el cual se ha confirmado es mayor a cero, para todo $\frac{\mu}{U} > 0$ y $\frac{J}{U}$. La energía por sitio del sistema queda entonces como:

$$E = A_0(\mu, J) + A_2(\mu, J)\phi^2 + A_4(\mu, J)\phi^4, \quad (3.47)$$

donde $A_0 = \frac{U}{2}(g-1)g - \mu g$, $A_2 = Jz + J^2 z^2 \left(\frac{g+1}{\mu - Ug} + \frac{g}{U(g-1) - \mu} \right)$ y $A_4 = \frac{E_4}{\phi^4}$.

Dado que $A_4 > 0$, al minimizar la energía como función del parámetro de orden ϕ se observa un cambio de comportamiento en los mínimos de la energía al pasar de $A_2 > 0$ a $A_2 < 0$. Teniendo en un caso un mínimo en $\phi = 0$ (fase aislante Mott) y en otro $\phi = -\frac{A_2}{2A_4}$ (superfluido). Por tanto se deduce que la transición se da cuando $A_2 = 0$, esto da la

condición de la transición de fase de acuerdo con la teoría de Landau

$$0 = Jz\phi^2 + J^2z^2 \left(\frac{g+1}{\mu - Ug} + \frac{g}{U(g-1) - \mu} \right) \phi^2 \quad (3.48)$$

despejando $\frac{J}{U}$, obtenemos la expresión de la curva que delimita la frontera de la transición.

$$\frac{Jz}{U} = - \left(\frac{g+1}{\mu - g} + \frac{g}{g-1-\mu} \right)^{-1} \quad (3.49)$$

Graficando cada una de las ramas de la expresión anterior para $g = 1, 2$ y 3 se obtiene el diagrama de transición de fase que se presenta en la figura 3.1.

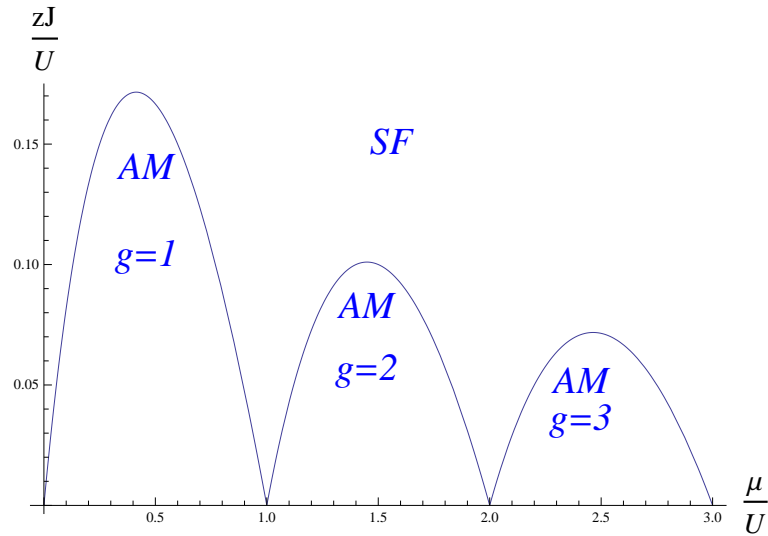


Figura 3.1: Diagrama de transición de fase, los lóbulos internos corresponden a la fase aislante Mott, y la región externa a la fase superfluido.

La gráfica obtenida concuerda con lo esperado del análisis cualitativo. Si fijamos el potencial químico μ dentro de un lóbulo por ejemplo $\frac{\mu}{U} = 1$, al aumentar J existe toda una región donde el sistema continúa en la fase Mott hasta alcanzar la frontera donde

los efectos del término de salto provocan la transición a la fase superfluida. Como se puede observar, el diagrama presenta una forma de lóbulos, mostrando que se hacen más angostos conforme J aumenta, lo que indica que el gap de energía en la fase Mott se reduce al incrementar J . También se nota una disminución de la región Mott al incrementar μ . El incrementar μ implica un aumento en el número de partícula por sitio, esto nos dice que la fase Mott se vuelve inestable al incrementar la densidad de partículas por sitios, pues a menores valores de J se promueve la superfluidez.

Capítulo 4

Casos límite a temperatura finita

De igual manera a como se presentó en el capítulo 2, en este capítulo se estudia el comportamiento del sistema a temperatura finita en los casos límite $J = 0$ y $U = 0$. Debido a la naturaleza distinta de los estados propios de los respectivos hamiltonianos, se empleó un esquema diferente para cada caso. En el caso $J = 0$, el Hamiltoniano conmuta con el operador de número, y por tanto se elige el formalismo de segunda cuantización en el espacio de Fock, es decir, la función de partición se calcula como la traza sobre los estados propios del Hamiltoniano de Mott. Inmediatamente después se realiza el estudio del extremo opuesto cuando $U = 0$, que corresponde a un gas ideal de bosones sujeto a un potencial periódico, en este caso se utiliza el formalismo de integrales funcionales para el cálculo de la función de partición, adicionalmente se calcula el número de partículas y la temperatura crítica al estado condensado.

4.1. Aislante Mott a temperatura finita

En el límite cuando el término de interacción U es mucho más grande que el término de salto J , podemos despreciar el término de tunelamiento y el Hamiltoniano queda simplemente

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^M \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (4.1)$$

donde M es el número de sitios de la red. Este Hamiltoniano conmuta con los operadores de número en cada uno de los sitios, por tanto tiene los mismos estados propios, resulta entonces conveniente calcular la gran función de partición en la base del espacio de Fock ((3.12) (3.12)), en el ensamble gran canónico es

$$Z(T, \mu; U) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_M} \langle n_1, n_2, \dots, n_M | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu)] | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle, \quad (4.2)$$

donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ con k_B la constante de Boltzmann, y las sumas corren sobre todos los enteros positivos n_i para toda i , considerando así todos los estados con un número arbitrario de partículas, explícitamente se tiene que

$$Z(T, \mu, U) = \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} \dots \sum_{n_M=1}^{\infty} \langle n_1, n_2, \dots, n_M | \exp \left\{ -\beta \sum_i^M \left[\frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i \right] \right\} | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle \quad (4.3)$$

y usando que $\hat{n}_i = n_i |n_i\rangle$ se tiene

$$Z(T, \mu, U) = \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} \dots \sum_{n_M} \exp \left\{ -\beta \sum_i \left[\frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \right] \right\} \langle n_1, n_2, \dots, n_M | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle, \quad (4.4)$$

y por la condición de ortonormalidad de los estados de número de ocupación finalmente obtenemos que

$$Z(T, \mu, U) = \prod_{i=1}^M \sum_{n_i=1}^{\infty} \exp \left\{ -\beta \left[\frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \right] \right\}. \quad (4.5)$$

A partir de esta función de partición calculamos el gran potencial termodinámico como dicta la física estadística

$$\Omega(T, \mu; U) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(T, \mu; U)), \quad (4.6)$$

$$\Omega(T, \mu; U) = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\prod_i \sum_{n_i} \exp \left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \right) \right) \right), \quad (4.7)$$

$$\Omega(T, \mu; U) = -\frac{1}{\beta} \sum_i^M \ln \left(\sum_{n_i} \exp(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right)) \right), \quad (4.8)$$

Una de las variables termodinámicas que caracterizan a los sistemas Aislante Mott es la dependencia del número de partículas por sitio como función de μ . El número total de partículas está dado por

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega(T, \mu; U)}{\partial \mu}. \quad (4.9)$$

De aquí que

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_i \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_{n_i} \exp \left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right) \right), \quad (4.10)$$

$$\langle N \rangle = \sum_i^M \frac{\sum_{n_i} n_i \exp \left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right) \right)}{\sum_{n_i} \exp \left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right) \right)}. \quad (4.11)$$

Si se divide entre el número total de sitios obtenemos el número promedio de partículas por sitio M

$$\frac{\langle N \rangle}{M} = \langle n \rangle = \frac{\sum_{n_i} n_i \exp \left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right) \right)}{\sum_{n_i} \exp \left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i \right) \right)}. \quad (4.12)$$

En la figura 4.1 se muestra el número la dependencia del número promedio de partículas como función de μ y T . En esta gráfica se observa número de partículas como función de μ es de tipo escalón cuando la temperatura tiende a cero, lo cual recupera los resultados obtenidos en el capítulo anterior dados por la función (3.14). En esta región de temperaturas muy cercanas a cero, se tiene un cambio abrupto en el número de partículas al pasar por los puntos donde $\frac{\mu}{T}$ es un número entero. Al incrementar la temperatura el cambio se hace cada vez más suave. Para tener una mejor idea de que tan abrupto es este cambio calculamos las fluctuaciones en el número de partículas.

$$\delta \langle n \rangle = \frac{\partial^2 \Omega(T, \mu)}{\partial \mu^2} \quad (4.13)$$

