

Universidad Nacional Autónoma de México Posgrado en Ciencias Físicas Instituto de Física

### ÁTOMOS ULTRAFRÍOS COMO SIMULADORES DEL FENÓMENO DEL TRANSPORTE EN REDES ÓPTICAS DESORDENADAS EN DOS DIMENSIONES.

Modalidad:

TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA) PRESENTA:

M. en C. LUIS ANTONIO GONZÁLEZ GARCÍA

**TUTOR PRINCIPAL:** Dra. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: Dr. OCTAVIO CASTAÑOS GARZA INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES, UNAM

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: Dr. LUIS ANTONIO PÉREZ LÓPEZ INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

MÉXICO, CIUDAD DE MÉXICO, FEBRERO 2020



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.

#### Comité Tutoral:

- Tutor Principal: Dra. Rosario Paredes Gutiérrez.
- Miembro Comité Tutoral: Dr. Octavio Castaños Garza.
- Miembro Comité Tutoral: Dr. Luis Antonio Pérez López.

#### Comité Sinodal:

- Dra. Rosario Paredes Gutiérrez
- Dra. Karina Jiménez García
- Dr. Luis Benet Fernández
- Dr. Pedro Antonio Quinto Su
- Dr. Fernando Ramírez Martínez

La tesis se realizó en el Instituto de Física de la UNAM

Directora de la Tesis Dra. Rosario Paredes Gutiérrez Instituto de Física UNAM Dedicado a las dos personas que me han amado toda la vida, y gracias a ellos he llegado hasta aquí. María Luisa y José Antonio. iv

### Agradecimientos

Quiero agradecer a mi tutor principal la Dra. Rosario Paredes por dirigir este trabajo de Doctorado que no fue fácil hacerlo. Durante estos años hubo días buenos y días malos en el desarrollo de la tesis. Quiero pedirle una disculpa por aquellos días malos en los que el estrés le ganó a la razón y no favoreció al avance del trabajo. Quiero agradecer por el tiempo que le dedicó a la revisión del trabajo, se que existieron noches de desvelo durante la escritura y revisión del artículo públicado. Estoy muy agradecido con usted por haber estado al pendiente del desarrollo del trabajo y tener un momento para las discusiones del mismo.

Me voy muy triste, me hubiera encantado tener más publicaciones durante el Doctorado para poder competir mejor en este mundo hostil. Estoy seguro que en otra época esta tesis hubiera tenido muchos trabajos públicados pero no fue el momento adecuado. Dra. Paredes le agradezco el apoyo económico que me dio al final para poder trasladarme a la Ciudad de México. Me hubiera gustado tener una beca para finalizar bien y escribir el artículo de los cuasicristales, pero no me favoreció el momento. Finalmente quiero agradecer todos sus consejos y su constante ayuda para poder ser una mejor persona y un mejor físico. La estimo mucho Dra. Rosario Paredes.

Agradezco el apoyo otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca de Doctorado que obtuve en estos cuatro años, por medio del programa de becas nacionales, sin esta beca este trabajo no hubiera existido. Agradezco al número de proyecto de 105217 DGAPA-UNAM PAPIIT por una beca de cinco meses para la finalización del trabajo y los gastos de viaje para participar en la DiCu 2019 en Puebla. También agradezco al número de proyecto 109619 de DGAPA-UNAM PAPIIT por el apoyo recibido para la inscripción de la XII reunión de la DIcu en Puebla 2019. Agradezco al programa de Apoyo a los Estudios de Posgrado (PAEP) por el apoyo económico recibidó durante el Doctorado, con este dinero logré viajar al extranjero y exponer los resultados de este trabajo en dos congresos internacionales.

Quiero agradecer al Dr. Santiago Caballero por su ayuda a la realización de un

código en mathematica para la realización de una parte del trabajo. Quiero Agradecer al Dr. Héctor Alva por sus enseñanzas y ayuda en la realización final de esta tesis, las reuniones fueron muy fructíferas para la etapa final del trabajo. Fue un placer colaborar contigo Héctor. Espero en un futuro seguir colaborando y compartir el conocimiento de ambos para generar nuevas ideas en la física y resolver problemas emocionantes.

Agradezco a mi comité tutoral, en especial al Dr. Octavio Castaños por verme crecer estos años y enseñarme mecánica cuántica durante la maestría.

Agradezco a cada uno de los miembros del jurado que se tomaron el tiempo necesario para la revisión de mi trabajo de tesis de Doctorado. Gracias a sus críticas se logró mejorar el trabajo.

Quiero agradecer a la señorita Lizette Ramírez y a la señorita María Luisa Araújo por la ayuda en la secretaría del departamento, por la impresión o fotocopiado de artículos o cualquier documento que llegue a necesitar en su momento.

Quiero agradecer a mi compañero de cubículo y de Doctorado el C. a Dr. Eleazar Neri, por fijarse en mí y ser parte de sus ayudantes en la Facultad de Ciencias de la UNAM. Gracias a las ayudantías me permitió tener experiencia en dar clases en la Facultad de Ciencias y en compartir mi conocimiento con las nuevas generaciones de físicos. Gracias a estas ayudantías obtuve un ingreso económico extra, lo cual me ayudó bastante para vivir en este país en donde cada día todo está más caro. Infinitas Gracias Eleazar.

Quiero agradecer a mi gran amigo el físico Eliseo Rivera Silva por escucharme, motivarme a no rendirme y darme grandes consejos de vida cuando estaba en una profunda depresión durante el Doctorado, sin sus consejos tal vez nunca hubiera terminado esta etapa de mi vida. También agradezco por la ayuda para realizar algunas figuras ilustrativas que se muestran en esta tesis. Amigo es tiempo de que hagamos nueva física juntos.

Finalmente quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México por permitirme estudiar en sus instalaciones y tener una oficina en el Instituto de Física, desde la maestría hasta el Doctorado. Aprendí mucha física estos años.

Fue un honor pertenecer todos estos años al Instituto de Física de la UNAM. Es momento de despegar y emprender el vuelo. Espero algún día llegar a ser un físico, a pesar de llegar a ser Doctor.

Encontrar una idea verdaderamente original. Es la única forma en que me distinguiré. Es la única forma en que voy a importar. John Forbes Nash.

Todo aquello que el hombre ignora, no existe para él. Por eso el universo de cada uno, se resume en el tamaño de su saber. Albert Einstein. viii

### Resumen

Este trabajo de investigación se ubica dentro del contexto del estudio del fenómeno de localización, asociado a desorden en sistemas bidimensionales. Para abordar dicho problema, que es a la fecha una pregunta abierta dentro del esquema de electrones en medios desordenados bidimensionales, se consideró la analogía existente con un sistema neutro de naturaleza bosónica en régimen de degeneración cuántica, restringido al espacio desordenado en dos dimensiones. En particular, en esta tesis se presenta el estudio de un gas de Bose débilmente interactuante confinado en diferentes redes ópticas en dos dimensiones con desorden. Para caracterizar los efectos del desorden en la existencia de estados localizados se estudiaron diferentes observables, a partir del conocimiento de la densidad superfluida. Las redes ópticas que se consideraron en este estudio fueron de dos tipos; redes periódicas y redes cuasicristalinas. Las redes periódicas analizadas tienen números de coordinación z = 3, 4 y z = 6. Con este tipo de geometrías se realizó un estudio extenso de los perfiles de densidad en función de la magnitud del desorden. La manera en que se determinó el perfil de densidad fue a través de la solución estacionaria de la ecuación de Gross-Pitaevskii. Se encontró que la red óptica con número de coordinación z = 3 es la que exhibe mayor oposición a la existencia de estados localizados en presencia de desorden, esto es, es mejor conductora con respecto a las redes periódicas con número de coordincación z = 4 y z = 6. El estudio de los efectos de tamaño finito revelan que existe un umbral de la magnitud de desorden para el cual los sistemas en dos dimensiones exhiben estados localizados. Finalmente las redes cuasicristalinas que se estudiaron en este trabajo fueron las redes con orden de rotación n = 5, y n = 8. La motivación principal de incluir dichos casos es que a la fecha ha sido reportada su realización experimental. Las observables que estudiaron para determinar la emergencia de localización en función de la magnitud de desorden son, el inverso de la razón de participación (IPR), y la entropía de Shannon. Ambas observables muestran que la red con eje de rotación n = 5 es más propensa a sufrir la localización a medida que se incrementa la magnitud del desorden. En conclusión para las redes cuasicristalinas, la red con orden de rotación n = 8 es mejor conductora.

x

## Índice general

1. Introducción			1			
2.	Desorden en átomos ultrafríos					
	2.1.	Átomos neutros confinados en				
		potenciales ópticos	7			
	2.2.	Redes ópticas	10			
	2.3.	Geometría de redes ópticas	12			
		2.3.1. Redes cuadradas	12			
		2.3.2. Redes triangulares y hexagonales	13			
	2.4.	Átomos neutros en potenciales desordenados	16			
		2.4.1. Potenciales de redes ópticas cuasiperiódicos en 1D	17			
		2.4.2. Redes ópticas con speckle	19			
3.	Trai	nsporte en redes ordenadas y desordenadas	<b>23</b>			
	3.1.	Movimiento de una partícula en una				
		red periódica	23			
	3.2.	Estructura de bandas de una partícula en una red óptica periódica	25			
	3.3.	El modelo de Anderson en una dimensión	27			
	3.4.	Teoría de campo medio y diagramas de fase	30			
		3.4.1. Funciones de Wannier en la aproximación armónica	32			
		3.4.2. Campo medio para el Hamiltoniano de Bose-Hubbard	36			
		3.4.3. Estado aislante de Mott	40			
		3.4.4. Estado superfluido	40			
		3.4.5. Estado de vidrio de Bose	43			
	3.5.	Transiciones de fase cuánticas en átomos ultrafríos	43			
4.	Ecuación de Gross-Pitaevskii					
	para	a un gas de Bose en una red desordenada en 2D	<b>49</b>			
	4.1.	Descripción de un condensado de Bose				
		en la aproximación de campo medio	50			
	4.2.	Ecuación adimensional de Gross-Pitaevskii	55			
	4.3.	Método Split-Step Crank-Nicholson	57			

ÍNDICE	GENER AL
INDICE	GENERAL

		4.3.1. Energía del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii	61
5.	Esta	ados estacionarios de un condensado de Bose en una	
	red	desordenada en 2D	65
	5.1.	Estados estacionarios en dos dimensiones	65
		5.1.1. Valores numéricos	67
		5.1.2. Redes ópticas cuadradas	69
		5.1.3. Estados estacionarios para la red triangular	70
		5.1.4. Estados estacionarios para la red hexagonal	72
		5.1.5. Potenciales Desordenados	73
		5.1.6. Estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para	
		diferentes redes ópticas con desorden	78
		5.1.7. Potencial armónico	88
		5.1.8. Potencial armónico más red óptica con desorden	89
	5.2.	Espectro de energía de estados localizados	91
6.	Des	orden en redes cuasicristalinas	95
	6.1.	Cuasicristales	95
	6.2.	Potenciales de red óptica cuasicristalinos	98
	6.3.	Perfiles de densidad para redes	
		cuasicristalinas	98
	6.4.	Cuantificación de estados localizados en redes cuasicristalinas	100
		6.4.1. Inverso de la razón de participación o IPR	102
		6.4.2. Entropía de Shannon	108
	6.5.	Espectro de energía de estados localizados en redes cuasicristalinas.	111
_		I	111
7.	Con	iclusiones 1	.15
7.	Con	iclusiones 1	.15
7. 8.	Con Apé	iclusiones 1 Endice 1	.15 .19
7. 8.	<b>Con</b> <b>Apé</b> 8.1.	inclusiones       1         Sendice       1         Estados estacionarios en 1D       1         8 1 1       Potoncial armónico	.15 .19 119
<ol> <li>7.</li> <li>8.</li> </ol>	<b>Cor</b> <b>Apé</b> 8.1.	iclusiones       1         éndice       1         Estados estacionarios en 1D       1         8.1.1. Potencial armónico       1         8.1.2. Potencial red óptica       1	.15 .19 119 119
<ol> <li>7.</li> <li>8.</li> </ol>	<b>Cor</b> <b>Apé</b> 8.1.	inclusiones       1         Endice       1         Estados estacionarios en 1D       1         8.1.1. Potencial armónico       1         8.1.2. Potencial red óptica       1         8.1.3. Potencial armónico mas red óptica       1	<b>.15</b> <b>.19</b> 119 119 120 121

## Capítulo 1

## Introducción

El entendimiento del transporte electrónico ha sido y es uno de los temas más estudiados en la materia condensada tanto desde el punto de vista experimental como teórico. Los materiales se pueden clasificar de acuerdo a su respuesta ante la aplicación de un campo eléctrico en aislantes, semiconductores, conductores y superconductores. El conocimiento de dicho comportamiento está bien consolidado desde el siglo pasado principalmente en forma fenomenológica. Los primeros esfuerzos para entender la conducción de electrones en redes cristalinas desde el contexto teórico se remontan al modelo de Drude[1], donde se consideran despreciables las interacciones entre los electrones de un sólido. A lo largo de la misma premisa, la teoría de bandas permite diferenciar a los materiales cristalinos en conductores, aislantes o semiconductores. De acuerdo a dicha teoría un material conductor es aquel que cuyas bandas de valencia y conducción se encuentran muy próximas entre sí, al grado que en algunos casos estas bandas se encuentran sobrepuestas y los electrones se encuentran en la banda de conducción. Por otra parte un material aislante es aquel en el que existe una banda prohibida entre la banda de valencia y la de conducción, como resultado dicho material no tiene electrones en la banda de conducción. Sin embargo, en un semiconductor también existe la banda prohibida y la banda de conducción en cuyo caso el nivel de energía de los electrones en un semiconductor se encuentra a la mitad de la banda prohibida. También, dentro del contexto de la conducción en materiales, un fenómeno presente en la naturaleza es la superconductividad, descubierta por Heike Kamerlingh Onnes<sup>[2]</sup> quien en 1911 observó que la resistencia eléctrica del mercurio desaparecía bruscamente al enfriarse a 4 K. Este fenómeno fue explicado por Bardeen, Cooper y Schrieffer en la conocida teoría BCS la cual fue desarrollada en 1957[3]. El entendimiento teórico de la superconductividad se basa en la determinación del estado de mínima energía de un sistema de electrones que interactúan entre pares y cuya interacción efectiva es el resultado de encontrase inmersos en una red cristalina y formar parejas. Dichas entidades son los llamados pares de Cooper. Sin embargo, en 1986 se produjo una auténtica revolución al descubrirse la superconductividad de alta temperatura 34 K, en óxidos de cobre, habitualmente conocidos como cupratos y llamándole a este fenómeno superconductividad no convencional. La superconductividad de los cupratos no puede explicarse según la teoría convencional de Bardeen, Cooper y Schrieffer. Se cree que de alguna forma la propia repulsión electrónica juega un papel importante en la superconductividad, aunque no está claro de qué forma. También se han encontrado una gran variedad de fases cuánticas algunas de las cuales aún no están bien identificadas y son un problema abierto a la comunidad científica.

La conducción en los materiales es el resultado del movimiento direccionado de los electrones. El flujo de corriente está determinado tanto por las interacciones existentes entre los electrones, como por las propiedades del material en el cual se encuentren inmersos los mismos y, como se menciona antes, por la respuesta de los mismos ante campos externos. El incremento o decremento de la conductividad puede ser causado por varios factores externos, por ejemplo, al estar en presencia de un gradiente de temperatura, algunos materiales se vuelven mejores o deficientes conductores. La conducción del calor se debe fundamentalmente a la actividad electrónica. En la conducción electrónica también intervienen procesos químicos. Una reacción química de oxidación es un proceso en el cual una sustancia pierde electrones. Una reacción de reducción es un proceso en el cual una sustancia gana electrones y estos procesos se pueden interpretar como un aumento o disminución de la conductividad eléctrica en dicho material. Como se describe en los siguientes párrafos, el arreglo interno de los iones es determinante en el proceso de conducción, en otras palabras, la conducción también se ve afectada por la forma en la cual están arreglados los iones que definen la estructura del sólido. Cuando un material no conserva un arreglo cristalino y en lugar de ello hay pérdida de simetría traslacional, se dice que el material es desordenado y, por ende, la teoría de bandas no puede usarse para describirlo. En el siguiente párrafo se dará una explicación de qué es el desorden estructural y cómo éste afecta el fenómeno de transporte.