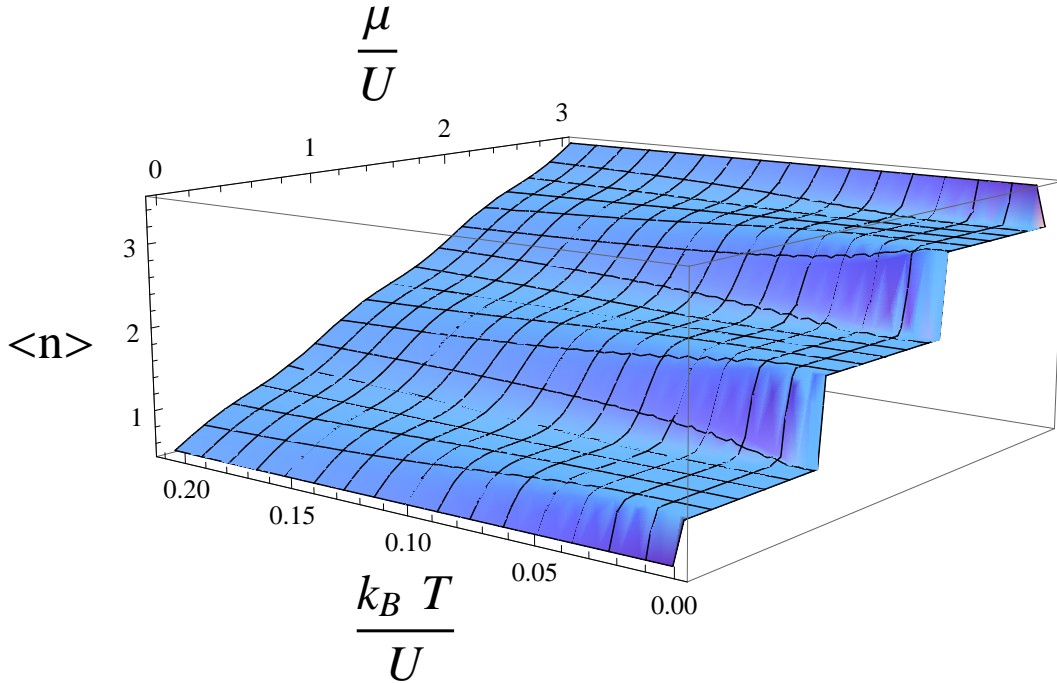


Figura 4.1: Número de partículas como función de μ y T

$$\delta \langle n \rangle = \frac{\sum_{n_i} n_i^2 \exp\left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i\right)\right)}{\sum_{n_i} \exp\left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i\right)\right)} - \left(\frac{\sum_{n_i} n_i \exp\left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i\right)\right)}{\sum_{n_i} \exp\left(-\beta \left(\frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i\right)\right)} \right)^2 \quad (4.14)$$

$$\delta \langle n \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 \quad (4.15)$$

La gráfica de estas fluctuaciones como función de μ para diversos valores de T se muestra en la figura 4.2. En ella se observa que para valores de T pequeños, las fluctuaciones son prácticamente cero en toda la región de $\frac{\mu}{U}$ no entero, pero al aumentar la temperatura aparecen zonas donde las fluctuaciones ya no son despreciables, incrementando principalmente en las regiones cercanas a los valores de $\frac{\mu}{U}$ entero. Para valores aun mayores de la temperatura se tiene valores diferentes de cero para todo valor del potencial químico, esto sucede alrededor de $k_B T \approx 0.1U$.

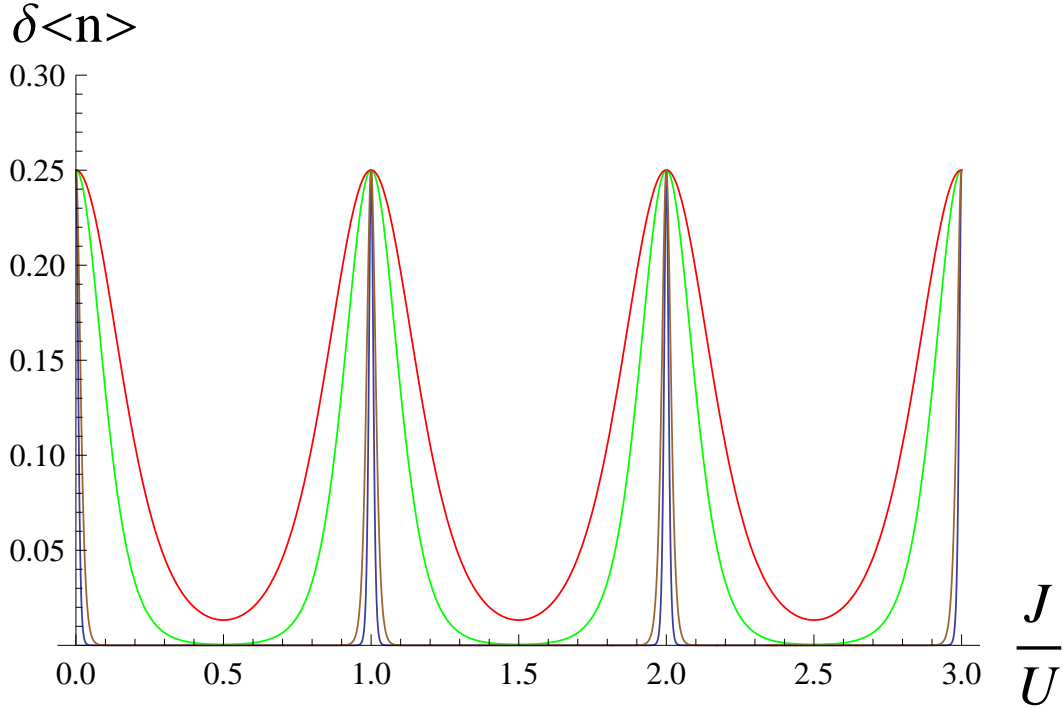


Figura 4.2: Fluctuación del número de partículas como función de μ , para temperaturas de: $k_B T = 0.001U$ (azul), $k_B T = 0.005U$ (café), $k_B T = 0.05U$ (verde) y $k_B T = 0.1U$ (rojo).

Cuando las fluctuaciones son muy cercanas a cero, para todo propósito práctico, puede considerarse al sistema aislante Mott, el aumento de la temperatura favorece entonces la deslocalización, permitiendo que el sistema sea compresible. Este cambio de comportamiento resulta ser continuo y suave, por lo tanto no puede considerarse una transición de fase.

4.2. Gas ideal de bosones en potencial periódico: temperatura finita

Si el término de interacción se hace cero, $U = 0$ el sistema corresponde a un gas ideal de bosones sujetos a un potencial periódico. El Hamiltoniano será simplemente:

$$\hat{H}_{BEC} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j. \quad (4.16)$$

Si empleamos la transformación 3.20 usada en el caso a $T = 0$, se tiene que el Hamiltoniano anterior es diagonal

$$\hat{H}_{BEC} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{C}_{\vec{k}}^\dagger \hat{C}_{\vec{k}}, \quad (4.17)$$

donde $\varepsilon_{\vec{k}} = -2J \sum_{l=1}^d \cos(2\pi k_l)$, d es la dimensión espacial del sistema y $\vec{k} = \sum_l k_l \vec{b}_l$. Nótese que la aproximación a primeros vecinos usada para deducir el Hamiltoniano de Bose-Hubbard conduce al espectro de energía anterior cuando $U = 0$, el cual solo considera la primera banda del espectro de energía completo.

Si empleamos los resultados obtenidos en la sección 2.4 la función de partición se puede escribir en términos de integrales funcionales como:

$$Z = \int \prod_{\vec{k}} D\phi_{\vec{k}}^*(\tau) D\phi_{\vec{k}}(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left(\sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_{\vec{k}}(\tau) + \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\tau) \phi_{\vec{k}}(\tau) \right)}, \quad (4.18)$$

con $\phi_{\vec{k}}$ el campo escalar de bosones y \vec{k} en la primera zona de Brillouin, es decir, $-\frac{1}{2} < k_l \leq \frac{1}{2}$

Esta integral es posible evaluarla aplicando una transformada discreta fourier, escribiendo los campos ahora como funciones que toman valores discretos en un espacio de frecuencias $\omega_n = 2\pi n/\beta$, se le llama a estas frecuencias de Matsubara.

La transformación explícitamente es:

$$\phi_{\vec{k}}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_n e^{i\tau\omega_n} \phi_{\vec{k}}(\omega_n), \quad (4.19)$$

$$\phi_{\vec{k}}^*(\tau) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_n e^{-i\tau\omega_n} \phi_{\vec{k}}^*(\omega_n). \quad (4.20)$$

La integral queda como

$$Z = \int \frac{\prod_n \prod_{\vec{k}} d\phi_{\vec{k}}^*(\tau) d\phi_{\vec{k}}(\omega_n)}{2\pi i} e^{-\beta \sum_n \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\omega_n) (-i\omega - \mu + \varepsilon_{\vec{k}}) \phi_{\vec{k}}(\omega_n)}. \quad (4.21)$$

Esta ya es una integral Gaussiana sobre los complejos que podemos resolver

$$Z = \prod_n \prod_{\vec{k}} \frac{1}{\beta (-i\omega - \mu + \varepsilon_{\vec{k}})}. \quad (4.22)$$

El Gran potencial termodinámico sera

$$\Omega(T, \mu, J) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(T, \mu, J) = \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\vec{k}} \ln \left(\beta \left(-i\omega - \mu + \varepsilon_{\vec{k}} \right) \right), \quad (4.23)$$

y el número de partículas

$$N(T, \mu, J) = -\frac{\partial \Omega(T, \mu; U)}{\partial \mu} = \sum_n \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\beta \left(-i\omega - \mu + \varepsilon_{\vec{k}} \right)}, \quad (4.24)$$

$$N(T, \mu, J) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega_n} \frac{1}{\beta \left(-i\omega_n - \mu - 2J \sum_l \cos(2\pi k_l) \right)}. \quad (4.25)$$

La suma sobre frecuencias de Matsubara es conocida [24] y da como resultado

$$\sum_{\omega_n} \frac{1}{\beta \left(-i\omega_n + x \right)} = \frac{1}{e^{\beta x} - 1}. \quad (4.26)$$

Por tanto el número de partículas es

$$N(T, \mu, J) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\beta \left(-\mu - 2J \sum_l \cos(2\pi k_l) \right)} - 1}. \quad (4.27)$$

Que coincide con la expresión del número promedio de bosones presentada en libros de texto (ver por ejemplo [34]).