En la física del estado sólido ciertos materiales exhiben un fenómeno que consiste en la supresión de la conducción de los electrones, aun si las interacciones son despreciables. La ocurrencia de dicho fenómeno tiene lugar siempre y cuando el material posea vacancias o esté dopado con otro material. Dado que en general estas vacancias o átomos sustitucionales están distribuidas en forma aleatoria, se dice que el material está desordenado estructuralmente, a diferencia de un arreglo cristalino perfecto. En 1958 Philip Warren Anderson, estudió el fenómeno de la conducción de un electrón en una red desordenada infinita en tres dimensiones [4]. En particular, resolvió la ecuación de Schrödinger de un electrón, analizando el comportamiento de la amplitud de probabilidad  $a_j$  dependiente del tiempo de una partícula que se encuentra en el sitio j, esto es,

$$i\dot{a}_j = E_j a_j + \sum_{k \neq j} V_{jk} a_k, \tag{1.1}$$

donde  $V_{jk}$  es la amplitud de transición para que una partícula viaje del sitio j al sitio k,  $E_j$  es una variable distribuida sobre una banda de energía completamente aleatoria con una distribución de probabilidad P(E)dE. A continuación se muestra un análisis breve del trabajo original de P.W. Anderson, acerca del movimiento de un electrón en una red desordenada infinita y con el cual él concluye que para un desorden arbitrario todos los estados son localizados.

Siguiendo el análisis realizado por Anderson en su artículo original, se tiene que la transformada de Laplace para la amplitud de probabilidad es por definición[5]

$$f_j(s) = \int_0^\infty \exp(-st)a_j(t)dt.$$
(1.2)

Aplicando la transformada de Laplace (1.2) a la ecuación (1.1) que representa a un electrón moviéndose en una red desordenada infinita, se tiene lo siguiente

$$i[sf_j(s) - a_j(0)] = E_j f_j(s) + \sum_{k \neq j} V_{jk} f_k(s).$$
(1.3)

La ecuación anterior (1.3) puede ser escrita como:

$$f_j(s) = \frac{i\delta_{0j}}{is - E_j} + \sum_{k \neq j} \frac{1}{is - E_j} V_{jk} f_k(s),$$
(1.4)

donde  $f_j(s)$  es una función que depende del parámetro s, que es a su vez la variable conjugada de tiempo en el espacio transformado de Laplace. La ecuación (1.4) puede ser resuelta iterativamente de manera que se tiene lo siguiente,

$$f_j(s) = \frac{1}{is - E_j} V_{j0} f_0(s) + \sum_k \frac{1}{is - E_j} V_{jk} \frac{1}{is - E_k} V_{k0} f_0(s) + \dots$$
(1.5)

A orden cero la ecuación es,

$$f_0(s) = \frac{i}{is - E_0} + \sum_k \frac{1}{is - E_0} V_{0k} \left( \frac{V_{k0}}{is - E_k} + \sum_l \frac{1}{is - E_k} V_{kl} \frac{1}{is - E_l} V_{l0} + \dots \right) f_0(s).$$
(1.6)

En la expresión anterior se identifica el término entre paréntesis y su producto con  $V_{k0}$ , incluyendo la suma, como  $V_c(0)$ , esto es,

$$V_c(0) = \sum_k \frac{(V_{0k})^2}{is - E_k} + \sum_{kl} \frac{V_{0k} V_{kl} V_{l0}}{(is - E_k)(is - E_l)} + \dots$$
(1.7)

Es crucial reconocer que para el análisis del proceso de conducción es suficiente considerar el primer término de la suma (1.7), cuyo significado físico corresponde a

la propagación de una partícula del sitio 0 al sitio k. Dicho término se puede escribir de la siguiente manera:

$$V_c(0) = \sum_k (V_{0k})^2 \left(\frac{-E_k}{s^2 + E_k^2} - \frac{is}{s^2 + E_k^2}\right).$$
(1.8)

En el límite cuando  $s \to 0$ , la primera contribución en la ecuación (1.8) es identificada como la corrección a la energía a segundo orden en teoría de perturbaciones, esto es,  $-\Delta E^{(2)}$ . La segunda parte de la ecuación puede ser escrita de la siguiente manera

$$\lim_{s \to 0} (V_c(0)) = -i \sum_k (V_{0k})^2 \delta(E_k) - is \sum_{k, E_k \neq 0} \frac{(V_{0k})^2}{E_k^2} \equiv -\frac{i}{\tau} - isK.$$
(1.9)

Reescribiendo la ecuación (1.6) en términos de las ecuaciones anteriores se tiene una nueva ecuación para  $f_0(s)$ , la cual es la siguiente

$$f_0(s) = \frac{i}{is - E_0} + \frac{1}{is - E_0} \left( -\Delta E^{(2)} - \frac{i}{\tau} - isK \right) f_0(s), \tag{1.10}$$

la solución de la ecuación anterior para  $f_0(s)$  es

$$f_0(s) = \frac{i}{is(1+K) + (i/\tau) - (E_0 - \Delta E^{(2)})}.$$
(1.11)

En resumen se tiene que a partir del análisis de los términos que conforman  $V_c(0)$ , esto es, la suma (1.8) es convergente a órdenes superiores. La convergencia de la suma significa que los estados son localizados[4]. Por lo tanto, la presencia del desorden es el origen de que todos los estados de una partícula sean localizados, lo que resulta en un estado de aislante. Este fenómeno es conocido como localización de Anderson[4], o inhibición del transporte, es de origen cuántico y es resultado de la interferencia de ondas entre múltiples trayectorias de propagación. La pérdida de coherencia es consecuencia de la dispersión elástica de una partícula en un entorno aleatorio. Sintetizando, fenomenológicamente la localización de Anderson se manifiesta como la supresión del transporte de ondas de materia en medios desordenados. Dicho comportamiento se puede expresar matemáticamente como un decaimiento exponencial a distancias grandes de la envolvente de los eigenestados de una partícula libre en un potencial desordenado en tres dimensiones. En otras palabras la función de onda que describe al estado estacionario es de la forma:

$$\phi(r) \approx \exp\left(-\frac{r}{L}\right),$$
(1.12)

donde L es la denominada longitud de localización.

Dado que el fenómeno de localización de Anderson es consecuencia del carácter ondulatorio de un electrón y su movimiento a través de centros dispersores, también Introducción

se manifiesta en otros escenarios. Por ejemplo ha sido observado en la propagación de ondas de ultrasonido [6], microondas [7] y luz [8, 9] entre otros sistemas en tres dimensiones. También se ha encontrado en sistemas de dos dimensiones al formar redes fotónicas con luz, donde el desorden es caracterizado por fluctuaciones aleatorias en las redes fotónicas [10]. Si bien la localización de Anderson atañe solamente a la física de una partícula, la realidad es que el estudio del transporte electrónico en cualquier material real, requiere el considerar la presencia de muchos cuerpos. Una mejor comprensión del comportamiento de un solo electrón requiere el poder aislarlo de su entorno. Esta idea fue precisamente la motivación del estudio el fenómeno de localización de Anderson en ondas de materia. En la naturaleza es imposible encontrar una sola partícula aislada del resto, sin embargo, en la práctica ha sido posible recrear este fenómeno en forma experimental. En los siguientes párrafos se describe la observación de dicho fenónemo.

En los últimos años la investigación tanto teórica como experimental en gases atómicos ultrafríos, ha permitido la realización de condensados de Bose-Einstein (BEC) [11] así como los gases degenerados de Fermi [12] en átomos de  ${}^{87}$ Rb y  ${}^{40}$ K por mencionar algunos. Gracias a la posibilidad de enfriar la materia usando técnicas de enfriamiento láser y de evaporación de partículas [13, 14] ha sido posible constatar su naturaleza ondulatoria. La materia en el régimen de degeneración cuántica, exhibe un comportamiento único. Se ha demostrado la existencia de nuevos estados de la materia formados por grandes conglomerados de átomos, a temperaturas cercanas a los 100 nK y cuyas densidades son del orden de  $10^{13} - 10^{15}$ átomos/cm<sup>3</sup>. El estudio de estos fenómenos de carácter intrínsecamente cuántico ha permitido explorar fenómenos pertenecientes al terreno del estado sólido y la materia condensada, entre ellos resalta el que concierne a la presente tesis. Con estos sistemas se ha logrado demostrar la localización de Anderson en átomos neutros[15]-[20], tanto en una como en tres dimensiones. Una de las mayores ventajas de usar estos gases cuánticos es la capacidad de controlar en el laboratorio tanto la interacción entre los átomos neutros, como el potencial que los confina. Estos potenciales son el resultado de campos externos, mayormente de origen óptico, como se explicará en detalle en el capítulo 2. Es por estas razones que los átomos ultrafríos moviéndose en redes de luz pueden ser considerados como los análogos de electrones desplazándose a través de la red iónica que define el sólido. Vale la pena mencionar que esta versatilidad es exclusiva de los átomos ultrafríos y, en general, no se puede implementar en el caso de electrones en una red cristalina desordenada, dado que las interacciones de éstos, como es bien conocido, son aquéllas propias de su naturaleza cargada y la presencia de los muchos cuerpos. En pocas palabras, los gases ultrafríos han abierto un nuevo panorama para poder estudiar la física de sistemas desordenados dentro de la materia condensada y el estado sólido. La posibilidad de emplear estas técnicas ha dado lugar a emular ciertas propiedades de la materia condensada por medio de los gases ultrafríos, esto es, con estos sistemas se ha logrado estudiar problemas de superfluidez, uniones de

Josepson[21], vórtices cuánticos[22], turbulencia cuántica[23], el cruce BEC-BCS[24], y transiciones en bajas dimensiones [25]. No obstante existen varias preguntas abiertas aún por contestar, un ejemplo de ello son las siguientes; ¿cómo es la conducción de átomos neutros en redes ópticas desordenadas bidimensionales?, ¿ existe la localización de Anderson para átomos neutros en dos dimensiones para redes ópticas finitas?; el hecho de que los átomos interactuen entre sí origina una nueva fase, conocida cómo localización de muchos cuerpos, misma que ya se ha logrado observar en el laboratorio [26]. Una pregunta aún sin explorar es ¿cómo es la transición de la localización de Anderson a la localización de muchos cuerpos?, ¿existirá un papel importante del desorden y la interacción en dicha transición?. Para contribuir a dar respuesta a estas preguntas, en este trabajo se estudia el comportamiento de un gas de Bosones débilmente interactuante, confinado en redes desordenadas en dos dimensiones, con diversas geometrías. En particular se analizarán, redes hexagonales (también conocidas como honeycomb), cuadrada y triangular en el régimen superfluido. Adicionalmente se considerarán redes en dos dimensiones con geometría cuasicristalina.

### Organización de la tesis

La tesis está organizada de la siguiente manera. En el capítulo dos se da una reseña de las técnicas experimentales que permiten confinar átomos ultrafríos y someterlos a desorden para lograr la observación del fenómeno de localización. En el capítulo tres se describe la teroría de conducción tanto a nivel de un cuerpo, como a nivel de muchos cuerpos. En el capítulo cuatro se deduce la ecuación de Gross-Pitaevskii y, el método numérico para encontrar los estados estacionarios de esta ecuación, la cual será utilizada para responder a las preguntas planteadas anteriormente. En los capítulos cinco y seis se describen los resultados de la influencia del desorden y la geometría, y su impacto en la generación de estados estacionarios localizados. Se analizan tanto redes con geometría periódica y cuasiperiódica. El último capítulo se dan las conclusiones del trabajo.

## Capítulo 2

## Desorden en átomos ultrafríos

En este capítulo se describen los fundamentos teóricos y las técnicas experimentales que se utilizan para confinar átomos en potenciales ópticos. Como se explica, estos potenciales dan lugar a la formación de redes ópticas tanto en una, dos y tres dimensiones y son maleables para formar diferentes geometrías en el espacio. En particular, se presenta una descripción de los potenciales que son de interés para el estudio de los efectos de desorden estructural en el transporte de átomos neutros. Adicionalmente, se da una breve descripción las técnicas experimentales que han permitido estudiar el impacto del desorden en redes ópticas y, enunciando los resultados experimentales que evidencian la aparición de la localización de Anderson en átomos ultrafríos.

## 2.1. Átomos neutros confinados en potenciales ópticos

Cuando un átomo está sujeto a un campo eléctrico  $\vec{E}$  éste induce un momento dipolar eléctrico  $\vec{P}$  proporcional al campo eléctrico, esto es,

$$\vec{P} = \alpha \vec{E},\tag{2.1}$$

donde  $\alpha$  es la polarizabilidad, la cual depende de la frecuencia  $\omega$  del láser. La energía de interacción del momento dipolar inducido  $\vec{P}$  por el campo eléctrico  $\vec{E}$  está dada por

$$U_{dip} = -\left\langle \frac{\vec{P} \cdot \vec{E}}{2} \right\rangle, \qquad (2.2)$$

dado que el campo eléctrico y el momento dipolar oscilan en el tiempo a una frecuencia  $\omega$ , como es usual se toma el promedio temporal sobre los campos, el cual es representado por los paréntesis angulares, ello conduce a la expresión para la energía potencial de confinamiento[27],

$$U_{dip} = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} Re(\alpha) I, \qquad (2.3)$$

esto es, la energía potencial de un átomo en un campo eléctrico generado por un haz láser es proporcional a la intensidad del campo  $I = 2\epsilon_0 c \left| \vec{E} \right|^2$ , y a la parte real de la polarizabilidad. Dado que la fuerza  $F_{dip}$  es conservativa, es posible expresarla a través de la derivada de un potencial  $U_{dip}(r)$ . Esta fuerza es conocida como dipolar óptica y es de la forma

$$F_{dip}(r) = -\nabla U_{dip}(r) = \frac{1}{2\epsilon_0 c} Re(\alpha) \nabla I(r), \qquad (2.4)$$

esta fuerza es proporcional al gradiente de la intensidad del campo eléctrico y a partir de ella se pueden crear potenciales de atrapamiento para átomos neutros ultrafríos, y son conocidas como trampas dipolares ópticas.

La polarizabilidad  $\alpha$  puede obtenerse mediante un modelo de oscilador armónico armortiguado clásico (modelo de Lorentz)[27], cuyo resultado es

$$\alpha(\omega) = 6\pi\epsilon_0 c^3 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\frac{\omega^3}{\omega_0^2})\Gamma},$$
(2.5)

donde  $\omega_0$  es la frecuencia correspondiente a una transición óptica del átomo que se confina,  $\omega$  corresponde a la frecuencia del campo láser y  $\Gamma$  tiene que ver con el decaimiento del estado excitado del átomo. Una expresión de aproximación más apropiada para la polarizabilidad atómica se obtiene a través de un modelo semiclásico. En este modelo el átomo es tratado como un sistema cuántico de dos niveles que interactúa con un campo de radiación clásicamente. En este caso el amortiguamiento  $\Gamma$  es determinado por los elementos de matriz dipolares del estado base  $|b\rangle$  y el estado excitado  $|e\rangle$  de un átomo de dos niveles,

$$\Gamma = \frac{\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0 c^3\hbar} \left| \langle e | P | b \rangle \right|^2, \qquad (2.6)$$

con P = -er, que representa el operador dipolar. Las expresiones anteriores nos permiten determinar el potencial dipolar en función de la frecuencia, cuya forma es [27]

$$U_{dip} = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega}\right) I(r).$$
(2.7)

Esta expresión es válida para cualquier frecuencia del láser  $\omega$ . El primer término de la ecuación (2.7) corresponde a una resonancia, mientras que el segundo es llamado

8

término contrarotante. En la mayoría de los experimentos la frecuencia del láser son relativamente cercana a la frecuencia de resonancia  $\omega_0$ , tal que se define la desintonía (detuning) que es  $\Delta = \omega - \omega_0$  y satisface que  $\Delta \ll \omega_0$ . En este caso el término contrarotante puede ser despreciado y esta aproximación es conocida como onda rotante dando lugar al potencial dipolar que es de la forma,

$$U_{dip} = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(r).$$
(2.8)

El signo de la desintonía determina si el potencial dipolar óptico es atractivo o es repulsivo. La desintonía al rojo, cuando  $\Delta < 0$  da lugar a un potencial dipolar donde los átomos son atraidos a los máximos de intensidad del campo de luz. La desintonía al azul da lugar a un potencial dipolar repulsivo en el que los átomos son repelidos de los máximos de intensidad cuando  $\Delta > 0$ . Este comportamiento se ilustra en la figura 2.1.