Buscamos ahora la temperatura de transición al estado condensado T_c , esta temperatura se define como la temperatura en la cual, en el límite termodinámico, el número de partículas en el estado base es cero y para cualquier temperatura por debajo de T_c se provoca una ocupación macroscópica del estado base.

Separamos la suma que aparece en (4.27) en el número de partículas en el estado base N_0 y el número de partículas en estados excitados N_e , es decir,

$$N(T, \mu, J) = N_0 + N_e = \frac{1}{e^{\beta \left(-\mu - 2Jd \right)} - 1} + \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{e^{\beta \left(-\mu - 2J \sum_l \cos(2\pi k_l) \right)} - 1}. \quad (4.28)$$

En el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$ y $M \rightarrow \infty$, pero $\frac{N}{M} = \rho = cte$, el vector \vec{k} pasa a tomar un valores en el continuo dentro de la primera zona de Brillouin, por tanto la suma

se puede sustituir por una integral. En tres dimensiones queda como

$$N(T, \mu, J) = \frac{1}{e^{\beta(-\mu-2Jd)} - 1} + M \int d\vec{k}^3 \frac{1}{e^{\beta(-\mu-2J\sum_l \cos(2\pi k_l))} - 1} \quad (4.29)$$

Dado que el número promedio de partículas en el estado \vec{k} es una cantidad no negativa, necesariamente se debe cumplir que

$$-\mu - 2J \sum_{l=1}^d \cos(2\pi k_l) > 0 \quad (4.30)$$

para todo \vec{k} , lo cual implica que $\mu \leq -2Jd$. El potencial químico como función de T es entonces una función decreciente. En la temperatura crítica T_c el número de partículas en el estado base es $N_0 = 0$ y el potencial químico alcanza el mínimo de energía $\mu = -2Jd$

$$\frac{N}{M} = \int d\vec{k}^d \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T_c} (2Jd - 2J \sum_l^d \cos(2\pi k_l))} - 1} \quad (4.31)$$

o

$$\rho = \int d\vec{k}^d \frac{e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd - 2J \sum_l^d \cos(2\pi k_l))}}{1 - e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd - 2J \sum_l^d \cos(2\pi k_l))}}, \quad (4.32)$$

y dado que se satisface la condición (4.30) podemos escribir

$$\rho = \int d\vec{k}^d e^{-\frac{1}{k_B T_c} (Jd - J \sum_l^d \cos(2\pi k_l))} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{k_B T_c} (Jd - J \sum_l^d \cos(2\pi k_l)) n} \quad (4.33)$$

$$= \int d\vec{k}^d \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd - 2J \sum_l^d \cos(2\pi k_l)) n}. \quad (4.34)$$

Si ahora se intercambian la suma y la integral

$$\rho = \sum_{n=1}^{\infty} \int d\vec{k}^d e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd - 2J \sum_l^d \cos(2\pi k_l)) n} \quad (4.35)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd)n} \int d\vec{k}^d e^{\frac{1}{k_B T_c} (2J \sum_l^d \cos(2\pi k_l)) n} \quad (4.36)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd)n} \prod_l^d \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} dk_l e^{\frac{1}{k_B T_c} (2J \cos(2\pi k_l)) n} \quad (4.37)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{1}{k_B T_c} (2Jd)n} \prod_l^d I_0 \left[\frac{2Jn}{k_B T_c} \right], \quad (4.38)$$

donde $I_0(z)$ denota la función modificada de Bessel de orden cero

$$I_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{-z \cos(\theta)} d\theta. \quad (4.39)$$

La suma no puede ser obtenida de manera analítica, pero usando métodos numéricos se puede obtener una solución para $k_B T_c / J$ como función de ρ como se muestra en la figura 4.3.

Para un llenado unitario, es decir, una partícula por sitio $\rho = 1$, se tiene que $k_B T_c = 5.5951J$ y para $\rho = 2$, $k_B T_c = 9.591J$. Se concluye por tanto que la temperatura crítica es proporcional al término de salto, y esta constante de proporcionalidad aumenta conforme aumenta la densidad de partículas por sitio [29].

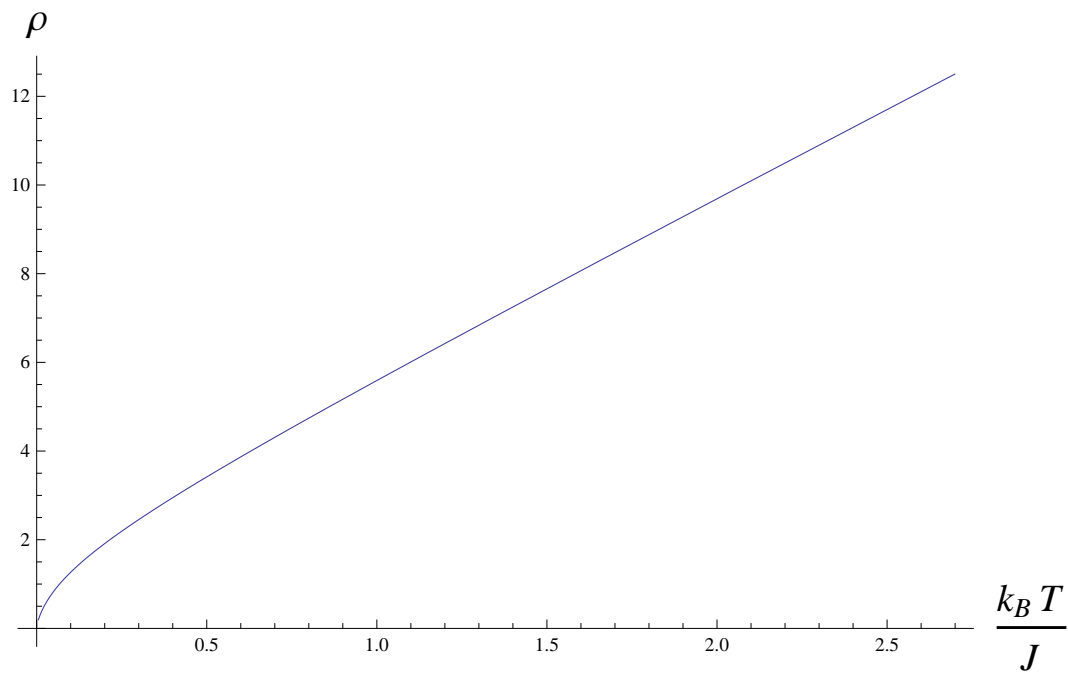


Figura 4.3: Densidad de partículas como función de la temperatura crítica de condensación, para un sistema con $d = 3$

Capítulo 5

Diagrama de transición entre las fases superfluida y aislante a temperatura finita

En este capítulo se consideran los efectos de fluctuaciones térmicas en la obtención de la frontera correspondiente a la línea de transición que separa las fases que experimenta un gas de Bose en redes ópticas descrito por el hamiltoniano de Bose Hubbard (3.9). Para tal efecto se parte de la expresión de la función de partición escrita como una integral funcional, como ha sido descrito en el capítulo 2, ver ecuación (2.53). La complejidad del cálculo de la función de partición radica, no en el término de interacción como ocurre en la situación estándar en la teoría del gas de Bose en interacción débil [13], sino en el término de tunelamiento [15]. Esta dificultad se ve superada al usar la transformación de Hubbard Stratonovich en la función de partición, transformación que es implementada después de calcular una función de partición efectiva del tipo de campo medio. La teoría de Landau puede aplicarse cuando se hace una expansión en el campo de Hubbard Stratonovich, el cual se identifica con el parámetro de orden.

5.1. La función de partición asociada al Hamiltoniano Bose Hubbard

En el capítulo anterior se estudiaron los efectos de las fluctuaciones térmicas en los casos límite $J = 0$ y $U = 0$ del Hamiltoniano de Bose-Hubbard. Se considera ahora el Hamiltoniano completo (3.9) y se escribe la función de partición en el formalismo de integrales funcionales

$$Z = \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_i^M \phi_i^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_i(\tau) - J \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau)) + \frac{U}{2} \sum_i^M \phi_i^{*2}(\tau) \phi_i^2(\tau) \right]}, \quad (5.1)$$

donde M es el número total de sitios, y el símbolo $\langle ij \rangle$ indica que la suma se realiza sobre los índices i y j correspondientes a sitios vecinos. Esta condición se puede reescribir empleando los elementos de matriz J_{ij} , siendo estos J si i y j son sitios vecinos y cero en caso contrario,

$$Z = \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_i^M \phi_i^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_i(\tau) - \sum_{ij}^M (\phi_i^*(\tau) J_{ij} \phi_j(\tau)) + \frac{U}{2} \sum_i^M \phi_i^{*2}(\tau) \phi_i^2(\tau) \right]}. \quad (5.2)$$

Para facilitar el estudio hacemos adimensional la acción usando como escala de energía a U , así haciendo el cambio de variable en la integral sobre τ y redefiniendo las variables $\tau = \tau U$, $J = \frac{J}{U}$, $\beta = \beta U$, $\mu = \frac{\mu}{U}$, la función de partición queda como:

$$Z = \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_i \phi_i^* \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_i(\tau) - \sum_{ij} \phi_i^*(\tau) J_{ij} \phi_j(\tau) + \frac{1}{2} \sum_i \phi_i^{*2}(\tau) \phi_i^2(\tau) \right]}. \quad (5.3)$$