Figura 2.1: Ilustración del efecto de la desintonía láser sobre un potencial dipolar. a) La desintonía al rojo atrae a las partículas al máximo de intensidad (centro del láser en este caso).
b) La desintonía al azul repele a las partículas de los máximos de intensidad.

En la figura 2.2 se ilustra cómo los átomos son atraidos a los antinodos o a los nodos de la onda estacionaria y esto depende de la desintonía  $\Delta$ . Como información



Figura 2.2: Atrapamiento de átomos en una red periódica de 1D. Los átomos son atrapados en los antinodos cuando la frecuencia de atrapamiento corresponde a la desintonía al rojo. Los átomos son atrapados en los nodos para la desintonía al azul.

complementaria, se aprovecharán estas líneas para resaltar que en experimentos típicos, el isótopo de <sup>87</sup>Rb ha sido el más usado, de entre los átomos alcalinos, con el propósito de estudiar los efectos estacionarios y dinámicos de su confinamiento por potenciales creados con luz. La estructura fina de este átomo, i.e. el acoplamiento de spin-órbita, da lugar al doblete (línea D),  ${}^{2}S_{1/2} \rightarrow {}^{2}P_{1/2}$ ,  ${}^{2}P_{3/2}$  con frecuencias de transición de 795 nm y 780 nm respectivamente. Su spin nuclear, I = 3/2, da lugar al desdoblamiento hiperfino del estado base cerca de 6.8GHz y desdoblando los estados excitados al orden de cientos de MHz. En un experimento típico, las dimensiones del ancho del confinamiento de la luz láser, asociada a un potencial óptico, son de ~ 200  $\mu$ m (radio  $1/e^{2}$ ) y su longitud de onda es de alrededor 800 nm (es decir corrido al rojo).

### 2.2. Redes ópticas

En una red cristalina el movimiento de los electrones está sujeto al potencial electrostático generado por los iones de la red. La naturaleza intrínseca de los potenciales electrostáticos limita el movimiento de los electrones y los iones, en otras palabras, no es tan sencilla la manipulación experimental de estas partículas a través de campos eléctricos externos. En contraparte, la realización experimental de un gas de átomos neutros en estado degenerado, como los condensados de Bose, tal es el caso de <sup>87</sup>Rb y <sup>11</sup>Na [11], han dado pauta para que estos sistemas sean excelentes emuladores de la materia condensada y el estado sólido, ya que su naturaleza neutra y su comportamiento cuántico permite que sean considerados como los análogos de electrones moviéndose en un potencial particular. A continuación se explicará cómo se forman estas redes ópticas.

Una ventaja importante de usar campos ópticos para crear potenciales periódicos y atrapar átomos está en el control experimental de la geometría y la profundidad  $V_0$  del potencial. A continuación se ilustran algunos ejemplos realizados en el laboratorio. Un potencial de red periódica puede ser creado en una trampa dipolar óptica contraponiendo un par de haces láser uno con respecto del otro, con la misma longitud de onda  $\lambda$ . Bajo condiciones a propiadas de polarización estos haces interfieren y forman una onda estacionaria la cual da como resultado un potencial periódicos en el que se atrapan a los átomos. Es posible formar este tipo de potenciales periódicos en 1, 2 y 3 dimensiones, todo depende del número de haces láser y cómo se colocan de manera espacial [28], más adelante se explicará la geometría espacial para generar diferentes ondas estacionarias con formas específicas, esto es, geometrías en dos dimensiones como las que se estudian en la presente tesis: cuadrada, triangular, hexagonal y más recientemente geometrías cuasicristalinas.

El potencial óptico periódico más simple se forma al superponer dos haces láser de perfil gaussiano uno con respecto del otro, esto da como resultado un potencial de la forma

$$V(r,z) = -V_0 \exp\left(-\frac{2r}{\omega^2(z)}\right) \sin^2\left(kz\right), \qquad (2.9)$$

donde  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  es la magnitud del vector de onda de la luz láser,  $V_0$  es la profundidad del potencial,  $\omega(z) = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_R^2}}$  es el radio  $1/e^2$ . Este radio se caracteriza por la cintura del haz láser  $\omega_0$  y finalmente  $z_R = \frac{\pi\omega_0^2}{\lambda}$  es conocida como la longitud de Rayleigh[28].

El potencial óptico periódico en una dimensión es creado por la retrorreflexión de un haz láser gaussiano tal que se forma un patrón de interferencia de una onda estacionaria. Esto da como resultado el siguiente potencial

$$V(r,z) = -V_0 \exp\left(-2\frac{r^2}{\omega_0^2}\right) \cos^2(kz) \approx -V_0 \left(1 - \frac{2r^2}{\omega_0^2}\right) \cos^2(kz).$$
(2.10)

Por otra parte, los potenciales ópticos periódicos en dos dimensiones son creados superponiendo ondas estacionarias en diferentes direcciones. Por ejemplo en la parte (a) de la figura 2.3 se encuentran dos haces láser que se encuentran ortogonales entre si, esto es, para generar dos ondas estacionarias y crear un potencial de red en dos dimensiones. El potencial resultante en el centro de la trampa en 2 dimensiones es de la forma[28]

$$V(x,y) = -V_0(\cos^2(kx) + \cos^2(ky) + 2\vec{e_x} \cdot \vec{e_y}\cos(\phi)\cos(kx)\cos(ky)), \qquad (2.11)$$

donde k es la magnitud del vector de onda del láser,  $\vec{e_i}$  es el vector polarización en dirección  $\hat{i} \neq \phi$  es una fase temporal entre la interferencia de los campos eléctricos de los láseres. Análogamente, la superposición de tres haces láser con la misma longitud de onda  $\lambda$  en la direcciones x, y y z forma una red periódica en 3 dimensiones (ver figura (b) 2.3), donde el potencial es de la forma[28]

$$V(x, y, z) = -V_0(\cos^2(kx) + \cos^2(ky) + \cos^2(kz)).$$
(2.12)

Un aspecto importante en la formación de redes ópticas en cualquier dimensión es el cuantificar su profundidad, esto es conocer la magnitud de  $V_0$ . Dicho conocimiento proporciona información de si el gas de Bose se encuentra en una fase de superfluido (SF) o Aislante de Mott (MI)[29] (en el capítulo 3 se dará una descripción de que son estas fases). Para esto se debe considerar la energía de recoil  $E_R$ . La energía de recoil o de retroceso, es el cambio en la energía cinética de un átomo asociado con la emisión o absorción de un fotón con momento k proveniente de un láser cuya longitud de onda es  $\lambda$ , entonces, la energía de recoil es,

$$E_R = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2. \tag{2.13}$$

El valor experimental típico para la energía de recoil en el caso del <sup>87</sup>Rb y una longitud de onda  $\lambda = 800$  nm es,  $E_R = 2.36 \times 10^{-30}$  J. La profundidad crítica  $V_0$  en una red cúbica esta dada en unidades de energía de recoil para observar la transición de superfluido a aislante de Mott oscila entre  $V_0 = 6E_R$  y  $V_0 = 12E_R$  [29].



Figura 2.3: Redes ópticas en 2D y 3D. (a) Superposición de dos haces láser, confina a los átomos en las direcciones x y y. Los átomos están confinados a una serie de tubos de potencial unidimensionales y estrechamente confinados. (b) Superponiendo un tercer haz láser en dirección z para formar una red en 3D. Se muestra una estructura cúbica donde los átomos son localizados en los nodos. Imagen tomada de [28].

### 2.3. Geometría de redes ópticas

### 2.3.1. Redes cuadradas

Posterior a la realización experimental del condensado de Bose-Einstein con un confinamiento de oscilador armónico, las redes ópticas fueron el siguiente paso para confinar a dichos gases. Los primeros experimentos con átomos ultrafríos en redes ópticas en dos y tres dimensiones correspondientes a redes cúbicas dieron paso al estudio de las fases aislante de Mott y Superfluido [29].

Si bien se ha descrito que es factible producir redes ópticas en una, dos o tres dimensiones, en el presente estudio nos concentraremos en dos dimensiones y por el momento en la geometría más sencilla que en este caso es de estructura cuadrada. Para ello sólo se requiere de dos ondas estacionarias en las direcciones x y y, como se ilustra en la figura 2.4.

La disposición y fase de los haces de luz láser son un aspecto crucial en la estructura resultante que define los sitios de la red, de hecho, la estructura resultante puede cambiar de manera abrupta con tan solo modificar la fase relativa. Consideremos como ejemplo una geometría con cuatro haces con la misma frecuencia, dos contrapropagándose a lo largo del eje horizontal y dos a lo largo del eje vertical. Los haces verticales y horizontales tienen polarización  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  y la intensidad óptica del láser es de la forma

$$|E(r)|^{2} = |E_{0}\cos(k_{x}x + \phi_{x})\epsilon_{1} + E_{0}\cos(k_{y}y + \phi_{y})\exp(i\phi_{x,y})\epsilon_{2}|^{2}, \qquad (2.14)$$



Figura 2.4: Ilustración de la dirección que deben tomar los haces láser para formar una onda estacionaria en dos dimensiones.

donde  $\phi_x$  y  $\phi_y$  son la fases que se pueden elegir para establecer un máximo en el potencial y  $\phi_{x,y}$  es una fase relativa entre las direcciones x y y. En la figura 2.5 se ilustra la distribución de intensidad del campo de luz láser para diferentes valores de la fase de  $\phi_{x,y}$ , dando como resultado diferentes formas de las redes cuadradas. En otras palabras hay varias soluciones prácticas para realizar una geometría cuadrada con número de coordinación z = 4. Dependiendo de la sintonía  $\Delta$ , las partículas se situarán en los máximos o mínimos del potencial.



**Figura 2.5:** Ilustración de la intensidad óptica láser dada por la ecuación (2.14), donde  $\phi_x = 0$ ,  $\phi_y = 0$  y para diferentes valores de la fase relativa  $\phi_{x,y} = \frac{3\pi}{5}, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}$ . Se puede observar que siempre existe una red con número de coordinación z = 4.

### 2.3.2. Redes triangulares y hexagonales

La implementación experimental en el confinamiento de un gas de bosones no se ha visto limitada a una red cuadrada. Gracias a la forma en la cual se pueden colocar los haces láser en el laboratorio, es posible diseñar redes con diversas geometrías. En particular, se han conseguido estructuras ópticas de redes triangulares y de hexagonales [30] [31] [32], y más recientemente las redes cuasicristalinas [33] [34] [35]. Por ejemplo, la configuración experimental para generar una red triangular, los haces gaussianos que la conforman se arreglan de la forma ilustrada en la figura 2.6, siendo la orientación de sus respectivos vectores de onda la siguiente,

$$\mathbf{k_1} = k_l(0, 1, 0)$$
  $\mathbf{k_2} = \frac{k_l}{2}(\sqrt{3}, -1, 0)$   $\mathbf{k_3} = \frac{k_l}{2}(-\sqrt{3}, -1, 0),$  (2.15)

donde  $k_l = \frac{2\pi}{\lambda_l}$  es la magnitud del vector de onda, estos vectores de onda son una aproximación de los haces reales presentes en la configuración experimental. Estos haces están separados por una alineación angular de aproximadamente 120° uno con respecto del otro en el plano xy.

Por otra parte la red recíproca de la configuración de los tres haces descrita en el experimento [30] es generada por la transferencia de momento entre los haces de la red. Un átomo atrapado puede absorber un fotón de un modo de luz de un haz y reemitirlo en otro modo; con esta consideración se puede definir los vectores de la red recíproca

$$\mathbf{b}_{\mathbf{i}} = \varepsilon_{ijk} \left( \mathbf{k}_{\mathbf{j}} - \mathbf{k}_{\mathbf{k}} \right), \tag{2.16}$$

donde  $\varepsilon_{ijk}$  es el tensor o símbolo de Levi-Civita. Así, los tres vectores de la red recíproca son los siguentes:

$$\mathbf{b_1} = b(1,0,0)$$
  $\mathbf{b_2} = \frac{b}{2}(-1,-\sqrt{3},0)$   $\mathbf{b_3} = \frac{b}{2}(-1,\sqrt{3},0),$  (2.17)

donde  $b = \sqrt{3}k_l$ . Los vectores de la red de Bravais en el espacio real  $\mathbf{a_i}$  pueden ser calculados de los pares de los vectores de la red reciproca usando la relación  $\mathbf{a_i} \cdot \mathbf{b_j} = 2\pi \delta_{i,j}$  [36]. Los dos vectores de la red de Bravais obtenidos de  $\mathbf{b_1}$  y  $\mathbf{b_2}$  son los siguientes:

$$\mathbf{a_1} = a(0, -1, 0)$$
  $\mathbf{a_2} = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1, 0),$  (2.18)

donde *a* es la constante de red, la cual le corresponde un valor de  $a = \frac{2\lambda}{3}$ . Esta configuración experimental crea un potencial triangular, que es expresado matemáticamente de la siguiente manera [30]:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \left( \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \left( \cos \left( \mathbf{b_1} \cdot \mathbf{r} \right) + \cos \left( \mathbf{b_2} \cdot \mathbf{r} + \phi_{12} \right) + \cos \left( \left( \mathbf{b_1} - \mathbf{b_2} \right) \cdot \mathbf{r} + \phi_{23} \right) \right) \right),$$
(2.19)

donde  $\mathbf{r} = (x, y)$ , y  $\phi_{i,j}$  son las fases relativas. Como resultado de la expresión (2.19) el patrón resultante es triangular, con número de coordinación z = 6, esto se ilustra



Figura 2.6: Configuración experimental de tres haces láser. El potencial de red óptica con simetría triangular o hexagonal es creado por los tres haces láser colocados a  $120^0$  uno con respecto del otro en el plano xy.

en la parte a) de la figura 2.7.

Inspirado por la física que conlleva el desarrollo de nuevos materiales, como es el caso del grafeno [37, 38, 39, 40], también se ha trabajado experimentalmente en el diseño de estructuras ópticas con esta geometría, es decir, la generación de redes para confinar átomos ultrafríos en redes ópticas tipo hexagonal con número de coordinación z = 3 [30] [32] [41]. Como se ha mencionado, estos sistemas ofrecen más control y flexibilidad que el tradicional grafeno. Por ejemplo en estas configuraciones con simetría hexagonal, se puede cambiar fácilmente la amplitud de intensidad, confinar ya sea bosones o fermiones [41] [42], o incluso una mezcla de bosones y fermiones en tal red. Vale la pena mencionar que a la fecha se han observado fases cuánticas con bosones ultrafríos en una red hexagonal [43]. La red óptica hexagonal puede ser experimentalmente realizada como resultado de la intersección de tres haces y el potencial resultante es [41]:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \left( \cos \left( \mathbf{b_1} \cdot \mathbf{r} \right) + \cos \left( \mathbf{b_2} \cdot \mathbf{r} \right) + \cos \left( \left( \mathbf{b_1} + \mathbf{b_2} \right) \cdot \mathbf{r} \right) \right), \quad (2.20)$$

donde  $V_0$  es la profundidad del potencial,  $\mathbf{b_1}$  y  $\mathbf{b_2}$  son los vectores unitarios de la red recíproca cuyo valor es:

$$\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1) \qquad \qquad \mathbf{b_2} = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}, 1), \qquad (2.21)$$

donde  $a = \frac{2\lambda_l}{3\sqrt{3}}$  es la constante de red, siendo  $\lambda_l$  la longitud de onda del láser. De la misma manera que en la red triangular se pueden calcular los vectores unitarios  $\mathbf{a}_i$ 



Figura 2.7: Ilustración de los potenciales de red a) triangular b) hexagonal.

cuyos vectores son:

$$\mathbf{a_1} = \frac{a}{2}(1,\sqrt{3})$$
  $\mathbf{a_2} = \frac{a}{2}(-1,-\sqrt{3}).$  (2.22)

En la parte b) de la figura 2.7 se ilustra la red óptica hexagonal generada por el potencial (2.20). Los mínimos generan hexágonos en la red óptica y los átomos son atrapados en estos mínimos de potencial. Cabe resaltar que otra manera de generar una red óptica tipo hexagonal está dada por la misma técnica empleada al generar a una red triangular [30], sin embargo para tener esta geometría solamente cambian la polarización de los tres haces láser y ello conduce a la generación de una configuración tipo hexagonal. La implementación para generar este tipo de redes tanto triangulares y hexagonales en el laboratorio ha dado pauta a estudiar las diferentes transiciones de fase, esto es, las transiciones de superfluido a aislante de Mott en las redes ópticas con simetrías de número de coordinación z = 6 y 3[44].