Si nos valemos del hecho de que el sistema es homogéneo en los sitios, es decir, es traslacionalmente invariante bajo traslaciones por vectores de la celda unitaria, podemos recurrir nuevamente a una aproximación tipo campo medio sobre el término de tunelamiento. Así consideramos que los efectos sobre el sitio i , debidos a los campos en los sitios vecinos j , no se alejan mucho del valor promedio, entonces, podría considerarse que se recurre a una aproximación de orden cero en las fluctuaciones del campo alrededor del

promedio sobre sitios vecinos, es decir,

$$\phi_i(\tau) \approx \sum_j' \frac{1}{z} \phi_j(\tau). \quad (5.4)$$

donde z nuevamente corresponde al número de vecinos del sitios i . Con esta aproximación el término de salto queda como:

$$-\sum_{ij} \phi_i^*(\tau) J_{ij} \phi_j(\tau) = -\sum_i \phi_i^*(\tau) \sum_j J_{ij} \phi_j(\tau) \approx -\sum_i \phi_i^*(\tau) z J \phi_i(\tau), \quad (5.5)$$

por tanto la función de partición es

$$Z = \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_i \phi_i^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu\right) \phi_i(\tau) - \sum_{ij} \phi_i^*(\tau) z J \delta_{ij} \phi_j(\tau) + \frac{1}{2} \sum_i \phi_i^{*2}(\tau) \phi_i^2(\tau) \right]}. \quad (5.6)$$

Aplicamos ahora la transformación de Hubbard Stratonovich, la cual permite desacoplar los campos ϕ_i en el término de tunelamiento, a expensas de acoplarlo con un nuevo campo $\psi(\tau)$, la transformación consiste en usar la identidad (ver apéndice B):

$$e^{\int_0^\beta d\tau \sum_{ij} \phi_i^*(\tau) A_{ij} \phi_j(\tau)} = \int \prod_i D\psi_i^*(\tau) \psi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,j} \psi_i^*(\tau) A_{ij}^{-1} \psi_j(\tau) + \int_0^\beta \sum_i (\psi_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) \psi_i(\tau))}. \quad (5.7)$$

En nuestro caso $A_{ij} = zJ\delta_{ij}$ y por lo tanto $A_{ij}^{-1} = \frac{1}{zJ}\delta_{ij}$. Sustituyendo en la expresión de la función de partición se obtiene

$$Z = \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left(\sum_i \phi_i^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu\right) \phi_i(\tau) + \frac{1}{2} \sum_i \phi_i^{*2}(\tau) \phi_i^2(\tau) \right)} \times \int \prod_i D\psi_i^*(\tau) D\psi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_{ij} \psi_i^*(\tau) \frac{1}{zJ} \delta_{ij} \psi_j(\tau) - \sum_i (\psi_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) \psi_i(\tau)) \right]} \quad (5.8)$$

En este punto definimos $S_{0i}[\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \phi_i^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu\right) \phi_i(\tau) + \frac{1}{2} \phi_i^*(\tau)^2 \phi_i(\tau)^2$ que solo considera al campo de Bose correspondiente al mismo sitio.

Cambiando el orden de integración y reescribiendo algunos términos se tiene que

$$Z = \int \prod_i D\psi_i^*(\tau) D\psi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left(\sum_{ij} \psi_i^*(\tau) \frac{1}{zJ} \delta_{ij} \psi_j(\tau) \right)} \times \\ \int \prod_i D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-\sum_i S_{0i} + \int_0^\beta \sum_i (\psi_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) \psi_i(\tau))} \quad (5.9)$$

que explícitamente puede simplificarse a

$$Z = \int \prod_i D\psi_i^*(\tau) D\psi_i(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \left(\sum_{ij} \psi_i^*(\tau) \frac{1}{zJ} \delta_{ij} \psi_j(\tau) \right)} \times \\ \prod_i \int D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-S_{0i} + \int_0^\beta d\tau (\psi_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) \psi_i(\tau))} \quad (5.10)$$

La expresión anterior puede escribirse de forma más compacta como

$$Z = \int \prod_i D\psi_i^*(\tau) D\psi_i(\tau) e^{-S[\psi^*, \psi, \phi^*, \phi]} \quad (5.11)$$

donde la acción $S[\psi^*, \psi, \phi^*, \phi]$ se define como

$$S[\psi^*, \psi, \phi^*, \phi] = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_i \psi_i^*(\tau) \frac{1}{zJ} \psi_j(\tau) \right) - \\ \sum_i \ln \int D\phi_i^*(\tau) D\phi_i(\tau) e^{-S_{0i} + \int_0^\beta d\tau (\psi_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) \psi_i(\tau))} \quad (5.12)$$

Puesto que el sistema es homogéneo, existe una simetría traslacional en los sitios, se espera entonces que $\psi_i = \psi$ y $\phi_i = \phi$ sean independientes del sitio

$$S[\psi^*, \psi, \phi^*, \phi] = M \left[\int_0^\beta d\tau \left(\psi^*(\tau) \frac{1}{zJ} \psi(\tau) \right) - \right. \\ \left. \ln \int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0 + \int_0^\beta d\tau (\psi^*(\tau) \phi(\tau) + \phi^*(\tau) \psi(\tau))} \right]. \quad (5.13)$$

Este valor esperado, $\langle e^{\int_0^\beta d\tau (\psi^*(\tau) \phi(\tau) + \phi^*(\tau) \psi(\tau))} \rangle_0$, en principio puede ser expandi-

do como una serie de Taylor alrededor de $\psi = 0$. Desarrollamos entonces el funcional $F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)] = \ln \int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0 + [\psi^*(\tau)\phi(\tau) + \phi^*(\tau)\psi(\tau)]}$ en potencias de $\psi(\tau)$ y $\psi^*(\tau)$.

Recordando que el desarrollo en serie de Taylor de una funcional [1] está dado por:

$$\begin{aligned}
F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)] &= F[0, 0] + \int d\tau \left(\frac{\delta F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi(\tau)} \Big|_{\psi=0} \psi(\tau) + \frac{\delta F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi^*(\tau)} \Big|_{\psi^*=0} \psi^*(\tau) \right) \\
&+ \frac{1}{2} \left(\int d\tau_1 d\tau_2 \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi(\tau_1) \delta \psi(\tau_2)} \Big|_{\psi^*=\psi=0} \psi(\tau_1) \psi(\tau_2) + \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi^*(\tau_1) \delta \psi(\tau_2)} \Big|_{\psi^*=\psi=0} \psi^*(\tau_1) \psi(\tau_2) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi^*(\tau_1) \delta \psi^*(\tau_2)} \Big|_{\psi^*=\psi=0} \psi^*(\tau_1) \psi^*(\tau_2) + \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi^*(\tau_1) \delta \psi(\tau_2)} \Big|_{\psi^*=\psi=0} \psi(\tau_1) \psi^*(\tau_2) + \dots \right)
\end{aligned} \tag{5.14}$$

y calculamos explícitamente cada término:

$$\frac{\delta F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi(\tau_1)} = \frac{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0} \phi^*(\tau_1)}{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0}} = \langle \phi^*(\tau_1) \rangle_0 = 0 \tag{5.15}$$

$$\frac{\delta F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi^*(\tau_1)} = \frac{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0} \phi(\tau_1)}{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0}} = \langle \phi(\tau_1) \rangle_0 = 0 \tag{5.16}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta \psi(\tau_1) \delta \psi(\tau_2)} &= \frac{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0} \phi^*(\tau_1) \phi^*(\tau_2)}{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0}} + \\
&\frac{\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0} \phi^*(\tau_1) \int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0} \phi^*(\tau_2)}{(\int D\phi^*(\tau) D\phi(\tau) e^{-S_0})^2} \\
&= \langle \phi^*(\tau_1) \phi^*(\tau_2) \rangle_0 + \langle \phi^*(\tau_1) \rangle \langle \phi^*(\tau_2) \rangle_0 \tag{5.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta\psi^*(\tau_1)\delta\psi^*(\tau_2)} &= \frac{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi(\tau_1)\phi(\tau_2)}{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}} + \\ &\frac{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi(\tau_1)\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi(\tau_2)}{(\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0})^2} \\ &= \langle\phi(\tau_1)\phi(\tau_2)\rangle_0 + \langle\phi(\tau_1)\rangle\langle\phi(\tau_2)\rangle_0 \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta\psi^*(\tau_1)\delta\psi(\tau_2)} &= \frac{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi(\tau_1)\phi^*(\tau_2)}{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}} + \\ &\frac{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi(\tau_1)\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi^*(\tau_2)}{(\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0})^2} \\ &= \langle\phi(\tau_1)\phi^*(\tau_2)\rangle_0 + \langle\phi(\tau_1)\rangle\langle\phi^*(\tau_2)\rangle_0 \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 F[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]}{\delta\psi(\tau_1)\delta\psi^*(\tau_2)} &= \frac{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2)}{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}} + \\ &\frac{\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi^*(\tau_1)\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}\phi(\tau_2)}{(\int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0})^2} \\ &= \langle\phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2)\rangle_0 + \langle\phi^*(\tau_1)\rangle\langle\phi(\tau_2)\rangle_0. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Llegamos entonces a

$$F[\phi^*, \phi] = \ln Z_0 + \int d\tau_1 d\tau_2 \langle T\phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2)\rangle \psi^*(\tau_1)\psi(\tau_2) + .. \quad (5.21)$$