Una vez confinados los átomos en este tipo de redes ópticas, la pregunta que se quiere responder es ¿cómo se genera el desorden en los potenciales de confinamiento? En el siguiente apartado se aborda este aspecto.

### 2.4. Atomos neutros en potenciales desordenados

El desorden es entendido como las imperfecciones no controladas en un sistema. Este fenómeno natural está presente en todos los sistemas de la vida real, como un ingrediente no deseable para el sistema. A menudo se descuida está propiedad del sistema, ya que algunas veces sólo se está interesado en el comportamiento macroscópico del sistema y el desorden resulta ser una pequeña incertidumbre. Sin embargo, hoy es bien conocido que aún en escala macroscópica, el desorden puede tener efectos dramáticos, como lo ilustra la emblemática localización de Anderson [4]. En esta un desorden muy pequeño puede convertir un estado metálico en un estado aislante.

La determinación de las observable físicas que típicamente se usan para cuantificar sus efectos en el fenómeno de transporte, requiere en la práctica un gran número de realizaciones para garantizar que se cuenta con una buena estadística del "ambiente" desordenado propio de un sólido real.

En particular los átomos ultrafríos son muy apropiados para investigar la física de sistemas desordenados ya que, como se ha mencionado al inicio del capítulo, estos son sistemas maleables en el laboratorio y ofrecen un alto grado de control. El desorden puede ser introducido en los átomos ultrafríos de manera diferente. Desde un punto de vista teórico el desorden puede ser modelado por cualquier parámetro en el Hamiltoniano que describa a dicho sistema. Sin embargo, se han hecho varias propuestas para aplicar el desorden de manera experimental en los átomos ultrafríos.

El desorden generado por impurezas se puede realizar experimentalmente considerando no sólo una especie átomica, sino confinando una segunda especie. La segunda especie puede por ejemplo ser atrapada en sitios aleatorios de una red óptica mientras que la primera especie es insensible a la red óptica [45, 46, 47, 48]. Los átomos de la segunda especie crean un patrón aleatorio de impurezas, cuyo potencial es de la forma

$$V(r) = \sum_{i} U(r - r_i),$$
(2.23)

con U el potencial creado por un solo átomo de la segunda especie y la posición  $r_i$  aleatoria. Esta propuesta es llamada el modelo de Edwards y se ha implementado en experimentos con átomos fríos [49].

#### 2.4.1. Potenciales de redes ópticas cuasiperiódicos en 1D

Otra manera de construir en el laboratorio un potencial no periódico, pero no desordenado, es la generación de un potencial de estructura cuasiperiódico. Este tipo de red se produce con la denominada técnica de redes ópticas bicromáticas [50, 51] y consiste en lo siguiente. Un potencial óptico cuasiperiódico puede ser obtenido superponiendo una red óptica con longuitud de onda  $\lambda_1$  a otra red óptica con longitud de onda  $\lambda_2$  tal que esto sea inconmesurable, esto es, tal que la razón  $\beta = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$  sea un número irracional [52, 53]. Si ahora se definen los potenciales periódicos con sus respectivas longitudes de onda  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ , como la red principal  $V_1$  y la red secundaria  $V_2$ , como se ilustra en la figura 2.8. La red óptica bicromática o mejor conocida como cuasiperiódica está dada por  $V(x) = V_1(x) + V_2(x)$  dando como resultado el siguiente potencial,

$$V(x) = s_1 E_{R1} \cos^2(k_1 x) + s_2 E_{R2} \cos^2(k_2 x), \qquad (2.24)$$

donde  $k_i = 2\pi/\lambda_i$  y  $s_i$  son las alturas de la red en unidades de las energías de recoil  $E_{Ri}$  con i = 1, 2. En la figura 2.8 se ilustra el potencial generado por la red cuasiperiódica (2.24).



**Figura 2.8:** Ilustración de un potencial de red óptica cuasiperiódico, (a) como resultado de la superposición entre dos redes con  $s_1 = 10$  y  $\lambda_1 = 1064$ nm (morada) y una segunda red con  $s_2 = 1$   $\lambda_2 = 859$ nm (azul). (b) Potencial de red óptica cuasiperiódico en una dimensión.

La red bicromática se caracteriza por el hecho de que la perturbación debida a la segunda red induce una modulación cuasiperiódica de la energía en los mínimos de la red principal. La manera de introducir este tipo de desorden en la red biocromática no es un desorden aleatorio ya que tiene una estructura cuasiperiódica caracterizada por las frecuencias inconmesurables bien definidas que dan como resultado una distribución determinista en los sitios de la red. Sin embargo, la simetría traslacional de la red se rompe de una manera no trivial y este tipo de redes ópticas es adecuada para el estudio de la física en medios desordenados. Por otra parte este tipo de potenciales puede ser modelado en un Hamiltoniano tipo *tight-binding* como el Hamiltoniano de Bose-Hubbard (3.51). En una dimensión la energía en el sitio es pseudo-periódica, esto es,  $\varepsilon_i = \Delta \cos(2\pi\beta i + \phi) \cos \Delta y \phi$  que son determionados por la profundidad y la fase de la red secundaria y  $\beta$  que es un número inconmesurable. Este modelo sin interacciones es conocido como el modelo de Aubry-Andre [52]. Auque es determinista tal configuración imita en cierto grado a un potencial desordenado de tamaño finito.<sup>1</sup> Este tipo de potenciales se ha logrado implementar en el laboratorio usando átomos ultrfríos y encontrando la primera evidencia de la localización de Anderson en una dimensión [50].

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>El tamaño del sistema no debe ser demasiado grande para evitar réplicas periódicas del potencial

### 2.4.2. Redes ópticas con speckle

La posibilidad de controlar el desorden en gases ultrafríos con luz láser es menos complicado en comparación con el reto que representa un sistema real de la naturaleza, donde el desorden está presente intrínsecamente y no puede ser controlado. Existen diferentes formas de generar cierto tipo de desorden en el laboratorio y que éste sea implementado en una red óptica.

En primer lugar mencionaremos la llamada técnica de *optical speckle* [54] que se refiere a un patrón de intensidad aleatorio producido por la luz coherente cuando se refleja o difunde por una superficie rugosa.



Figura 2.9: Ilustración de un patrón de speckle generado en el laboratorio. Imagen tomada de [55].

El *speckle* consiste en un fino patrón de luz granular que es consecuencia de que la luz incida sobre una superficie áspera, esto se ilustra en la figura 2.9. El *speckle* es un fenómeno tan generalizado que se encuentra en varios problemas de la física ya que estos introducen un ruido no deseado en imágenes o en algunas muestras de laboratorio[54].

Para el caso de los átomos ultrafríos esta técnica es considerada para generar desorden y los átomos sientan un entorno aleatorio. Esta técnica es el resultado de un haz láser que es difractado al pasar a través de un plato difusor y es focalizado por una lente convergente. El plato difusor transmite la luz láser sin que se altere la intensidad, pero imparte una fase aleatoria sobre la luz emergente y se crea un potencial aleatorio, como se muestra en la figura 2.10. En otras palabras, el fenómeno

de *speckle* surge cuando la luz altamente coherente es reflejada o transmitida por una superficie rugosa[56, 57].



Figura 2.10: a) Configuración óptica de cómo se generar desorden a través de un potencial óptico con la técnica de *speckle*. b) Representación en dos dimensiones de un potencial desordenado. Imagen tomada de [58].

En principio, las ondas coherentes que son emitidas por un rayo láser y que pasan a través de un plato difusor dan lugar a ondas dispersadas con diferentes fases y diferentes amplitudes. Debido a las variaciones del espesor del plato difusor o qué tan áspero se encuentre, tiene como consecuencias que las interferencias de estas ondas formen patrones al azar a asociado a las trayectorias aleatorias de las ondas dispersadas desde la superficie. Como resultado se origina un potencial de *speckle*.

La dispersión se puede hacer en la reflexión o en la transmisión, en tales casos el principio básico de formación de un *speckle* es el mismo y consiste en una modulación espacial de la fase y la amplitud del campo eléctrico de la luz incidente. Dado que el potencial dipolar es proporcional a la intensidad del campo eléctrico, la intensidad espacial producida por el *speckle* da como resultado un potencial desordenado espacialmente para los átomos.

Entre las diversas posibilidades que podrían surgir para producir un potencial aleatorio, el potencial de *speckle* ofrece dos ventajas principales. La primera consiste en su flexibilidad desde el punto de vista experimental ya que es factible lograr el control de los parámetros que producen el desorden. La segunda radica en la posibilidad de conocer exactamente las propiedades estadísticas del potencial y que éstas pueden ser bien modeladas teóricamente y se pueden medir experimentalmente.

Concluyamos este capítulo con una breve reseña de los principales logros que se han dado en el campo de los átomos ultrafríos con desorden, en particular la realización experimental de la localización de Anderson con átomos ultrafríos. Los primeros experimentos de átomos ultrafríos con desorden usando la técnica de *speckle* se llevaron a cabo de forma simultánea en los grupos de M. Inguscio en Florencia Italia [59, 60], en donde investigaron las propiedades dinámicas y estáticas de un gas de <sup>87</sup>Rb en presencia de desorden y midieron el comportamiento del perfil de densidad.

Por otra parte en el grupo de A. Aspect en Palaiseau Francia [56, 57] ellos observaron el transporte coherente interactuante en una dimensión en un condensado de Bose-Einstein en presencia de un potencial aleatorio y midieron el perfil de densidad en función del tiempo y mostraron que la expansión dinámica cambia dramáticamente, esto es, ellos observaron la supresión del transporte se debió a las fuertes reflexiones de los picos altos del potencial desordenado [61]. Estos experimentos siguieron con el proposito teórico de la localización de Anderson en una dimensión [62]. Sin embargo en el 2008 la localización de Anderson de átomos ultrafríos no interactuantes fue finalmente observada experimentalmente por potenciales de *speckle* en Francia [63]. En la figura 2.11 se ilustran los resultados de dicho experimento.



**Figura 2.11:** Perfil de densidad de la onda de materia localizada por la técnica de *speckle*. La guía de onda limita los átomos transversalmente al eje z, pero son libres de viajar a lo largo de la dirección z. Un rayo láser crea un patrón de intensidad de desorden que varía a lo largo de z. Se libera un pequeño condensado de Bose-Einstein, inicialmente confinado a lo largo de z y su expansión se detiene aproximadamente después de 0.5s. El perfil de densidad estacionario que emerge a 0, 8, 1 y 2 segundos es graficado, lo que confirma la localización. La imagen es tomada de [64]

Al mismo tiempo la transición inducida por el desorden generada en sistemas unidimensionales cuasiperiódicos por el modelo de Aubry-Andre fue observada la localización de Anderson en Florencia [50]. En el año 2012 la localización de Anderson también fue observada en tres diemesiones para un gas de Bose ultrafrío usando potenciales de speckle [65] y en gases de Fermi [66].

Estas observaciones han abierto muchas perspectivas [67] y desencadenado experimentos sobre el efecto de las interacciones que puedan suceder en estos gases atómicos bajo la influencia del desorden. En Florencia [68, 69, 70] en el régimen de interacciones débiles fue estudiado un potencial cuasiperiódico en una dimensión donde se ha observado la subdifusion. También se han observado indicios de una fase de vidrio de Bose con bosones en una red en una dimensión con desorden [71]. En el grupo de B. DeMarco estudiaron a los bosones fuertemente interactuantes en una red óptica en tres dimensiones superpuesta con un patrón de *speckle* y midieron los efectos del desorden en la fracción condensada [72]. Bosones en potenciales de *speckle* en una dimensión han sido estudiados por el grupo liderado por R. Hulet y han analizado como es el movimiento del gas de Bose y su fragmentación en presencia de desorden [73]. También la influencia del desorden ha sido implementada sobre la transición Berezinskii- Kosterlitz-Thouless y observaron un cambio en la temperatura de transición [74, 75, 76].

Resumiendo, el problema principal de esta tesis es la búsqueda de la localización de átomos neutros ultrafríos con interacciones débiles en dos dimensiones. El movimiento bidimensional de los átomos con potenciales de *speckle* ha sido investigado en Palaiseau en el régimen clásico [77, 78]. Sin embargo, como veremos, la observación de la localización de Anderson en dos dimensiones sigue siendo un gran desafío. Hasta el momento se tiene la realización de estados localizados considerando no solamente sistemas ideales, sino también la presencia de interacciones.

## Capítulo 3

# Transporte en redes ordenadas y desordenadas

Con el propósito de dar contexto a la investigación del presente trabajo, en este capítulo se hará un breve recuento de los resultados conocidos de la física del estado sólido y de la teoría del transporte de una partícula tanto en una red periódica, como en una red desordenada. Primeramente se enuncia el teorema de Bloch y su bien conocida relación con la estructura de bandas. Posteriormente se introduce el concepto de localización de una partícula en redes periódicas con desorden en una dimensión. En ambos casos no se consideran efectos de interacción. Finalmente se presenta una descripción del problema de muchas partículas, donde los efectos de las interacciones son incorporadas y esto conduce al Hamiltoniano de Bose-Hubbard (HBH). Al final de este capítulo se presenta un resumen del conocimiento de las fases existentes en el HBH como función de los parámetros que lo definen.

## 3.1. Movimiento de una partícula en una red periódica

Como es bien sabido, el movimiento de una partícula en una red cristalina, en este caso el de un electrón, se determina a través del conocimiento de su estado, el cuál a su vez está especificado en términos de la función de onda del electrón. Específicamente, la pregunta a responder es ¿cómo son las funciones de onda y los niveles de energía de un electrón en un potencial periódico? Dar respuesta a este cuestionamiento requiere partir de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico V(x), esto es,

$$H\phi_q^{(n)}(x) = E_q^{(n)}\phi_q^{(n)}(x), \tag{3.1}$$

en donde  $H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$  y V(x) = V(x + a), siendo *a* la periodicidad de la red. Sin entrar en detalle, las soluciones para esta ecuación, son las llamadas funciones
de onda de Bloch [36], que son de la forma de una onda plana  $e^{iqx}$  multiplicada por una función periódica  $u_q^{(n)}(x)$ , con la periodicidad definida en el potencial V(x), esto es, son funciones de la forma

$$\phi_q^{(n)}(x) = e^{iqx} u_q^{(n)}(x). \tag{3.2}$$

La ecuación anterior es conocida como teorema de Bloch. Cualquier solución físicamente aceptable de la ecuación de Schrödinger en un potencial periódico toma la forma de ondas planas moduladas con la periodicidad de la red. En la figura 3.1 se ilustra dicho comportamiento. Una forma equivalente de escribir la ecuación (3.2) es

$$\phi_q(x+t_m) = e^{iqt_m}\phi_q(x), \tag{3.3}$$

donde  $t_m = ma$  es una translación en la red y m toma valores enteros. Tomando en cuenta las condiciones a la frontera periódicas, la función de onda cumple con

$$\phi(x + Na) = \phi(x), \tag{3.4}$$

esto es, los puntos en x y en x + Na son físicamente equivalentes, esta condición (3.4) restringe los valores del vector de Bloch a aquellos que satisfagan la siguiente igualdad

$$e^{iqNa} = 1, (3.5)$$

entonces los valores permitidos de q son  $q = \frac{2\pi}{Na}n$  donde  $n = 0, \pm 1, \pm 2...$ El teorema de Bloch desempeña un papel central en la física de los sistemas

El teorema de Bloch desempeña un papel central en la física de los sistemas periódicos, no sólo porque caracteriza la forma de las funciones de onda, sino porque conlleva el hecho de que el espectro de energía se divide en regiones de energía permitida y energía prohibida, esto da origen a lo que es llamado la banda de energía. Tal es el caso del modelo de Kronig-Penney, el cual representa el caso más sencillo de un cristal en una dimensión [36].



**Figura 3.1:** Ilustración de la función de onda de Bloch extendida en toda la red en una dimensión. La línea sólida corresponde a la parte real, la línea punteada proviene del factor  $e^{iqx}$ . Los círculos representan los núcleos de los átomos.