Con $Z_0 = \int D\phi^*(\tau)D\phi(\tau)e^{-S_0}$ que corresponde a la función de partición sobre un sitio con $J = 0$. Sustituyendo (5.21) en (5.11) se llega a

$$Z = \int \prod_i D\psi_i^*(\tau)D\psi_i(\tau) e^{-M \left[\int_0^\beta d\tau \psi_i^*(\tau) \frac{1}{zJ} \psi_j(\tau) - \ln Z_0 - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle \phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2)\rangle \psi^*(\tau_1)\psi(\tau_2) + .. \right]} \quad (5.22)$$

Si suponemos también que el campo de Hubbard Stratonovich ψ no depende de τ la integral queda como

$$Z = \int \prod_i D\psi_i^* D\psi_i e^{-M \left[-\ln Z_0 + \frac{\beta}{zJ} - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle \phi^*(\tau_1) \phi(\tau_2) \rangle |\psi|^2 + \vartheta |\psi|^4 \right]} \quad (5.23)$$

Definimos la acción efectiva

$$S = -\ln Z_0 + \left[\frac{\beta}{zJ} - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle \phi^*(\tau_1) \phi(\tau_2) \rangle \right] |\psi|^2 + \vartheta |\psi|^4 \quad (5.24)$$

$$= a_0(T, \mu) + a_2(T, \mu, J) |\psi|^2 + a_4(T, \mu, J) |\psi|^4. \quad (5.25)$$

Con M el número de sitios de la red periódica.

$$Z = \int \prod_i D\psi_i^*(\tau) D\psi_i(\tau) e^{-MS[\psi_i^*(\tau), \psi_i(\tau)]}. \quad (5.26)$$

Si suponemos que el número de sitios es muy grande, podemos aplicar la aproximación de punto silla, de tal forma que la trayectoria del campo ψ que más contribuye corresponde al mínimo de la acción. Bajo esta aproximación, el Gran potencial será $\Omega[T, \mu, J] = \frac{1}{\beta} S[\psi_{min}^*, \psi_{min}]$ con la condición para los campos

$$\left. \frac{\delta S[\psi^*, \psi]}{\delta \psi} \right|_{\psi_{min}} = 0, \quad (5.27)$$

$$\left. \frac{\delta S[\psi^*, \psi]}{\delta \psi^*} \right|_{\psi_{min}} = 0. \quad (5.28)$$

De (5.27) y (5.28) se tiene

$$0 = \psi^* \left(2a_2(T, \mu, J) + 4a_4(T, \mu, J) |\psi|^2 \right), \quad (5.29)$$

$$0 = \psi \left(2a_2(T, \mu, J) + 4a_4(T, \mu, J) |\psi|^2 \right). \quad (5.30)$$

Si $a_4(T, \mu, J) > 0$ se tendrán dos tipos de soluciones dependiendo del signo de $a_2(T, \mu, J)$. Si $a_2(T, \mu, J) < 0$ el mínimo sera $\psi = \psi^* = 0$, si $a_2(T, \mu, J) > 0$ el mínimo sera $|\psi|^2 = \frac{-a_2(T, \mu, J)}{2a_4(T, \mu, J)}$.

Este cambio de signo en el coeficiente de orden cuadrático representará un cambio significativo en la forma de la acción, pasando de tener un mínimo estable en $\psi = 0$ a tener un máximo local en ese punto y mínimos en un anillo de radio $\frac{-a_2(T,\mu,J)}{a_4(T,\mu,J)}$ (ver figura 5.1). Resumiendo los resultados anteriores se tiene que: los mínimos de la acción determinan

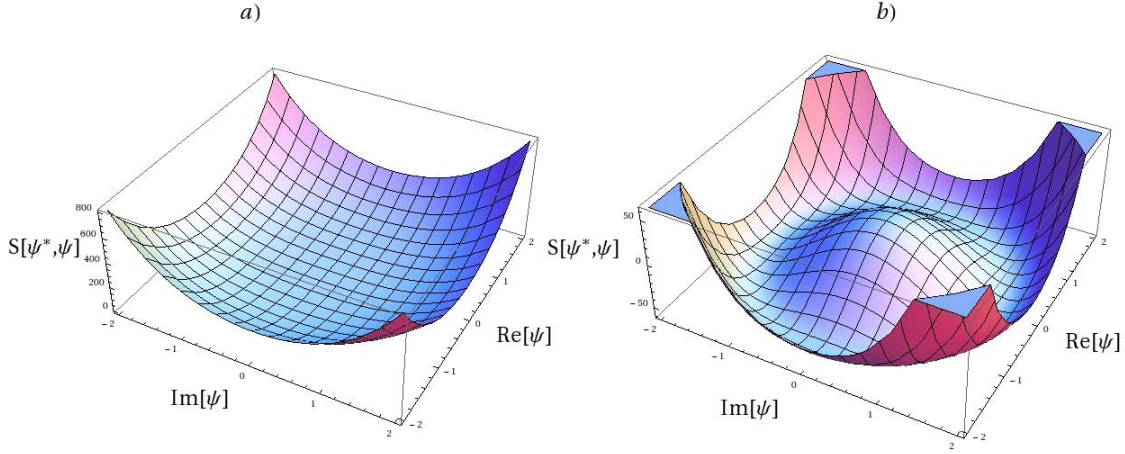


Figura 5.1: Acción efectiva como función del parámetro de orden a) $a_2(T, \mu, J) > 0$, b) $a_2(T, \mu, J) < 0$

el estado de equilibrio del sistema; el funcional se encuentra expresado como una serie de potencias del parámetro ψ cuyo valor es cero y diferente de cero en dos fases diferentes, por lo que puede ser tomado como parámetro de orden; y por último la expansión conserva la simetría del sistema. Por todo esto la acción puede ser tratada como el funcional en la teoría de Landau. Por lo tanto la frontera de la transición de fase estará dada por $a_2(T, \mu, J) = 0$, es decir,

$$\frac{\beta}{zJ} - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle \phi^*(\tau_1) \phi(\tau_2) \rangle = 0. \quad (5.31)$$

Al valor esperado del campo y su conjugado suele llamarse función de correlación de dos tiempos o función de Green [39]. Dado que este valor esperado es un promedio sobre la acción $S_0[\phi^*, \psi]$, resulta más conveniente regresar a una descripción de operadores, pero ahora en el esquema de interacción [13] para tomar en cuenta la dependencia del campo ψ en τ . Tomando los promedios con el Hamiltoniano $H_0 = \frac{1}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1)$ sobre estados de Fock,

donde los operadores son

$$\hat{b}^\dagger(\tau) = e^{H_0\tau}\hat{b}^\dagger e^{-H_0\tau}, \quad (5.32)$$

$$\hat{b}(\tau) = e^{H_0\tau}\hat{b}e^{-H_0\tau}. \quad (5.33)$$

Por tanto la función de Green en esta representación es

$$\langle \phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2) \rangle = \frac{\sum_n \langle n | e^{-\beta\hat{H}_0} T_\tau \{ \hat{b}^\dagger(\tau_1)\hat{b}(\tau_2) \} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta\hat{H}_0} | n \rangle}, \quad (5.34)$$

donde T_τ es el operador de ordenamiento temporal. Podemos reescribir la acción de este operador usando funciones escalón

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 0 & \text{si } \tau < 0 \\ 1 & \text{si } \tau > 0 \end{cases} \quad (5.35)$$

Para simplificar el cálculo escribiremos también $Z_0 = \sum_n \langle n | e^{-\beta\hat{H}_0} | n \rangle$, usamos la misma notación que en la representación de integrales funcionales ya que la función de partición no depende de la base que se use para calcularla. Así

$$\langle \phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2) \rangle = Z_0^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | e^{-\beta\hat{H}_0} \left(\theta(\tau_1 - \tau_2) \{ \hat{b}^\dagger(\tau_1)\hat{b}(\tau_2) \} + \theta(\tau_2 - \tau_1) \{ \hat{b}(\tau_2)\hat{b}^\dagger(\tau_1) \} \right) | n \rangle \quad (5.36)$$

$$\langle \phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2) \rangle = Z_0^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | e^{-\beta\hat{H}_0} \left(\theta(\tau_1 - \tau_2) \{ e^{H_0\tau_1}\hat{b}^\dagger e^{-H_0\tau_1} e^{H_0\tau_2}\hat{b} e^{-H_0\tau_2} \} + \theta(\tau_2 - \tau_1) \{ e^{H_0\tau_2}\hat{b} e^{-H_0\tau_2} e^{H_0\tau_1}\hat{b}^\dagger e^{-H_0\tau_1} \} \right) | n \rangle \quad (5.37)$$

Usando ahora que los estados de número de ocupación $|n\rangle$ son también estados propios de H_0 y están normalizados $\langle n|n\rangle = 1$ llegamos a

$$\langle \phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2) \rangle = Z_0^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \left(\theta(\tau_1 - \tau_2) n \{ e^{E_n \tau_1 - E_{n-1} \tau_1} e^{E_{n-1} \tau_2 - E_n \tau_2} \} + \theta(\tau_2 - \tau_1) (n+1) \{ e^{E_n \tau_2 - E_{n+1} \tau_2} e^{E_{n+1} \tau_1 - E_n \tau_1} \} \right) \quad (5.38)$$

Sustituyendo las diferencias de energías $E_n - E_{n-1} = n - 1 - \mu$ y $E_{n+1} - E_n = n - \mu$ obtenemos.

$$\langle \phi^*(\tau_1)\phi(\tau_2) \rangle = Z_0^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta \frac{1}{2} n(n-1) - \mu n} \left(\theta(\tau_1 - \tau_2) n \{ e^{(n-1-\mu)\tau_1} e^{(\mu-(n-1))\tau_2} \} + \theta(\tau_2 - \tau_1) (n+1) \{ e^{(\mu-n)\tau_2} e^{(n-\mu)\tau_1} \} \right) \quad (5.39)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (5.31) y realizando las integrales con respecto a τ_1 y τ_2 se tiene

$$\frac{\beta}{zJ} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{1}{2} n(n-1) - \mu n} \left(\frac{n}{\mu-n+1} \left(\beta - \frac{1}{n-1-\mu} \left(e^{\beta(n-1-\mu)} - 1 \right) \right) + \frac{n+1}{\mu-n} \left(\frac{1}{n-\mu} \left(1 - e^{\beta(\mu-n)} \right) - \beta \right) \right)}{\sum_n e^{\beta \frac{1}{2} n(n-1) - \mu n}} \quad (5.40)$$

de donde podemos despejar J

$$J = \frac{\beta}{z} \frac{\sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta \frac{1}{2} n(n-1) - \mu n}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{1}{2} n(n-1) - \mu n} \left(\frac{n}{\mu-n+1} \left(\beta - \frac{1}{n-1-\mu} \left(e^{\beta(n-1-\mu)} - 1 \right) \right) + \frac{n+1}{\mu-n} \left(\frac{1}{n-\mu} \left(1 - e^{\beta(\mu-n)} \right) - \beta \right) \right)} \quad (5.41)$$

Obtenemos así el diagrama de transición teniendo J como función de μ (figura 5.2).

Como se esperaba cuando T es muy pequeña se recupera el diagrama encontrado en el capítulo 3 a $T = 0$. Notamos que al aumentar la temperatura la zona de superfluidez disminuye lo que implica que las fluctuaciones térmicas provocan una decoherencia en la fase de las partículas. Analicemos ahora lo que ocurre abajo de los lóbulos. En esta región el parámetro de orden es $\psi = 0$, por lo tanto bajo nuestra aproximación de punto silla el gran potencial esta dado por

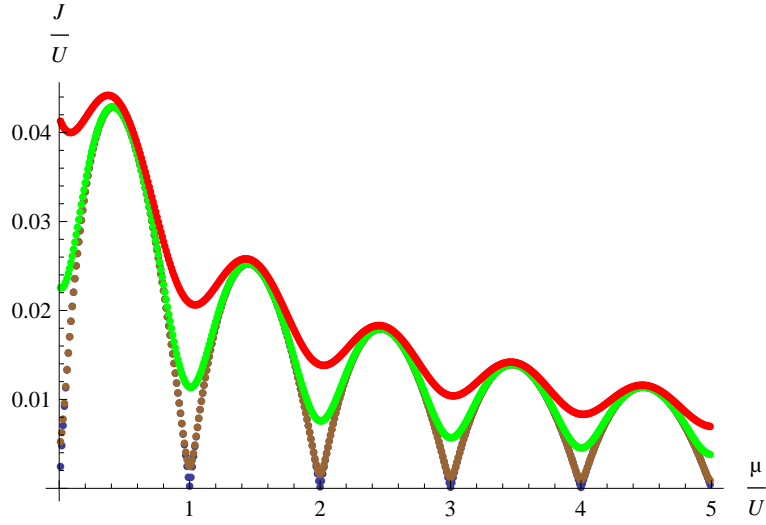


Figura 5.2: Diagrama de transición de fase para temperaturas $k_B T = 0.001U$ (azul) $k_B T = 0.01U$ (café) $k_B T = 0.05U$ (verde) $k_B T = 0.1U$ (rojo) y $z = 4$

$$\Omega(T, \mu, J) = \frac{1}{\beta} S[\psi^* = 0, \psi = 0] = \frac{1}{\beta} \ln Z_0 \quad (5.42)$$

Que corresponde al gran potencial obtenido en el capítulo cuatro, los resultados obtenidos en el capítulo anterior. Al aumentar la temperatura existirá entonces regiones en el eje $\frac{\mu}{U}$ donde las fluctuaciones son grandes y regiones donde las fluctuaciones se aproximan mucho a cero, esto para temperaturas por debajo de $T \approx 0.1$. Las regiones donde las fluctuaciones son casi nulas pueden considerarse como aislante Mott pues presentarán compresibilidad muy cercana a cero y las regiones donde no es posible despreciar las fluctuaciones representarán una fase que llamaremos normal o térmica.

Al aumentar aun más la temperatura hay fluctuaciones para todo valor de $\frac{\mu}{U}$ por lo tanto ya no es posible considerar la región por debajo de los lóbulos como aislante Mott, esto quiere decir que las fluctuaciones térmicas promueven la deslocalización de las partículas, por lo cual se tiene una transición entre un estado superfluido y una fase normal.

Capítulo 6

Conclusión

Se obtuvo el diagrama de transición de fase a temperatura cero y a finita que experimenta un gas de bosones en interacción y confinados por un potencial de red periódico. Para sistemas suficientemente diluidos solo se considera interacción entre pares de partículas, la cual en esta tesis, es repulsiva y de corto alcance. Este sistema es descrito entonces por el Hamiltoniano de Bose Hubbard, el cual queda determinado por dos parámetros; uno relacionado con la energía de salto entre sitios de la red (J), y un término de interacción (U). Se estudiaron los casos límite del hamiltoniano de Bose Hubbard, es decir $J \ll U$ y $U \ll J$, tanto a temperatura cero como a temperatura finita. Este estudio permitió obtener información de las características de las dos fases que experimenta el sistema. En el caso $J = 0$ se obtuvo que el sistema se encuentra completamente localizado sin fluctuaciones en el número de partículas por sitio, esto cuando se considera temperatura cero, pero al tomar en cuenta los efectos térmicos, aparecen regiones donde las fluctuaciones en el número de partículas ya no son cero, es decir, ya no puede considerarse estrictamente un aislante. En el caso $U = 0$ se obtuvo que el sistema se encuentra en un estado condensado, y en la que la temperatura de condensación depende linealmente del parámetro J .

Para el estudio de los efectos de la temperatura en la transición Superfluido-Aislante Mott se construyó la gran función de partición en un formalismo de integrales funcionales, donde los operadores de creación y aniquilación son reemplazados por campos escalares complejos que corresponden a los valores propios de estados coherentes. Este formalismo permitió hacer una conexión directa con la teoría de Landau, asociando el funcional de Landau con la acción construida a partir de la transformación de Hubbard Stratonovich

aplicada a la función de partición. El diagrama obtenido para temperaturas muy cercanas a cero concuerda con el calculado a temperatura cero, en el que empleó la aproximación de campo medio en el formalismo de operadores en segunda cuantización. De lo que se puede concluir que el argumento de invarianza traslacional aplicado sobre los campos complejos en el término de salto, y el desarrollo en serie de Taylor de la acción, a temperatura finita resultan equivalentes a la aproximación de campo medio empleada a temperatura cero donde los operadores de aniquilación y creación son sustituidos directamente por sus valores esperados.

La principal diferencia encontrada en el diagrama de fases al introducir los efectos térmicos es la disminución de la región superfluida. Esta disminución se observa en las regiones cercanas a los valores enteros de $\frac{\mu}{U}$. El estudio a temperatura finita de los casos límite mostró que en estas regiones el incremento de la temperatura produce un aumento en las fluctuaciones en el número de partículas por sitio, por lo que se concluye que en dichas regiones la disminución de la región superfluida no implica que el sistema se encuentre en una fase Mott, sino en una fase que podría considerarse simplemente térmica, donde el parámetro de orden superfluido es cero y además el sistema presenta fluctuaciones en el número de partículas por sitio diferente de cero.

Al comparar el diagrama obtenido a temperatura finita con los presentados en la literatura se encuentra un perfecto acuerdo, como por ejemplo, el trabajo de Gerbier [17], en donde obtienen el diagrama de fases empleando una aproximación de fase aleatoria, adicionalmente usan las excitaciones partícula-hueco para analizar los estados excitados de la fase Mott. Otro trabajo con el que se cotejaron los resultados fue el de Bradlyn y colaboradores [6], en el cual, como en nuestro caso, se encontró una acción efectiva y a partir de un desarrollo en serie de esta acción como función de un parámetro de orden se obtienen la frontera entre las fases empleando también la teoría de Landau. La diferencia con este trabajo es que para encontrar esta acción, se hace uso de técnicas diagramáticas así como de la introducción de campos que rompen explícitamente la simetría del sistema. Por tanto se puede concluir que a pesar de haber empleado diferentes enfoques para el estudio del sistema, de alguna forma las aproximaciones físicas empleadas resultan equivalentes.