# 3.2. Estructura de bandas de una partícula en una red óptica periódica

Como se mencionó anteriormente, uno de los fundamentos de la física del estado sólido es que un electrón en un potencial periódico sólo puede moverse en la llamada banda de energía [36]. Su relación de dispersión ya no es un continuo como en el caso de una partícula libre, sino que exhibe ciertas restricción a las denominadas bandas permitidas. Estas regiones surgen como resultado de la interacción del electrón con los iones que se encuentran periódicamente dispuestos en el sólido. El mismo mecanismo también se aplica a los átomos neutros de un gas ultrafrío moviéndose en una red óptica. Si bien la red óptica en este caso más sencillo es una red cuadrada, tal como se mencionó en el capítulo anterior, la discusión que se presenta a continuación se centrará en un sólo eje (x), es decir en una dimensión. Específicamente, se presenta la solución de un solo átomo en un potencial periódico V(x) con periodicidad a, como los que típicamente se tienen en el laboratorio. La ecuación de Schrödinger (3.1) para el Hamiltoniano de una partícula en una red óptica está dado por la siguiente expresión:

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \sin^2(k_0 x), \qquad (3.6)$$

donde *m* es la masa de la partícula y  $k_0 = \frac{\pi}{a}$ . Dado que la partícula se encuentra en un potencial periódico, las soluciones a la ecuación de Schrödinger (3.1) como se mencionó en la sección anterior son las funciones de Bloch (3.2). Si se sustituyen estas funciones y el Hamiltoniano (3.6) en la ecuación de Schrödinger, esto es,

$$\begin{aligned} H(x)\phi_q^{(n)}(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0 \sin^2(k_0 x)\right)e^{iqx}u_q^{(n)}(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\left(iqe^{iqx}u_q^{(n)}(x) + e^{iqx}\frac{d}{dx}u_q^{(n)}(x)\right) + V_0 \sin^2(k_0 x)e^{iqx}u_q^{(n)}(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-q^2e^{iqx}u_q^{(n)}(x) + 2iqe^{iqx}\frac{d}{dx}u_q^{(n)}(x) + e^{iqx}\frac{d^2}{dx^2}u_q^{(n)}(x)\right) \\ &+ V_0 \sin^2(k_0 x)e^{iqx}u_q^{(n)}(x), \end{aligned}$$

la expresión anterior se puede reescribir de la siguiente manera:

$$H(x)e^{iqx}u_q^{(n)}(x) = \frac{1}{2m}e^{iqx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx} + \hbar q\right)^2 u_q^{(n)}(x) + V_0\sin^2(k_0x)e^{iqx}u_q^{(n)}(x).$$

Esta última es precisamente la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos, esto es,

$$H_q(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( -i\frac{d}{dx} + q \right)^2 + V_0 \sin^2(k_0 x).$$
(3.7)

Entonces la ecuación de Schrödinger estacionaria es,

$$H(x)\phi_q^{(n)}(x) = H_q(x)e^{iqx}u_q^{(n)}(x)$$
(3.8)

$$H_q(x)e^{iqx}u_q^{(n)}(x) = \varepsilon_q^{(n)}e^{iqx}u_q^{(n)}(x)$$
(3.9)

$$H_q(x)u_q^{(n)}(x) = \varepsilon_q^{(n)}u_q^{(n)}(x).$$
(3.10)

Dado que el potencial V(x) y las funciones  $u_q^{(n)}(x)$  son periódicas y tienen la misma periodicidad, éstas pueden ser escritas como una serie de Fourier, esto es,

$$u_q^{(n)}(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_q^{(n)} e^{i2k_0 xj}.$$
(3.11)

Ahora consideremos el potencial de una red óptica V(x) dado por la siguiente expresión

$$V(x) = V_0 \sin^2(k_0 x) = -\frac{1}{4} V_0 \left( e^{2ik_0 x} + e^{-2ik_0 x} - 1 \right), \qquad (3.12)$$

sustituyendo las expresiones (3.11) y (3.12) en la ecuación (3.10) se tiene

$$H_q(x)u_q^{(n)}(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_q^{(n)} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left( 2k_0 j + q \right)^2 - \frac{1}{4} V_0 \left( e^{2ik_0 x} + e^{-2ik_0 x} - 1 \right) \right\} e^{i2k_0 x j}$$
$$= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left\{ c_q^{(n)}(j) \left( \frac{\hbar^2}{2m} \left( 2k_0 j + q \right)^2 + \frac{1}{4} V_0 \right) - \frac{1}{4} V_0 \left( c_q^{(n)}(j-1) + c_q^{(n)}(j+1) \right) \right\} e^{i2k_0 j}$$

que se reduce a

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(2k_0j+q\right)^2 + \frac{1}{4}V_0\right)c_q^{(n)}(j) - \frac{1}{4}V_0\left(c_q^{(n)}(j-1) + c_q^{(n)}(j+1)\right) = \varepsilon_q^{(n)}c_q^{(n)}(j),$$

que en forma matricial, se expresa como:

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} H_{j,j'} c_q^{(n)}(j') = \varepsilon_q^{(n)} c_q^{(n)}(j).$$
(3.13)

Ésta es una ecuación de valores propios, donde los coeficientes  $c_q^{(n)}(j)$  son los vectores propios y  $\varepsilon_q^{(n)}$  son los valores propios.  $H_{j,j'}(q)$  es una matriz que sólo tiene entradas en la diagonal y en la parte superior e inferior de la diagonal los valores que toma son los siguientes:

$$H_{j,j'} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} (2k_0 j + q)^2 + V_0/4 & \text{si } j = j' \\ -(1/4)V_0 & \text{si } |j - j'| = 1 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$
(3.14)

donde  $H_{j,j'}$  es una matriz simétrica la cual se puede diagonaizar. Los coeficientes  $c_q^{(n)}(j)$  llegan a ser despreciablemente pequeños para j grandes. Considerando esta información, sólo se tomará encuenta los valores de -5 < j < 5 [79], se construirá la matriz (3.14) y se obtendrán los valores propios, y esto dará origen a la conocida estructura de bandas.



Figura 3.2: Estructura de bandas para un átomo en una red óptica en una dimensión, esto es,  $V(x) = V_0 \sin^2(k_0 x)$  para diferentes valores de  $V_0$  en función del momento q.

En la figura 3.2 se ilustra la estructura de banda para un átomo en una red óptica para diferentes valores de la profundidad  $V_0$ . Para un valor de  $V_0 = 0$  se recupera la parábola típica de una partícula libre. Para profundidades de red diferentes de cero, esto es,  $V_0 = 4E_R$  hasta  $V_0 = 12E_R$ , emerge una estructura de bandas, donde los diferentes niveles de energía están divididos por una brecha de energía. Al aumentar la profundidad de la red esta brecha se hace más grande y el ancho de banda disminuye y para una red muy profunda converge a los niveles discretos de un oscilador armónico.

La estructura de bandas surge como consecuencia de la periodicidad que existe en la red. Si la red sufre alguna imperfección, esto es, si su periodicidad se ve afectada, ya sea por alguna imperfección o alguna vacancia en la red, el efecto es la pérdida del esquema de bandas. En este caso la estructura de bandas es remplazada por un comportamiento totalmente diferente. En las siguientes secciones de este capítulo se mencionará cuales son las consecuencias de tales imperfecciones en la red y cual es el fenómeno que se manifiesta al no tener una red perfecta.

### 3.3. El modelo de Anderson en una dimensión

En la sección anterior se ha repasado brevemente el estudio del movimiento de una partícula bajo la influencia de un potencial periódico. Pero en la naturaleza existen potenciales que no son perfectos, esto es, existen obstáculos que impiden un libre tránsito del electrón o partícula neutra a través de la red, esto es el precisamente el desorden. En seguida se describirá el movimiento de una partícula en un potencial desordenado en una dimensión. El Hamiltoniano para una partícula confinada en un potencial desordenado está descrito por el modelo de Anderson en segunda cuantización, el Hamiltoniano es de la siguiente forma[80]

$$H = -\sum_{\langle m,n\rangle} J\left(a_m^{\dagger}a_n + h.c\right) + \sum_m \epsilon_m a_m^{\dagger}a_m, \qquad (3.15)$$

donde  $\langle m, n \rangle$  indica la suma sobre los primeros vecinos;  $a_m^{\dagger}, a_n$  son los operadores de creación y aniquilación de un electrón en el sitio m y  $\epsilon_m$  son las energías en el sitio m, las cuales varían aleatoriamente representando el desorden y son independientes por cada sitio de la red. Es importante hacer notar que en el modelo de Anderson no se considera la interacción entre partículas. Con el objetivo de analizar el comportamiento de las funciones de onda para sistemas finitos, se procede aquí con el estudio del caso en una dimensión, siguiendo el análisis hecho por Haake, conocido como método de la matriz de transferencia [81].

La ecuación de valores propios para la función de onda de una partícula con el Hamiltoniano de Anderson (3.15) es

$$-J(\Psi_{m+1} + \Psi_{m-1}) - \epsilon_m \Psi_m = E \Psi_m, \qquad (3.16)$$

donde el subíndice m etiqueta la función de onda asociada al sitio m, tal que m toma los valores ... -2, -1, 0, 1, 2... Esta ecuación puede escribirse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \Psi_{m+1} \\ \Psi_m \end{pmatrix} = M_m \begin{pmatrix} \Psi_m \\ \Psi_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(E+\varepsilon_m)/J & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_m \\ \Psi_{m-1} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

donde  $M_m$  es una matriz, llamada de transferencia, que relaciona la función de onda en los sitios m y m - 1 con la función de onda en los sitios m y m + 1. La matriz  $M_m$  tiene determinante igual a 1 y sus elementos diagonales tienen carácter aleatorio dada la naturaleza de  $\epsilon_m$ . En otras palabras, en el modelo de Anderson dado que el electrón se mueve en un potencial totalmente aleatorio, las energías de sitio  $\epsilon_n$ son variables aleatorias independientes, dando lugar con ello a que las matrices de transferencia  $M_m$  sean matrices aleatorias. Empezando con m = 1 y aplicando la relación de recurrencia hacia la izquierda se tiene la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} \Psi_{m+1} \\ \Psi_m \end{pmatrix} = M_m M_{m-1} \dots M_2 M_1 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix}.$$
(3.18)

Dadas las condiciones iniciales  $\Psi_0$  y  $\Psi_1$ , es posible a través del producto de matrices de transferencia, construir la función de onda en los sitios m y m + 1. El análisis del comportamiento de los estados depende de las propiedades del producto de las matrices aleatorias  $M_m M_{m-1} \dots M_2 M_1$  en el límite en que el número de factores tiende a infinito. Las propiedades de los estados pueden analizarse por medio del teorema de Furstenberg [81]. Sin profundizar demasiado, nos limitamos aquí a enunciar dicho teorema. Sean  $M_m$  matrices aleatorias con determinante igual a 1, se tiene entonces que

$$\lim_{m \to \infty} \frac{1}{m} \log Tr[M_m M_{m-1} \dots M_2 M_1] = \gamma > 0.$$
(3.19)



**Figura 3.3:** Ilustración de la localización de Anderson en una dimensión. Para 1000 sitios de red y un desorden arbitrario en las energías  $\epsilon_i$  del Hamiltoniano (3.15).

La implicación de este teorema es que el producto de matrices  $M_m M_{m-1} \dots M_2 M_1$ tiene, para  $m \to \infty$ , los eigenvalores  $e^{\pm \gamma m}$ . El parámetro  $\gamma$  constituye la tasa de crecimiento exponencial o máximo exponente característico llamado de Lyapunov [81]. Debido a que el parámetro  $\gamma$  es positivo resulta que las soluciones  $\Psi_m$  de la ecuación de Schrödinger crecen exponencialmente para casi cualquier condición inicial  $\Psi_0, \Psi_1$ . El teorema de Furstenberg permite demostrar por lo tanto que las soluciones de la ecuación de Schrödinger (3.16) crecen exponencialmente. Sin embargo, para contar con una solución físicamente aceptable, es necesario imponer condiciones de frontera sobre las funciones de onda asociadas a los sitios 0 y 1. Dicha exigencia da lugar a que los eigenvalores de la energía correspondan a un espectro discreto. En otras palabras, para tener una solución aceptable se fija  $\Psi_0$  y  $\Psi_1$ , de tal manera que la función de onda decaiga exponencialmente a la derecha de la red, al mismo tiempo el mismo argumento debe ser aplicado para el comportamiento de la función de onda a la izquierda de la red, esto es, para *m* negativos. Esto no puede suceder sin que la energía E tome valores discretos  $E_{\nu}$  donde  $\nu$  denota la posición en el cual el eigenvector está centrado, entonces el espectro no puede ser continuo y las funciones de onda son de la forma

$$\Psi_m^{\nu} = e^{-|\nu - m|/\xi}, \qquad (3.20)$$

es decir, funciones exponencialmente localizadas, siendo  $\xi$  la longitud de localización que establece el ancho de dichas funciones. Esta estructura es precisamente la que permite denominar a dichos estados como localizados. En la figura 3.3 se ilustra el comportamiento de la función de onda al aplicar el teorema de Furstenberg al Hamiltoniano (3.15), considerando una red compuesta por 1000 sitios. Es importante mencionar que desafortunadamente el teorema de Furstenberg es solamente aplicable a sistemas en una dimensión. Una de las preguntas abiertas que dan motivación a esta tesis es abordar la cuestión de encontrar eigenestados localizados en dos dimensiones, para partículas débilmente interactuantes en redes ópticas con desorden.

### 3.4. Teoría de campo medio y diagramas de fase

En las primeras secciones de este capítulo se hizo enfásis al estudio ya conocido del movimiento de una partícula en una red periódica sin desorden, esto es, se calculó la estructura de banda de un átomo en una red óptica para diferentes configuraciones de red y se finalizó con el estudio de una partícula en una red con desorden. Ciertamente en la vida cotidiana es difícil encontrar a una partícula aislada del resto del universo, esto es, una partícula siempre se encuentra sometida a las interacciones con otras partículas y de esta manera surge la llamada física de muchos cuerpos. Una manera de estudiar el problema de muchos cuerpos es por medio de los gases ultrafríos [80]. Una de las principales motivaciones de este trabajo son las contribuciones experimentales en torno al problema de la localización de Anderson en gases ultrafríos para bosones [17, 18, 19, 26], es decir con interacciones débiles. Sin embargo, no es contundente hasta ahora desde el punto de vista teórico si existe el fenómeno de localización en dos dimensiones en el límite de bajas interacciones. La manera de describir este fenómeno de muchos cuerpos dentro del contexto teórico es de primeros principios dentro del esquema de segunda cuantización. El Hamiltoniano que describe un gas de Bosones con interacción es llamado el modelo de Bose-Hubbard; para arribar a este Hamiltoniano se empieza escribiendo un Hamiltoniano general para un gas de bosones sin espín con masa m en un potencial externo [82], esto es,

$$H = \int d^3 \mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{ext}(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}'),$$
(3.21)

donde  $\Psi^{\dagger}(\mathbf{r})$  y  $\Psi(\mathbf{r})$  son los operadores de campo de creación y aniquilación, los cuales satifacen las siguientes reglas de conmutación

$$\left[\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')\right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \qquad (3.22)$$

$$\left[\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}),\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}')\right] = 0 \tag{3.23}$$

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')] = 0. \tag{3.24}$$

Dado que el gas es muy diluido, las interacciones entre partículas  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  son a bajas energías y se hace la aproximación de que se den entre pares de partículas, esto es, la interacción es de contacto y toma la siguiente forma  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , donde  $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ , a es la longitud de dispersión de onda s, m su respectiva masa. Sustituyendo la expresión que representa la interacción de contacto en la ecuación (4.2) se tiene lo siguiente,

$$H = \int d^3 \mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{ext}(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{2\pi a\hbar^2}{m} \int d^3 \mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (3.25)$$

por el momento el problema se va a limitar a un sistema homogéneo y el potencial externo que se va a considerar es el de una red óptica.

Debido a la baja temperatura en la cual se encuentra el gas se puede suponer que todos los bosones están en la banda más baja de energía, esto implica que los operadores de campo se pueden desarrollar con las funciones de Wannier de la banda más baja, esto es,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{i} a_{i} \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}), \qquad (3.26)$$

$$\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{i} a_{i}^{\dagger} \omega^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}).$$
(3.27)

Las funciones de Wannier satisfacen la ortonormalidad, esto es,

$$\int d^3 \mathbf{r} \omega^* (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{i}}) \omega (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}) = \delta_{i,j}, \qquad (3.28)$$

$$\sum_{i} \omega^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i})\omega(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{i}) = \delta(r - r').$$
(3.29)

Estas funciones forman una base y están localizadas en la posición  $r_i$  y su forma depende de la periodicidad de la red, pero éstas no son estados propios del Hamiltoniano. Si ahora sustituimos los valores de los operadores de campo en el Hamiltoniano (3.25) se tiene

$$H = \sum_{i,j} \int d^{3}\mathbf{r} a_{i}^{\dagger} \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}) \left( -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + U_{ext}(\mathbf{r}) \right) a_{j} \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{j}) + \qquad (3.30)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \frac{4\pi a \hbar^{2}}{m} \int d^{3}\mathbf{r} a_{i}^{\dagger} \omega^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}) a_{j}^{\dagger} \omega^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{j}) a_{k} \omega^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{k}) a_{l} \omega^{*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{l}).$$

Dado que las funciones de Wannier están fuertemente localizadas en un sitio de la red, esto permite reescribir el Hamiltoniano (3.30) de la siguente manera

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \left(a_i^{\dagger}a_j\right) + \frac{U}{2}\sum_i a_i^{\dagger}a_i^{\dagger}a_ia_i.$$
(3.31)

donde los parámetros se derivan de las funciones de Wannier y estos son:

$$J = \int d^3 \mathbf{r} \omega^* (\mathbf{r} - \mathbf{r_i}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r_j}).$$
(3.32)

$$U = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d^3 \mathbf{r} \mid \omega(\mathbf{r}) \mid^4.$$
(3.33)

Estas expresiones son exactas, pero como se mostrará más adelante se realizará una aproximación para calcular el tunelamiento y la energía de interacción en función de la energía de recoil  $E_R$ .

### 3.4.1. Funciones de Wannier en la aproximación armónica

En esta sección se deducirá una expresión aproximada para la función de Wannier en una red y se usará para estimar la energía U, que es la energía de interacción efectiva en un sitio. Consideremos un potencial tipo red óptica dado por la siguiente expresión

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{3} V_{j,0} \sin^2(kx_j), \qquad (3.34)$$

donde  $k = 2\pi/\lambda$  y  $\lambda$  es la longitud de onda del láser que genera la red óptica. Consideremos que el potencial (3.34) tiene la propiedad de ser separable, esto implica que las funciones de Wannier  $\omega(r)$  en cada sitio pueden ser factorizadas, esto es,

$$\omega(r) = \omega_I(x)\omega_{II}(y)\omega_{III}(z), \qquad (3.35)$$

entonces las tres funciones de Wannier  $w_I$ ,  $w_{II}$ ,  $w_{III}$  tienen las mismas expresiones y en el caso de una red isotrópica éstas son exactamente las mismas. Ahora si desarrollamos el potencial de la red óptica alrededor de los mínimos de cada pozo que forman a la red óptica se tiene lo siguiente

$$V(r) = \sum_{j=1}^{3} V_{j,0} \sin^2(kx_j) \approx \sum_{j=1}^{3} V_{j,0} k^2 x_j^2 = \frac{m}{2} \sum_{j=1}^{3} \nu_j x_j^2, \qquad (3.36)$$

donde se ha introducido las frecuencias

$$\nu_j = \sqrt{\frac{2k^2}{m}} V_{0,j} = \frac{\hbar k^2}{m} \sqrt{\frac{V_{0,j}}{E_R}},$$
(3.37)

donde  $E_R$  es la energía de recoil. Para el potencial(3.36), dado que la aproximación es un potencial armónico, la función de onda que le corresponde al estado base de energía es una función de onda Gaussiana dada por la siguiente expresión

$$w_{(\alpha)}(x_{\alpha}) = \frac{1}{(\pi d_{\alpha}^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x_{\alpha}}{d_{\alpha}}\right)^2\right),$$
 (3.38)

donde  $\alpha = 1, 2, 3$  y  $d_{\alpha}$  es la longitud característica, esto es,

$$\frac{1}{d_{\alpha}} = \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \left(\frac{2V_{0,\alpha}k^2}{m}\right)^{1/4} = \left(\frac{2V_{0,\alpha}k^2m}{\hbar^2}\right)^{1/4}.$$
(3.39)

Ahora si calculamos la energía de interacción usando la ecuación (3.33) donde vamos a definir a  $U_0 = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m}$ , entonces tenemos las siguientes expresiones

$$U \equiv U_0 \int d^3 \mathbf{r} \mid W(\mathbf{r}) \mid^4 = U_0 \prod_{\alpha=1}^3 \int dx \mid w_\alpha(x) \mid^4.$$
 (3.40)

$$U = U_0 \prod_{\alpha=1}^3 \frac{1}{\pi d_{\alpha}^2} \int dx \exp\left[-2\left(\frac{x}{d_{\alpha}}\right)^2\right]$$
  
=  $U_0 \prod_{\alpha=1}^3 \frac{1}{\pi d_{\alpha}^2} d_{\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2}} = U_0 \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \prod_{\alpha=1}^3 \frac{1}{d_{\alpha}}$   
=  $U_0 \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \prod_{\alpha=1}^3 \left(\frac{2V_{0,\alpha}k^2m}{\hbar^2}\right)^{1/4},$ 

sustituyendo el valor correspondiente para  $U_0$  en la ecuación anterior

$$U = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m\sqrt{8\pi^3}} \left(\frac{2k^2 m}{\hbar^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^{3/4} \prod_{\alpha=1}^3 \left(\frac{V_{0,\alpha}}{E_R}\right)^{1/4}$$
$$= \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m\sqrt{8\pi^3}} k^3 \prod_{\alpha=1}^3 \left(\frac{V_{0,\alpha}}{E_R}\right)^{1/4}$$
$$= \frac{8\pi}{\sqrt{8\pi^3}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} k a_s \prod_{\alpha=1}^3 \left(\frac{V_{0,\alpha}}{E_R}\right)^{1/4}$$
$$= E_R \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_s \prod_{\alpha=1}^3 \left(\frac{V_{0,\alpha}}{E_R}\right)^{1/4}.$$

El resultado final para la energía de interacción U en un sitio en la aproximación armónica es,

$$\frac{U}{E_R} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_s \prod_{\alpha=1}^3 \left(\frac{V_{0,\alpha}}{E_R}\right)^{1/4},$$
(3.41)

que para el caso de una red isotrópica  $V_{0,j} = V_0$  se tiene que la energía de interacción en unidades de energía de recoil es [83]

$$\frac{U}{E_R} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_s \left(\frac{V_0}{E_R}\right)^{1/4}.$$
(3.42)

Siguiendo el mismo procedimiento pero ahora para dos dimensiones, se tiene la siguiente expresión para la energía de interacción en unidades de energía de recoil, esto es,

$$\frac{U^{2D}}{E_R} = 4\tilde{a}_s \left(\frac{V_0}{E_R}\right)^{1/2},\tag{3.43}$$

donde  $\tilde{a}_s = a_s/l_z$ .<sup>1</sup> Reescribiendo la ecuación anterior en términos de  $g_{2D}$ <sup>2</sup> se tiene la siguiente expresión

$$\frac{U^{2D}}{E_R} = \frac{g_{2D} \frac{\pi}{2a_s^2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}}{E_R}.$$
(3.44)

Para calcular la energía de tunelamiento J, procedemos de la misma manera sustituyendo las funciones de Wannier para el estado base en la ecuación (3.32), esto es,

$$J = \prod_{\alpha=1}^{3} \int w_{\alpha}(x - x_{m}) \left(\frac{-\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + V(r)_{ext}\right) w_{\alpha}(x - x_{m-1}) dx, \qquad (3.45)$$

dado que los átomos se encuentran a temperaturas cercanas al cero absoluto esto conlleva que la banda más baja este poblada, entoces para calcular el valor explícito de la energía de tunelamiento (por simplicidad ilustramos el cálculo de J en una sola coordenada), esto es,

$$J = \int w_0(x - x_m) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \sin^2(kx)\right) w_0(x - x_{m-1}) dx, \qquad (3.46)$$

sustituyendo los valores de las funciones de Wannier del oscilador armónico y el potencial de red óptica cúbica se tiene que la energía de tunelamiento en unidades de enrgía de recoil es la siguiente [83],

$$\frac{J}{E_R} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_0}{E_R}\right)^{3/4} \exp\left(-2\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right). \tag{3.47}$$

El tratamiento anterior es para una red cúbica en tres dimensiones. Calculamos la energía de tunelamiento (3.32) que tienen los átomos cuando estos se encuentran en un potencial de red cuadrada, esto es, en dos dimensiones. Sustituyendo los valores de las funciones de Wannier del oscilador armónico en dos dimensiones, el potencial de red cuadrada en la aproximación armónica en (3.32). Con lo anterior se obtiene la energía de tunelamiento de los átomos en función de la energía de recoil  $E_R$ , la expresión es la siguiente

 $a_s$  es la longitud de dispersión en tres dimensiones y  $l_z$  es la longitud del oscilador armónico.

$$\frac{J}{E_R} = 2\sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right).$$
(3.48)

Para la red hexagonal el valor de J depende de la elección de las funciones de Wannier en cada sitio, esto es, la energía de tunelamiento entre vecinos cercanos para una red de hexagonal es [84]

$$\frac{J}{E_R} = \left(\frac{\pi^2}{3} - 1\right) \frac{V_0}{E_R} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{9}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right).$$
 (3.49)

El comportamiento de los diferentes coeficientes de energía de tunelamiento entre vecinos cercanos están como función de la profundidad de la red, esto es,  $s = \frac{V_0}{E_R}$ , en unidades de energía de recoil, mostrando un comportamiento para cualquier geometría y dimensionalidad expresado de la siguiente manera [85]

$$\frac{J}{E_R} = A s^{\alpha} e^{\beta \sqrt{s}},\tag{3.50}$$

donde A,  $\alpha$ , y  $\beta$ , corresponden a los parámetros de ajuste para cada geometría de red. En la figura 3.4 se ilustra el comportamiento de las ecuaciones (3.48) y (3.49), esto es, la energía de tunelamiento entre vecinos cercanos en función de la profundidad s, para dos redes ópticas. En conclusión la energía de tunelamiento que tienen los átomos depende de la geometría y dimensión de la red óptica en la cual se encuentran confinados.



Figura 3.4: Comportamiento de la energía de tunelamiento entre sitios vecinos en función de la profundidad s para dos redes ópticas.

### 3.4.2. Campo medio para el Hamiltoniano de Bose-Hubbard

En la sección anterior se mostró de primeros principios el Hamiltoniano de Bose-Hubbard junto con sus parámetros  $J \ge U$  para un potencial tipo red óptica. Como se ha mencionado anteriormente existen varios experimentos de Bosones en redes ópticas [17, 18, 19, 26]. La manera en la cual se puede describir teóricamente al conjunto de átomos de Bose con interacción, confinados en una red óptica y sujetos a la influencia de desorden es a través del modelo de Anderson-Bose-Hubbard, el cual tiene un par de componentes más en el Hamiltoniano (3.31). Esto es, el Hamiltoniano que describe un gas de bosones en una red desordenada, conocido como de Anderson-Bose-Hubbard (o Hamiltoniano extendido de Bose-Hubbard), tiene la siguiente forma [86],

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J\left(a_i^{\dagger} a_j + h.c\right) + \sum_j (\Delta_j - \mu) a_j^{\dagger} a_j + \sum_i U n_i (n_i - 1).$$
(3.51)

En este Hamiltoniano  $\Delta_j$  modela el desorden en un sitio,  $\mu$  es el potencial químico, J es el tunelamiento que hay entre sitios vecinos,  $n_i$  es el operador de número y finalmente U es la energía de interacción entre partículas que se encuentran en el mismo sitio. Los operadores de creación y aniquilación,  $a_i^{\dagger}$  y  $a_j$ , obedecen las reglas de commutación usuales para bosones  $[a_i, a_j^{\dagger}] = \delta_{i,j}$ .

En el modelo original de Anderson para metales no se considera la interacción que hay entre los electrones. Sin embargo, en el caso de un condensado de Bose la interacción entre los átomos puede ser incluida dentro del modelo, dado que en el contexto experimental ésta es una cantidad susceptible a ser controlada.

Es importante resaltar que el Hamiltoniano (3.51) es estructuralmente idéntico al que representa a un sistema de electrones confinados en una red cristalina o amorfa. Sin embargo, dada la capacidad experimental de controlar tanto el potencial en el cual se mueven los átomos ultrafríos en redes ópticas, como las interacciones entre los mismos, el estudio del transporte y propiedades estacionarias de los átomos neutros permitirá hacer analogías e inferencias en el contexto de la materia condensada. En la figura 3.5 se muestra una imagen cualitativa que representa el desorden en pozos de potencial. En este caso el desorden es modelado por diferencias de energía aleatoria en un intervalo de  $\Delta_i \in [-\Delta, \Delta]$ .

La determinación de las diferentes fases como función de la interacción entre partículas se realiza dentro de la teoría de perturbaciones a segundo orden, en la aproximación de desacoplamiento. Dicha aproximación está sustentada en la teoría de campo medio, a través de los llamados parámetros de orden del superfluido. La idea central se basa en desacoplar el tunelamiento entre sitios del Hamiltoniano (3.51). Específicamente en esta aproximación, denominada de campo medio, se propone que el valor de expectación de los operadores de creación y aniquilación vía campo medio



**Figura 3.5:** Pozos de potencial que confinan bosones (a) sin desorden (b) con desorden  $\Delta$ . Imagen tomada de [88]

sea indistinto e igual a un parámetro desconocido:

$$\langle a_i^{\dagger} \rangle \equiv \langle a_i \rangle \equiv \psi, \qquad (3.52)$$

donde  $\psi$  es llamado parámetro de orden. Con esta suposición y reescribiendo el primer término del Hamiltoniano (3.51), es decir, el término de tunelamiento se tiene que,

$$a_i^{\dagger} a_j = [(a_i^{\dagger} - \psi) + \psi][(a_j - \psi) + \psi], \qquad (3.53)$$

$$a_i^{\dagger} a_j = (a_i^{\dagger} - \psi)(a_j - \psi) + \psi(a_i^{\dagger} - \psi) + \psi(a_j - \psi) + \psi^2, \qquad (3.54)$$

ahora tomando la definición de los operadores en la aproximación de campo medio, se tiene

$$a_i^{\dagger}a_j = (a_i^{\dagger} - \langle a_i^{\dagger} \rangle)(a_j - \langle a_i \rangle) + \psi(a_i^{\dagger} + a_j) - \psi^2, \qquad (3.55)$$

$$a_i^{\dagger} a_j = \Delta a_i^{\dagger} \Delta a_j + \psi (a_i^{\dagger} + a_j) - \psi^2, \qquad (3.56)$$

despreciando las fluctuaciones entre sitios  $\Delta a_i^{\dagger} \Delta a_j \approx 0$ , entonces la parte del tunelamiento es

$$a_i^{\dagger} a_j \approx \psi(a_i^{\dagger} + a_j) - \psi^2. \tag{3.57}$$

Reescribiendo el Hamiltoniano para un sitio arbitrario se tiene que

$$H_{MF} = -J\psi(a^{\dagger} + a) + J\psi^{2} + (\Delta - \mu)n + Un(n-1).$$
(3.58)

Este Hamiltoniano se ha convertido por tanto en uno efectivo por sitio y homogéneo. Es importante mencionar que los parámetros de orden  $\psi$  representan físicamente una medida del grado de superfluidez en el sistema confinado, como función de las restricciones que definen el potencial externo y las interacciones entre los átomos. Si ahora separamos al Hamiltoniano en una parte perturbada y no perturbada,

$$H_0 = J\psi^2 + \mu n + \frac{1}{2}Un(n-1), \qquad (3.59)$$

$$V = J\psi(a + a^{\dagger}), \tag{3.60}$$

será posible, vía la magnitud del parámetro de orden, considerar al término de tunelaje como uno perturbativo. Puesto que  $H_0$  es diagonal en la base de Fock, es natural considerar a la base de Fock como los eigenestados del sistema. Usando teoría de perturbaciones, se calculan las correcciones a la energía a primer orden. Dado que dicha contribución es cero, esto es,  $\langle V \rangle = 0$ , se calculan entonces las correcciones a segundo orden:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n|V|m \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0},$$
(3.61)

$$E_n^{(2)} = \left(\frac{|\langle n|b^{\dagger}|n-1\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n-1}^0} + \frac{|\langle n|b|n+1\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n+1}^0}\right)\psi^2 J^2,\tag{3.62}$$

$$E_n^{(2)} = \left(\frac{n}{n-1-\mu} + \frac{n+1}{\mu-n}\right)(\psi J)^2, \qquad (3.63)$$

por lo tanto, la energía con correcciones hasta segundo orden en  $\psi$  es

$$E_n = \frac{1}{2}n(n-1) - \mu n + J\psi^2 + \left(\frac{n}{n-1-\mu} + \frac{n+1}{\mu-n}\right)(J\psi)^2 + O(\psi^3), \quad (3.64)$$

esta última expresión es un funcional de Landau de la energía escrito en términos del parámetro de orden $\psi$ 

$$E_n(\psi) = a_0 + a_2\psi^2 + O(\psi^4).$$
(3.65)

Considerando la identificación de los parámetros de orden (ecuación (3.52)), esto es, el valor de expectación de los operadores de creación y aniquilación en un sitio dado, vemos que  $\psi \neq 0$  implica un estado superfluido, y viceversa  $\psi = 0$  identifica el estado es aislante de Mott, como ya se había descrito antes. La condición para la transición de fase de un estado aislante de Mott a un estado superfluido está dada por los valores de la energía  $E_n(\psi) = 0$ , esto es,

$$a_2 = \left(\frac{n}{n-1-\mu} + \frac{n+1}{\mu-n}\right)J^2 + J = 0, \qquad (3.66)$$

que se puede reescribir como

$$J = \frac{(n-\mu) - (n-\mu)}{1+\mu}.$$
(3.67)

A partir de esta expresión se puede determinar el diagrama de fase para el modelo de Bose-Hubbard sin desorden. Este diagrama aparece ilustrado en la figura 3.6a.