Referencias

- [1] Alexander Altland y Ben D Simons. *Condensed matter field theory*. Cambridge University Press, 2010.
- [2] BP Anderson y Ma A Kasevich. Macroscopic quantum interference from atomic tunnel arrays. *Science*, 282(5394):1686–1689, 1998.
- [3] Mike H Anderson, Jason R Ensher, Michael R Matthews, Carl E Wieman, y Eric A Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *science*, 269(5221):198–201, 1995.
- [4] I. Bloch, J. Dalibard, y W. Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885 – 964, 2008. doi:10.1103/RevModPhys.80.885. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885>.
- [5] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, y R. G. Hulet. Evidence of bose-einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1687–1690, 1995. doi:10.1103/PhysRevLett.75.1687. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.1687>.
- [6] B. Bradlyn, F. E. A. dos Santos, y A. Pelster. Effective action approach for quantum phase transitions in bosonic lattices. *Phys. Rev. A*, 79:013615, 2009. doi:10.1103/PhysRevA.79.013615. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.013615>.
- [7] Barbara Capogrosso-Sansone, Şebnem Güneş Söyler, Nikolay Prokofév, y Boris Svistunov. Monte carlo study of the two-dimensional bose-hubbard model. *Phys. Rev.*

- A, 77:015602, 2008. doi:10.1103/PhysRevA.77.015602. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.015602>.
- [8] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, y W. Ketterle. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3969–3973, 1995. doi:10.1103/PhysRevLett.75.3969. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3969>.
- [9] D. B. M. Dickerscheid, D. van Oosten, P. J. H. Denteneer, y H. T. C. Stoof. Ultracold atoms in optical lattices. *Phys. Rev. A*, 68:043623, 2003. doi:10.1103/PhysRevA.68.043623. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.043623>.
- [10] F. E. A. dos Santos y A. Pelster. Quantum phase diagram of bosons in optical lattices. *Phys. Rev. A*, 79:013614, 2009. doi:10.1103/PhysRevA.79.013614. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.013614>.
- [11] Albert Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften*, págs. 216–217, 1924.
- [12] K. J. énez García, R. L. Compton, Y.-J. Lin, W. D. Phillips, J. V. Porto, y I. B. Spielman. Phases of a Two-Dimensional Bose Gas in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 105:110401, 2010. doi:10.1103/PhysRevLett.105.110401. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.110401>.
- [13] Alexander L Fetter y John Dirk Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Dover Publications, 2003.
- [14] R. P. Feynman y A. R. Hibbs. *Quantum mechanics and path integrals*, tomo 2. McGraw-Hill New York, 1965.
- [15] Matthew PA Fisher, Peter B Weichman, G Grinstein, y Daniel S Fisher. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Physical Review B*, 40(1):546, 1989.
- [16] S. Friebel, C. D’Andrea, J. Walz, M. Weitz, y T. W. H. ansch. laser optical lattice with cold rubidium atoms. *Phys. Rev. A*, 57:R20 – R23, 1998. doi:10.1103/PhysRevA.57.R20. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.57.R20>.

-
- [17] F. Gerbier. Boson Mott Insulators at Finite Temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 99:120405, 2007. doi:10.1103/PhysRevLett.99.120405. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.120405>.
- [18] R. J. Glauber. Coherent and Incoherent States of the Radiation Field. *Phys. Rev.*, 131:2766 – 2788, 1963. doi:10.1103/PhysRev.131.2766. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.131.2766>.
- [19] N. Goldenfeld. Lectures on phase transitions and the renormalization group. 1992.
- [20] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W Hänsch, y Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, 2002.
- [21] Walter Greiner y Joachim Reinhardt. *Field quantization*. Springer, 1996.
- [22] David Jeffery Griffiths. *Introduction to quantum mechanics*. Pearson Education India, 2005.
- [23] L. Guidoni, C. Triché, P. Verkerk, y G. Grynberg. Quasiperiodic optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 79:3363–3366, 1997. doi:10.1103/PhysRevLett.79.3363. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.3363>.
- [24] Igor Herbut. *A modern approach to critical phenomena*. Cambridge University Press, 2007.
- [25] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. En *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, tomo 276, págs. 238 – 257. The Royal Society, 1963.
- [26] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, y P. Zoller. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3108 – 3111, 1998. doi:10.1103/PhysRevLett.81.3108. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.3108>.
- [27] V. A. Kashurnikov, N. V. Prokofév, y B. V. Svistunov. Revealing the superfluid–Mott-insulator transition in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 66:031601, 2002. doi:10.

- 1103/PhysRevA.66.031601. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.66.031601>.
- [28] Wolfgang Ketterle. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. *Rev. Mod. Phys.*, 74:1131–1151, 2002. doi:10.1103/RevModPhys.74.1131. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.1131>.
- [29] Konstantin V. Krutitsky. Ultracold bosons with short-range interaction in regular optical lattices. *Physics Reports*, 607:1 – 101, 2016. ISSN 0370-1573. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2015.10.004>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157315004366>. Ultracold bosons with short-range interaction in regular optical lattices.
- [30] P. A. Lee y T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, 57:287 – 337, 1985. doi:10.1103/RevModPhys.57.287. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.57.287>.
- [31] K. W. Mahmud, E. N. Duchon, Y. Kato, N. Kawashima, R. T. Scalettar, y N. Trivedi. Finite-temperature study of bosons in a two-dimensional optical lattice. *Phys. Rev. B*, 84:054302, 2011. doi:10.1103/PhysRevB.84.054302. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.054302>.
- [32] Bose Satyendra Nath. Plancks gesetz and lichtquantenypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26(178), 1924.
- [33] C. Orzel, A. K. Tuchman, M. L. Fenselau, M. Yasuda, y M. A. Kasevich. Squeezed states in a bose-einstein condensate. *Science*, 291(5512):2386–2389, 2001. doi:10.1126/science.1058149. URL <http://www.sciencemag.org/content/291/5512/2386.abstract>.
- [34] R K Pathria y Paul D. Beale. *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 1996.
- [35] W. Pauli. The Connection Between Spin and Statistics. *Phys. Rev.*, 58:716 – 722, 1940. doi:10.1103/PhysRev.58.716. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.58.716>.

-
- [36] L. De La Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura económica, 2014.
- [37] N. Singh. Thermodynamical Phase transitions, the mean-field theories, and the renormalization (semi) group: A pedagogical introduction. *arXiv preprint arXiv:1402.6837*, 2014.
- [38] Thilo Stöferle, Henning Moritz, Christian Schori, Michael Köhl, y Tilman Esslinger. Transition from a strongly interacting 1d superfluid to a mott insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 92:130403, 2004. doi:10.1103/PhysRevLett.92.130403. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.130403>.
- [39] Henk TC Stoof, Koos B Gubbels, y Dennis BM Dickerscheid. *Ultracold quantum fields*, tomo 1. Springer, 2009.
- [40] S. Trotzky, L. Pollet, F. Gerbier, U. Schnorrberger, I. Bloch, N. V. Prokof'ev, B. Svistunov, y M. Troyer. Suppression of the critical temperature for superfluidity near the Mott transition. *Nature Physics*, 6(12):998 – 1004, 2010.
- [41] M. Ueda. *Fundamentals and new frontiers of Bose-Einstein condensation*. World Scientific, 2010.
- [42] D. van Oosten, P. van der Straten, y H. T. C. Stoof. Quantum phases in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 63:053601, 2001. doi:10.1103/PhysRevA.63.053601. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.63.053601>.
- [43] K. G. Wilson. The renormalization group and critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 55:583 – 600, 1983. doi:10.1103/RevModPhys.55.583. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.55.583>.

Apéndice A

Interacción entre pares de partículas en sistemas a bajas energías

Consideremos el problema de la colisión entre dos partículas de igual masa (m_0) y cuyo potencial de interacción depende solo de la distancia entre ellas, es decir $V = V(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ donde r_1 y r_2 son la posiciones de la partículas medidas en el sistema del laboratorio. Bajo una transformación de coordenadas al sistema del centro de masa

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \tag{A.1}$$

$$\vec{R}_{cm} = \frac{1}{2}(\vec{r}_2 + \vec{r}_1) \tag{A.2}$$

el problema se traduce a un problema de un cuerpo con masa $m = \frac{m_0}{2}$ que es dispersado por un potencial radial $V(r)$, donde $r = |\vec{r}|$.

Buscamos entonces la solución a la ecuación de Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r) \right) \psi(\vec{r}) = E_k \psi(\vec{r}). \tag{A.3}$$

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden. Es posible si se considera que el potencial es de corto alcance, es decir $V(r) = 0$ para $r > d$ una distancia finita, escribirla

en una forma integral

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(r') \psi(r'), \quad (\text{A.4})$$

donde $\psi_0(\vec{r})$ corresponde a la función de onda de partícula libre $V(r) = 0$, que se puede escribir como una onda plana $\psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Para puntos en el espacio tales que $r \gg a$ y $r \gg r'$ el kernel se reduce a

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{e^{i(kr - \vec{k}'\cdot\vec{r}')}}{r}. \quad (\text{A.5})$$

Se obtiene así la forma asintótica de la función de onda total

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (\text{A.6})$$

La función $f(\theta, \phi)$ es llamada amplitud de dispersión, y contiene toda la información de la interacción. Si la colisión se da a energías bajas, el proceso será isótropico asimuntamente, por tanto la amplitud de dispersión dependerá simplemente de θ .

Una manera de encontrar una expresión para la amplitud de dispersión es empleando la descomposición de la función de onda en ondas parciales y realizando las aproximaciones asintóticas y de bajas energías.