El Hamiltonianio de Bose-Hubbard exhibe una transición de fase cuántica entre dos fases que son identificadas en función de la magnitud de los parámetros de interacción y tunelaje, a temperatura T = 0. Se puede destacar que el primero en predecir el diagrama de fases del Hamiltoniano de Bose-Hubbard fue Matthew Fisher y colaboradores en 1989 [87].

Cuando  $U \ll J$  el sistema está en un estado superfluido (SF), en el cual los bosones están deslocalizados y éstos tunelean de un pozo a otro. Cuando  $U \gg J$  el sistema está localizado, esto es, un estado aislante de Mott (MI). Bajo estas dos condiciones la teoría de campo medio predice un diagrama de fase en el espacio  $\mu/U - J/U$ . La determinación del diagrama de fase esta dado por la ecuación (3.67), esta muestra la transición de MI a SF y esto se ilustra en la parte a) de la figura 3.6. Un aislante de Mott está caracterizado por un factor de llenado entero en cada sitio de la red y posee una banda de energía prohibida, en tanto que la fase superfluida se caracteriza por no tener dicho gap y poseer un orden de largo alcance.

Al considerar la presencia del desorden, este afecta las propiedades del sistema y surge una nueva fase para el caso de bosones. Esta fase, llamada vidrio de Bose (GB) [87], es aislante y está caracterizado por compresibilidad finita y no presenta una banda de energía prohibida. En presencia del desorden, la transición a un super-fluido ocurre sin que se presente en la región intermedia una transición al aislante de Mott. En las figuras 3.6b y 3.6c se muestran los diagramas de fase para bosones a temperatura cero en una red periódica en presencia de desorden.



**Figura 3.6:** Diagrama de fase para bosones interactuantes a temperatura T = 0 a) sin desorden b) y c) con desorden. Las regiones amarillas contienen un número entero de átomos por sitio de red, indicando la fase MI. Regiones de color rojo son SF, cuando se rompen los lóbulos aparece la fase vidrio de Bose.

De la figura 3.6 se observa que cuando el desorden es menor que la interacción coexisten las tres fases, aislante de Mott, vidrio de Bose y fases superfluida, en tanto que si el desorden es mucho más grande que la interacción solamente coexisten dos fases, que son la fase de vidrio de Bose y la fase superfluida, tal como se ilustra en la figura 3.6c.

#### 3.4.3. Estado aislante de Mott

La fase aislante de Mott es una fase inducida por las interacciones entre las partículas, el tunelamiento entre sitios de la red es cancelado y las partículas están localizadas por las interacciones. Consideremos el límite en el cual no existe el tunelamiento, esto es,  $J/U \rightarrow 0$ , y en el que domina la interacción, es decir J = 0, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard se simplifica a

$$H = \frac{U}{2} \sum_{l} \left( n_l (n_l - 1) - \mu n_l \right).$$
(3.68)

El Hamiltoniano es diagonal en la base de Fock, los eigenestados de energía pueden ser siempre elegidos como estados de Fock. El estado base total de N partículas en una red homogénea de L sitios es simplemente el producto directo de estados de un solo sitio, por lo tanto el estado de Mott es

$$|\Psi_{MI}\rangle = \prod_{l} |n_l\rangle, \qquad (3.69)$$

donde  $n_l \equiv n = N/L = 1, 2, 3...$  es la densidad entera de partículas. Está densidad de partículas por sitio en la red indica la localización de partículas en el espacio real.

En la fase aislante de Mott las partículas están localizadas sobre los sitios de la red. Si ahora se desea calcular la probabilidad de encontrar a las partículas en los sitios de la red, esto es,

$$p_n(q) = |\langle q | \Psi_{MI}(n) \rangle|^2$$
$$= \delta_{qn}.$$

La probabilidad de encontrar n partículas en cualquier sitio arbitrario en un estado homogéneo, o de aislante de Mott, es por lo tanto igual al uno.

Las características que distinguen a la fase aislante de Mott son las siguientes. Existe un número fijo de bosones por sitio en la red, esto es, los átomos están localizados con densidad uniforme en los sitios. El espectro de excitaciones contempla un gap energético. Como es sabido el gap es una energía asociada con la creación de un agujero o la adición de una partícula, por lo que, la eliminación de un átomo en un sitio de red y/o la agregación a otro sitio de la red, conlleva un costo de la energía de interacción U, dando origen al gap. Cuando el gap está presente la compresibilidad se vuelve esencialmente nula, i.e, no existe la manera de agregar o quitar partículas. Por otra parte desaparece la fracción superfluida y es un estado aislante.

### 3.4.4. Estado superfluido

El caso opuesto el cual toma en cuenta el término cinético del Hamiltoniano y domina sobre la interacción, esto es, el tunelamiento  $J \gg U$ , entonces el Hamiltoniano

(3.51) se simplifica a la siguiente expresión,

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J\left(a_i^{\dagger} a_j + h.c\right).$$
(3.70)

El estado base de cada átomo es deslocalizado en toda la red, esto es, el eigenestado del Hamiltoniano (3.70) para N bosones sobre la red con M sitios es de la forma

$$|\Psi_{SF}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{i=1}^{M} a_i^{\dagger}\right)^N |0\rangle, \qquad (3.71)$$

donde  $|0\rangle$  denota el estado vacío. En la fase superfluida, cada átomo se propaga a lo largo de toda la red con fase coherente, en otras palabras el gas exhibe coherencia de fase. La fase superfluida también se puede describir por un estado coherente que es el estado propio del operador de aniquilación en el espacio de Fock y, como es bien sabido, el estado coherente de una partícula es,

$$\phi\rangle = e^{\phi a^{\intercal}}|0\rangle. \tag{3.72}$$

Sea un total de N partículas no interactuantes, en un potencial homegéneo y periódico, donde las partículas ocupan el nivel más bajo de energía  $|0\rangle$ , una forma general del estado fundamental de muchos cuerpos es

$$|\Psi_{SF}\rangle = e^{-N/2} e^{\sqrt{Na^{\dagger}}} |0\rangle. \tag{3.73}$$

El estado coherente de muchos cuerpos con N partículas en promedio se descompone en un producto directo de estados coherentes en cada sitio de la red (L) con n = N/Lpartículas en promedio. El estado coherente se factoriza en un producto de estados coherentes de densidad de partículas n. La probabilidad de medir q partículas en una red arbitraria es

$$p_{n}(q) = |\langle q | \Psi_{SF}(n) \rangle|^{2}$$

$$= |\langle 0 | \frac{a^{q}}{\sqrt{q!}} e^{-\frac{n}{2}} e^{\sqrt{n}a^{\dagger}} |0\rangle|^{2}$$

$$= |\frac{1}{\sqrt{q!}} e^{-\frac{n}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n^{m/2}}{m!} \langle 0 | a^{q} a^{\dagger m} |0\rangle|^{2}$$

$$= |\frac{1}{\sqrt{q!}} e^{-\frac{n}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n^{m/2}}{m!} \sqrt{q!} \sqrt{m!} \langle q | m \rangle|^{2}$$

$$= |\frac{1}{\sqrt{q!}} e^{-\frac{n}{2}} \frac{n^{q/2}q!}{q!}|^{2}$$

$$p_{n}(q) = \frac{n^{q} e^{-n}}{q!}.$$

Por lo tanto, en la fase superfluida la probabilidad de encontrar q átomos en cualquier sitio está dado por la distribución de Poisson en el límite termodinámico para U = 0. En la figura 3.7 se ilustra una distribucción de probabilidad para observar n partículas en un sitio arbitrario de un superfluido en una red óptica.



**Figura 3.7:** Distribución de probabilidad para observar *n* partículas en un sitio arbitrario. La distribucción corresponde a una Poisson  $p_n(q) = \frac{n^q e^{-n}}{q!}$ .

Por otra parte en la fase superfluida presenta el espectro de excitaciones no exhibe un gap energético. La compresibilidad es finita, esto es, se observa un incremento de la densidad, otra característica es que el parámetro de orden es finito. En la figura 3.8 se ilustran cualitativamente ambas fases, tanto la fase superfluida como la fase aislante de Mott encontradas experimentalmente [89].



Figura 3.8: Dos fases distintas para un gas de Bose en una red óptica. a) Un estado superfluido con átomos móviles en toda la red. b) Fase aislante de Mott con átomos localizados en cada sitio de la red. Imagen de la referencia [89].

### 3.4.5. Estado de vidrio de Bose

La inclusión del desorden en las redes ópticas tiene como consecuencia la aparición de una nueva fase; esta fase que separa la fase superfluida y la aislante de Mott y es llamada vidrio de Bose [87]. Esta fase tiene la propiedad de ser compresible, es decir, la compresibilidad toma un valor finito:

$$\kappa = \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu} > 0. \tag{3.74}$$

Físicamente esto significa que no le cuesta energía si se añaden o se quitan partículas del sistema, esto es, el número de partículas no es fijo. Una compresibilidad finita implica un espectro de excitaciones sin hueco, lo cual distingue la fase de vidrio de Bose de la fase aislante de Mott.

En conclusión, la fase vidrio de Bose y la fase Aislante de Mott se diferencian por la naturaleza de su espectro de energía de excitación. La excitación más baja de la energía en la fase aislante de Mott es la excitación de una partícula con una separación impuesta por el costo de energía de la ocupación múltiple en un sitio de la red. Por otro lado, las excitaciones más bajas en un vidrio de Bose corresponde a la ausencia del gap. La presencia o ausencia de un gap se logra demostrar con la compresibilidad calculándola a través del efecto de la curvatura de la trampa sobre el perfil de densidad.

### 3.5. Transiciones de fase cuánticas en átomos ultrafríos

En los últimos años los átomos ultrafríos han servido para estudiar las fases superfluida y aislante de Mott en el laboratorio [89]. Como se describió en las secciones anteriores, las caractéristicas principales de las fases emergen en dos casos extremos, cuando el sistema es no interactuante  $U \rightarrow 0$  y cuando el tunelamiento tiende a ser despreciable  $J \rightarrow 0$ . El gas de Bosones exhibe una transición de superfluido a un aislante de Mott al aumentar la profundidad de la red en tres dimensiones [89]. Sin embargo, tan pronto como J se aproxime a la magnitud de la energía asociada a las interacciones, esto es, cuando la magnitud de la interacción U es comparable al términio de tunelamiento J en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard (3.51),  $J \approx U$ , el sistema sufrirá una transición de fase cuántica del estado aislante de Mott al estado superfluido. El valor crítico  $(U/J)_c$  para la transición de fase cuántica es definido como el punto donde el parámetro de orden  $\psi$  desaparece. Empleando un esquema de campo medio [83, 90] se tiene que

$$\eta_c = \left(\frac{U}{zJ}\right)_c = 2\overline{n} + 1 + \sqrt{(2\overline{n} + 1)^2 - 1},\tag{3.75}$$

donde  $\overline{n}$  es el número de átomos por sitio de red y z es el número de vecinos más cercanos. Para  $\overline{n} = 1$  uno obtiene que para una red óptica en tres dimensiones el punto crítico para la transición  $\eta_c \approx 5.8$  y estos resultados se confirman en [89]. Mientras que para un número de ocupación grande, esto es,  $\overline{n} \gg 1$ , donde  $\overline{n}$  es el número de átomos promedio por sitio de red, el valor crítico es  $\eta_c = 4\overline{n}$ .

La transición de fase cuántica de superfluido a aislante de Mott arriba descrita se puede observar experimentalmente a través de la modificación del cociente J/U, que es susceptible de ser realizada usando las redes ópticas típicas en el laboratorio. Este procedimiento corresponde a una variación en la profundidad del potencial de la red a través de la intensidad del láser, la cual cambia inevitablemente la altura de la barrera potencial entre los sitios de red. La correspondencia entre disminuir el cociente J/Uy la transición al estado aislante se explica de la siguiente forma: al incrementar la profundidad en los sitios y con ello ubicándose los átomos en los mínimos, resulta en una mayor energía de interacción en el sitio. Por otro lado, otra forma de modificar el cociente J/U es usando la capacidad de modificar la longitud de dispersión. Debido a la existencia de resonancias de Feshbach, se puede controlar la longitud de dispersión de la onda s a través de la intensidad de campos magnéticos externos. Un cambio en la longitud de dispersión influye directamente en la interacción de los átomos y, por lo tanto, se puede variar la energía de interacción en el sitio U sin afectar ninguno de los otros parámetros involucrados [89].

En la práctica, la observación de la transición superfluido-aislante de Mott se identifica a través de imágenes de absorción de la nube atómica. Después de un tiempo de expansión dado, es posible inferir la distribución de momentos. La serie correspondiente a las imágenes en un experimento típico se muestra en la figura 3.9 para diferentes valores de la profundidad  $V_0$ , esto es, de  $V_0 = 0$  y  $V_0 = 22E_R$ . Se observa un pico en ausencia de red óptica y una serie de picos de Bragg cuando existe una red óptica con ciertos valores de profundidad. Con el aumento de  $V_0$ estos picos se vuelven más pronunciados. Esta tendencia se invierte repentinamente. Sin embargo, los picos de Bragg eventualmente desaparecerán completamente. Estas imágenes proporcionan en realidad una evidencia directa de la existencia de una transición superfluido-aislante de Mott predicha por el modelo Bose-Hubbard y encontrada experimentalmente [79, 89].



**Figura 3.9:** Imágenes de absorción del patrón de interferencia de ondas de materia para diferentes profundidades de potenciales, después de un período de tiempo de vuelo de 15 ms. En el régimen superfluido para profundidades potenciales de hasta  $12E_R$  son visibles picos máximos de interferencia, lo que demuestra una coherencia de fase de largo alcance a través de la red. Para una profundidad potencial de  $22E_R$  está el régimen de aislante de Mott, el patrón de interferencia ha desaparecido por completo. El patrón de imágenes es tomado del experimento de Markus Greiner [79]

Ciertamente los resultados que se muestran anteriormente corresponde a redes ópticas en tres dimensiones donde el número de coordinación es z = 6, pues corresponden a una red cúbica. Dado que la transición superfluido-aislante de Mott está dada por las fluctuaciones cuánticas es interesante estudiar las consecuencias de la dimensionalidad reducida y la geometría de la red óptica en la transición. Sea un gas de Bose en dos dimensiones en una geometría de red cuadrada, esto es, su número de coordinación es z = 4 y está ausente de un confinamiento armónico. El sistema es también descrito por el Hamiltoniano de Bose-Hubbard (3.51). Cambiando la dimensionalidad del sistema se encuentra una transición de fase de superfluido a aislante de Mott cuando los coeficientes  $\eta_c = J/U \approx 0.06$  [91].

A continuación se presentan los resultados de los diagramas de fase que surgen en las redes triangulares y hexagonales usando técnicas de campo medio para encontrar los valores críticos correspondientes para la transición de superfluido a aislante de Mott [44]. En la figura 3.10 se ilustra el diagrama de fase  $\mu/U$  vs J/U para diferentes factores de llenado, también se ilustra que los valores críticos  $\eta_c = (J/U)_c$  disminuyen al aumentar el factor de llenado g. En este caso para un factor de llenado de g = 1los valores críticos para la transición de aislante de Mott-superfluido para la red triangular es  $\eta_c = 0.037$ , mientras que para la red hexagonal se tiene que el valor crítico es  $\eta_c = 0.086$ . Los valores críticos en los que se producen las transiciones dependen de la dimensión y de la geometría en la cual están inmersas las partículas.