La solución a la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas, considerando que no depende de ϕ es

$$\psi(\vec{r}) = \sum_l i^l (2l+1) e^{2i\delta_l} R_{k,l}(r) P_l(\cos(\theta)), \quad (\text{A.7})$$

donde $R_{k,l}(r)$ satisface la ecuación

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{kl}(r)}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right) R_{kl}(r) = E_{kl} R_{kl}(r) \quad (\text{A.8})$$

Para distancias largas $V(r) = 0$ por tanto las soluciones $R_{k,l}(r)$ son

$$R_{k,l}(r) = \cos(\delta_l)j_l(kr) - \sin(\delta_l)\eta_l(kr) \approx \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} \quad (\text{A.9a})$$

$$= \frac{1}{2ikr} [(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - (i)^l e^{-i(kr+\delta_l)}] \quad (\text{A.9b})$$

$$= \frac{i^l}{2ikr} e^{-i\delta_l} [(-1)^l e^{ikr} e^{2i\delta_l} - e^{-i(kr)}] \quad (\text{A.9c})$$

donde $j_l(kr)$ y $\eta_l(kr)$ son las funciones esféricas de Bessel y δ_l corresponde a un desfazamiento relativo de la función de onda, esto se vera mas claramente más a delante.

De esta forma la expresión asintótica en términos de ondas parciales de la función de onda será

$$\psi(r) \approx \sum_l \frac{1}{2ikr} ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr} e^{2i\delta_l}) P_l(\cos(\theta)). \quad (\text{A.10})$$

De igual forma una onda plana puede ser expandida en ondas parciales

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \approx \sum_l \frac{1}{2ikr} ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}) P_l(\cos(\theta)), \quad (\text{A.11})$$

Notamos que la onda incidente y la onda dispersada difieren simplemente por una fase $e^{i2\delta_l}$, comparando las expresiones A.6 y A.10, A.11 se deduce la forma de la amplitud de dispersión

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos(\theta)), \quad (\text{A.12})$$

donde $f_l = \frac{1}{2ik} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)$

Estos coeficientes f_l dependerán del potencial de interacción. Se obtendrá en lo siguiente los coeficientes para el caso de un potencial de esfera dura. Sin perdida de generalidad los siguientes resultados se pueden extender a cualquier potencial, nuevamente bajo la aproximación de bajas energías de colisión.

Con esto en mente, se calculan los coeficientes δ_l para el potencial de esfera dura, es decir:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < a \\ 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

con a el radio de la esfera dura. La solución de la ecuación A.8 será

$$\begin{aligned} R_{k,l} &= 0 & \text{si } r < a \\ R_{k,l} &= \cos(\delta_l)j_l(kr) - \text{sen}(\delta_l)\eta_l(kr) & \text{si } r > a \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Imponiendo condiciones de continuidad en $r = a$

$$\delta_l(k) = \arctan [j_l(ka)] \quad (\text{A.15})$$

Usando que $ka \ll 1$, se aproximan las funciones de Besel por sus expansiones asintóticas $j_l(ka) \approx \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!}$ y $\eta_l(ka) \approx \frac{(2l+1)!!}{(2l+1)(ka)^{l+1}}$. Por lo tanto

$$\delta_l(k) = \arctan \left[\frac{(2l+1)(ka)^{2l+1}}{((2l+1)!!)^2} \right] = \frac{(2l+1)(ka)^{2l+1}}{((2l+1)!!)^2} + \dots \quad (\text{A.16})$$

Para la última igualdad se uso $\arctan[x] = x - x^3 + \dots$ para $x \ll 1$.

De A.16 se puede ver que para energías bajas los desfazamientos de orden $l \geq 1$ son despreciables frente al de orden $l = 0$, se dice por tanto que predomina la onda S. Esto hace que la ecuación A.12 se reduzca a un solo término, donde $\delta_0 = -ka_s$. Para un potencial cualquiera se tiene que a corresponde a la llamada longitud de dispersión definida como $a_s = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_l}{k}$. Sustituyendo estos resultados en ?? se tiene

$$f_l = \frac{1}{2ik}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) \approx \frac{1}{2ik}(2l+1)(1 + 2i\delta_l + \dots - 1) = \frac{1}{k}(2l+1)\delta_l \quad (\text{A.17})$$

Usando A.16 en el limite cuando $k \rightarrow 0$

$$f_l = (2l+1) \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_l}{k} = -a_s \tilde{\delta}_{l,0} \quad (\text{A.18})$$

donde $\tilde{\delta}_{m,n}$ corresponde a la delta de Kronecker.

Por lo tanto se concluye que toda la información de los efectos del potencial queda contenida en un solo número a que dependerá del sistema a estudiar.

Como ya se menciona, una aproximación razonable es tratar la interacción de las partículas como choques de esferas duras, para facilitar el uso de este potencial y su condición de frontera ($R_{lk} = 0$), resulta conveniente remplazar el potencial por un pseudo-potencial de contacto

$$V(r) = \frac{4\pi \tan(ka)}{m k} \delta(r) \frac{\partial}{\partial r} r, \quad (\text{A.19})$$

este desarrollo se muestra detalladamente en [41]. En el cual si se toma nuevamente la aproximación de energías bajas $ka \ll 1$, se tiene que $\tan(ka) \approx ka$ por lo que el potencial es simplemente

$$V(r) = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} \delta(r). \quad (\text{A.20})$$

Este es el potencial que se empleará en la construcción del modelo de Bose Hubbard

Apéndice B

Integrales Gaussianas y Transformación de Hubbard-Stratonovich

La transformación de Hubbard Stratonovich no es mas que la introducción de una integral Gaussianas, elegida de manera adecuada. Presentamos por tanto algunos resultados sobre integrales Gaussianas reales y complejas y su generalización a integrales funcionales.

Integral Gaussianas de variable real en N dimensiones

$$\int \prod_{j=1}^N \frac{d\phi_j}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{jk} \phi_j A_{jk} \phi_k} = \frac{1}{(\det A)^{1/2}}. \quad (\text{B.1})$$

Introduciendo un termino lineal se generaliza a

$$\int \prod_{j=1}^N \frac{d\phi_j}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{jk} \phi_j A_{jk} \phi_k + \sum_j \phi_j J_j} = \frac{e^{\frac{1}{2} \sum_{jk} J_k A_{jk}^{-1} J_k}}{(\det A)^{1/2}}. \quad (\text{B.2})$$

Para variables complejas se tiene

$$\int \prod_{j=1}^N \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{(2\pi i)} e^{-\frac{1}{2} \sum_{jk} \phi_j A_{jk} \phi_k + \sum_j (\phi_j^* J_j + \phi_j J_j^*)} = \frac{e^{\frac{1}{2} \sum_{jk} J_k^* A_{jk}^{-1} J_k}}{\det A}. \quad (\text{B.3})$$

Esta ultima expresión se generaliza de manera directa a integrales funcionales, intro-

duciendo L integrales sobre campos ϕ_l tales que $\phi_0 = \phi_l$.

$$\int \prod_l^L \prod_{j=1}^N \frac{d\phi_{j,l}^* d\phi_{j,l}}{(2\pi i)} e^{\sum_l^L \frac{\beta}{L} \left(-\sum_{jk}^N \phi_{j,l}^* A_{jk} \phi_{k,l} + \sum_j^N (\phi_{j,l}^* J_{j,l} + \phi_{j,l} J_{j,l}^*) \right)} = \frac{e^{\sum_l^L \frac{\beta}{L} \sum_{jk}^N J_{k,l}^* A_{jk}^{-1} J_{k,l}}}{(\det A)^L}. \quad (\text{B.4})$$

Tomando el límite cuando L tiende a infinito, definiendo la medida de integración como $D\phi_i(\tau) D\phi_i(\tau) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \prod_l^L \frac{d\psi_{i,l}^* d\psi_{i,l}}{2\pi i} \det A$ se tiene

$$\int \prod_{j=1}^N D\phi_j^*(\tau) D\phi_j e^{-\int_0^\beta \sum_{jk}^N \phi_j^*(\tau) A_{jk} \phi_k(\tau) + \int_0^\beta \sum_j^N (\phi_j^*(\tau) J_j(\tau) + \phi_j(\tau) J_j^*(\tau))} = e^{\int_0^\beta \sum_{jk}^N J_k^*(\tau) A_{jk}^{-1} J_k(\tau)}. \quad (\text{B.5})$$

Apéndice C

Correcciones a la energía en teoría de perturbaciones

De la teoría de perturbaciones se tiene que las correcciones hasta cuarto orden a la energía de un estado, para un hamiltoniano de la forma $\hat{H} = \hat{H}_0 + \phi\hat{H}_1$, son

$$E_n^{(1)} = \langle n|H_1|n\rangle \quad (\text{C.1})$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|h^1|n\rangle|^2}{E_n - E_m} \quad (\text{C.2})$$

$$E_n^{(3)} = \sum_{k \neq n} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|\hat{H}^1|m\rangle \langle m|H_1|k\rangle \langle k|H_1|n\rangle}{(E_m - E_n)(E_k - E_n)} \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{aligned} E_n^{(4)} = & \sum_k \sum_m \sum_l \frac{\langle n|\hat{H}_1|l\rangle \langle l|\hat{H}_1|m\rangle \langle m|\hat{H}_1|k\rangle \langle k|\hat{H}_1|n\rangle}{(E_n - E_k)(E_n - E_m)(E_n - E_l)} \\ & - E_n^{(2)} \sum_l \frac{|\langle n|\hat{H}_1|l\rangle|^2}{(E_n - E_l)^2} - 2E_n^{(1)} \frac{\langle n|\hat{H}_1|l\rangle \langle l|\hat{H}_1|m\rangle \langle m|\hat{H}_1|n\rangle}{(E_n - E_m)^2(E_n - E_l)^2} \\ & + (E_n^{(1)})^2 \sum_l \frac{|\langle n|H_1|l\rangle|^2}{(E_n - E_l)^3} \quad (\text{C.4}) \end{aligned}$$

donde $\{|n\rangle\}$ es el conjunto de estados propios del hamiltoniano sin perturbar, es decir cumplen $\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$.