Figura 3.10: Diagrama de fase tomado de [44]. Representa los lóbulos de Mott para una red triangular (panel izquierdo ) y para una red hexagonal (panel derecho) para diversos factores de llenado.

Como se mencionó anteriormente, cuando existe desorden aparece una nueva fase llamada vidrio de Bose. Esta fase corresponde para sistemas desordenados y altamente interactuantes. Los primeros en predecir está fase fueron Fisher *et al* [87]. No obstante también predijeron que la fase vidrio de Bose aparecería siempre entre las fases de aislante de Mott y superfluido, este comportamiento se ilustra en la gráfica de la figura 3.6 b). Después de estos estudios, la pregunta es ¿existe una transición directa entre la fase aislante de Mott y la fase superfluida en presencia de desorden? Para responder la anterior pregunta. Los investigadores Pollet *et al* [92] confirmaron que existe una ausencia de una transición directa de superfluido a aislante de Mott, es decir, una fase de vidrio de Bose siempre debe intervenir en la transición de aislante de Mott a superfluido.

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard (3.51) muestra diferentes fases cuando no existe desorden y cuando está presente en una red óptica, esto está en función del potencial químico  $\mu$  y el tunelamiento J. Cabe señalar que este diagrama de fases se obtuvo a partir de la aproximación de desacoplamiento. Por otra parte las técnicas de simulación cuántica de Monte-Carlo (QMC) son capaces de calcular con el mínimo error el comportamiento de muchos sistemas físicos, tal que en los últimos años se ha usado esta técnica en el Hamiltoniano (3.51) por un gran número de autores, tal es el caso de A.E. Niederle y H. Rieger [93]. Estos autores hacen uso de las técnicas Monte-Carlo cuántico (QMC) y la técnica de campo medio local (LMF) y, teoría estocástica de campo medio para determinar el diagrama de fase en función del desorden  $\Delta/2J$  vs U/J. Dichos diagramas se ilustran en la figura 3.11



Figura 3.11: Diagrama de fase del Hamiltoniano de Bose-Hubbard con desorden, usando las dos técnicas de LMF y QMC, la figura fue obtenida del artículo [93]

Como se ilustra en el diagrama de fases de la figura 3.11 coexisten las tres fases. Estas son superfluido (SF), vidrio de Bose (BG) y aislante de Mott (MI). Dado que en este trabajo se está interesado en encontrar estados localizados en la región superfluida, los valores con los que se tendrá que comparar tienen que estar en el rango donde está la región superfluida, esto es, no se tiene que exceder los valores de interacción más allá de 20(U/J) y del valor del desorden de  $20(\Delta/2J)$ .

## Capítulo 4

# Ecuación de Gross-Pitaevskii para un gas de Bose en una red desordenada en 2D

Existen dos formas de abordar el estudio de las propiedades estacionarias y dinámicas del sistema que se está considerando en el presente trabajo. Una es a través de la aproximación de campo medio y la otra dentro del contexto de muchos cuerpos también conocido como esquema de Bose-Hubbard presentada en el capítulo previo. Dentro del esquema de campo medio, el formalismo más ampliamente usado ha sido el resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii, que describe un gas de Bose débilmente interactuante a temperatura T = 0. Esta aproximación permite tanto una descripción dinámica, como de los estados estacionarios, tanto en gases de Bose de una sola componente, como en gases espinoriales. En este último caso ha sido especialmente exitosa la descripción de efectos no lineales, incluyendo la generación de vórtices y estados turbulentos. En lo que respecta al contexto del tratamiento de muchos cuerpos, es decir, resolver la ecuación de Schrödinger para el modelo extendido de Bose-Hubbard, es muy limitado lo que puede estudiarse de forma efectiva. La razón es que aún en la primera banda, el Hamiltoniano para N partículas confi nadas en *n* pozos da lugar a espacios de Hilbert que escalan como  $\binom{N+n-1}{N}$ . Este problema es numéricamente intratable aun en una dimensión, para  $N > 10^3$  y n > 4. El caso en dos dimensiones, objetivo de la presente tesis es por lo tanto un

n > 4. El caso en dos dimensiones, objetivo de la presente tesis es por lo tanto un reto inaccesible. Por tal motivo, dentro del esquema de Bose Hubbard se requiere, además de la aproximación de la primera banda, trabajar usando otra aproximación para simplificar el tratamiento numérico. Como se explicó antes, puede usarse la llamada aproximación de desacoplamiento. Como se ha explicado en el primer párrafo de este capítulo, nos concentraremos en resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii para el sistema de interés. En este capítulo se presenta una deducción de primeros principios de la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo. Esta ecuación, particularmente la solución del estado estacionario, será precisamente la aproximación que se ultilizará para estudiar y caracterizar la influencia del desorden en condensados de Bose débilmente interactuantes y confinados en redes bidimensionales con varias geometrías. Además, en este capítulo se presentan también las observables a ser analizadas para discernir la influencia del desorden en la generación de estados localizados. La determinación del fenómeno de localización vs. la influencia de la geometría recae en un estudio numérico extenso de diferentes observables que se mecionarán en los siguientes capítulos. Se presenta también en este capítulo las técnicas numéricas y estadísticas empleadas para encontrar el estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii.

### 4.1. Descripción de un condensado de Bose en la aproximación de campo medio

El fenómeno conocido como condensación de Bose-Einstein, y que lleva el nombre de quienes lo reconocieron originalmente en 1925, ocurre en un entorno tridimensional homogéneo, como el resultado de la ocupación macroscópica del estado base de una sola partícula. Como es bien sabido, sistemas homogéneos en dos dimensiones no exhiben dicho estado consistente con su comportamiento estadístico cuántico. A diferencia, los sistemas inhomogéneos en diversas dimensionalidades sí manifiestan la ocurrencia de la condensación de Bose en gases ideales. La observación experimental de dicho fenómeno ocurrrió por primera vez en 1995 en gases atómicos alcalinos. Sin embargo, es importante mencionar que dado que las interacciones intrínsecamente naturales en grandes conglomerados de átomos, aun a bajas densidades están presentes, el fenómeno reportado no es estrictamente la condensación original. De hecho, como consecuencia de las interacciones en el gas, el estado resultante es un superfluido. Matemáticamente el objeto que representa dicho estado es una función de onda  $\Psi(\mathbf{r},t)$  que describe de forma efectiva al "gran átomo", esto es, al conjunto de átomos que ocupan el estado de una sola partícula o condensado de Bose-Einstein. Vale la pena insistir que asociado al hecho que las interacciones entre los átomos no pueden ser ignoradas, la función de onda necesariamente las incorporará en forma efectiva.

Como resultado del hecho que los gases empleados para producir los condensados son muy diluidos, los efectos de interacción significativos se pueden describir como la colisión entre pares de partículas. De hecho las densidades típicas oscilan entre  $10^{15} - 10^{13}$  átomos/cm<sup>3</sup>. Adicionalmente, dado que los átomos se encuentran a muy bajas energías, la interacción se puede modelar por un potencial de contacto, el cual es de la siguiente forma:

$$V_{int} = g_{3D}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_i}). \tag{4.1}$$

50

donde  $g_{3D} = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m}$ . En unas líneas más se da detalle de esta expresión.

Para estudiar la estructura de la nube de átomos que forma el condensado de Bose-Einstein hay que tomar en cuenta la interacción de los N átomos que lo forman, dado que cada átomo siente un potencial adicional debido al campo promedio de los otros átomos que se encuentran alrededor. El potencial de interacción se introduce en la ecuación de Schrödinger y, mediante la aproximación de campo medio, se obtiene una ecuación no lineal que es conocida como la ecuación de Gross-Pitaevskii. En los siguientes párrafos se presentará una deducción de primeros principios de dicha ecuación.

El Hamiltoniano de muchos cuerpos en segunda cuantización, que describe a un gas de N Bosones interactuantes, en un potencial externo  $U_{ext}(\mathbf{r})$  es,

$$H = \int d^3 \mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{ext}(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}'),$$
(4.2)

donde  $\Psi^{\dagger}(\mathbf{r})$  y  $\Psi(\mathbf{r})$  son los operadores de campo de creación y aniquilación, que satisfacen las relaciones de conmutación usuales para bosones [82], m es la masa de los átomos y  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  es el potencial que describe la interacción entre los átomos. Como se mencionó anteriormente, la colisión entre átomos a bajas energías adopta la forma  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_{3D}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , donde  $g_{3D} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ , siendo a la longitud de dispersión de onda s [94].

La ecuación de Heisenberg para el operador de campo  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  es,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\Psi(\mathbf{r}, t), H], \qquad (4.3)$$

donde H es el Hamiltoniano (4.2). Calculando los conmutadores usuales para los operadores de campo de bosones, la ecuación de Heisenberg es,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_{ext}(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{r},t) + g_{3\mathrm{D}}\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t).$$
(4.4)

El operador de campo que aniquila una partícula en la posición  $\mathbf{r}$  al tiempo t,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  se puede expresar en cualquier base completa  $\phi_k(\mathbf{r}, t)$  como,

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_{k=0} \phi_k(\mathbf{r},t) b_k, \qquad (4.5)$$

siendo  $b_k$  el operador de aniquiliación en el estado k. En esta última la expresión la suma sobre estados se puede dividir en dos contribuciones, una asociada al estado base y la otra al resto de estados,

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \phi_0(\mathbf{r},t)b_0 + \sum_{k\neq 0} \phi_k(\mathbf{r},t)b_k.$$
(4.6)

Dado que en un gas de Bose en su fase condensada la temperatura apenas supera una centena de nK, la mayoría de los átomos en el gas se encuentran en su estado base. Ciertamente, no es el estado base de una partícula ideal. Por lo tanto, la base de las funciones de onda denotadas como  $\phi_k(\mathbf{r}, t)$  son estrictamente desconocidas. Sin embargo, sin pérdida de generalidad la expresión para el operador de campo (4.6) puede aproximarse de la siguiente forma:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \phi_0(\mathbf{r},t)b_0. \tag{4.7}$$

Es decir, la suposición más grande es el gas se encuentra a temperatura cero y que por lo tanto todos los átomos se encuentran en el estado base. Por otra parte los operadores de campo  $\Psi(\mathbf{r},t)$  y  $\Psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)$  actuando en un estado de Fock son

$$\Psi(\mathbf{r},t) \mid n_0, n_1 \dots n_\infty \rangle = \phi_0(\mathbf{r},t) b_0 \mid n_0, n_1 \dots n_\infty \rangle, \tag{4.8}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t) \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle = \phi_0(\mathbf{r},t) \sqrt{n_0} \mid n_0 - 1, n_1 ... n_{\infty} \rangle, \tag{4.9}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t)^{\dagger} \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle = \phi_0^*(\mathbf{r},t) b_0^{\dagger} \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle, \qquad (4.10)$$

$$\Psi(\mathbf{r},t)^{\dagger} \mid n_0, n_1...n_{\infty} \rangle = \phi_0^*(\mathbf{r},t)\sqrt{n_0+1} \mid n_0+1, n_1...n_{\infty} \rangle.$$
(4.11)

Pero a  $T \approx 0$  y  $N \rightarrow \infty$  implica que  $n_0 \approx N$  y  $n_0 \pm 1 \approx n_0$ , lo anterior resulta en

$$\Psi(\mathbf{r},t) \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle = \phi_0(\mathbf{r},t) \sqrt{n_0} \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle, \tag{4.12}$$

$$\Psi(\mathbf{r},t)^{\dagger} \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle = \phi_0^*(\mathbf{r},t) \sqrt{n_0} \mid n_0, n_1 ... n_{\infty} \rangle.$$
(4.13)

Sustituyendo las aproximaciones anteriores para los operadores de campo en la ecuación de Heisenberg (4.4),

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)b_0}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_{ext}(\mathbf{r})\right)\phi(\mathbf{r},t)b_0 + g_{3\mathrm{D}}\phi^*(\mathbf{r},t)\phi(\mathbf{r},t)\phi(\mathbf{r},t)b_0^{\dagger}b_0b_0, \quad (4.14)$$

actuando en un estado de Fock, la ecuación resultante queda de la siguiente forma

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_{ext}(\mathbf{r})\right)\phi(\mathbf{r},t) + g_{3\mathrm{D}}N|\phi(\mathbf{r},t)|^2\phi(\mathbf{r},t).$$
(4.15)

Esta última ecuación (4.15) es precisamente la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo. Sin embargo, la ecuación de Gross-Pitaevskii está basada suponer que el gas se encuentra a temperatura cero T = 0 K, la comparación directa entre resultados teóricos y experimentales muestra que en muchos casos las soluciones de la ecuación de Gross-Pitaevskii describe la física esencial tanto a nivel de la dinámica, como de los estados estacionarios de un gas de Bosones ultrafrío, es decir un gas a muy bajas temperaturas, del orden de nK, pero no a temperatura cero. En la práctica, un condensado de Bose-Einstein es un fluido cuántico que se encuentra a temperaturas cercanas al cero absoluto y en el laboratorio es producido empleando de técnica en un espacio de tres dimensiones. El potencial de confinamiento del fluido es tipo oscilador armónico, esto es, el potencial  $U_{ext}(\mathbf{r})$  de la ecuación (4.15) tiene la forma,

$$U_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right),$$
(4.16)

donde  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  y  $\omega_z$  son las frecuencias de confinamiento en cada dirección.

Si se considera que el gas de Bosones está confinado en una trampa anisotrópica, esto es,  $\omega_z \gg \omega_r$ , donde  $\omega_r = \omega_x = \omega_y$  la ecuación de Gross-Pitaevskii (4.15) resultante es,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{3D}(x, y, z, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\left(\omega_r^2 \left(x^2 + y^2\right) + \omega_z z^2\right) + g_{3D}|\psi_{3D}(x, y, z, t)|^2\right)\psi_{3D}(x, y, z, t)$$
(4.17)

donde  $g_{3D} \to \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} N$ .

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{3\mathrm{D}}(x,y,z,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\left(\omega_r^2 r_\perp^2 + \omega_z z^2\right) + g_{3\mathrm{D}}|\psi_{3\mathrm{D}}(x,y,z,t)|^2\right)\psi_{3\mathrm{D}}(x,y,z,t)$$
(4.18)

La alta anisotrópia de la trampa tiene importantes consecuencias sobre la dinámica del gas de Bose que en estas condiciones se rigé por dos escalas de tiempo muy diferentes. La escala de tiempo relevante en el plano transversal  $r_{\perp} = (x, y)$  es muy grande en comparación con la escala de tiempo en el eje axial (z). Lo anterior aunado a que las partículas se mantienen prácticamente "quietas" a lo largo del eje z debido a que la extensión espacial de la función de onda en esa dirección es bastante pequeña, esto implica que la dinámica esta confinada en el plano  $r_{\perp}$ .

Por lo anterior, la función de onda del condensado puede ser factorizada de la siguiente manera

$$\psi_{3\rm D}(x, y, z, t) = \psi_{2\rm D}(r_{\perp}, t)\phi_{1\rm D}^{\rm Ho}(z), \qquad (4.19)$$

donde  $\phi_{1D}^{\text{Ho}}(z)$  es la función de onda correspondiente al estado base del oscilador armónico caracterizado con la frecuencia  $\omega_z$ .

Procedemos a aplicar el método de separación de variables para resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii. Sustituyendo se tiene

$$\begin{split} \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)i\hbar \frac{\partial \psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}{\partial t} &= -\frac{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}{2m}\hbar \nabla_{\perp}^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t) - \psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dz^{2}}\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) \\ &+ \frac{m}{2}\omega_{z}^{2}z^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) + \frac{m}{2}\omega_{r}^{2}r^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) \\ &+ g_{3\mathrm{D}} \mid \psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\mid^{2} \mid \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)\mid^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z), \end{split}$$

### 4.1. Descripción de un condensado de Bose

en la aproximación de campo medio

donde  $\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ . Dividiendo por  $\psi_{2D}(r_{\perp}, t)\phi_{1D}^{Ho}(z)$  y reordenando términos,

$$\frac{1}{\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}i\hbar\frac{\partial\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}{\partial t} = -\frac{1}{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dz^{2}}\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) + \frac{1}{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}\frac{m}{2}\omega_{z}^{2}z^{2}\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) 
- \frac{1}{\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}\frac{\hbar}{2m}\nabla_{\perp}^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t) + \frac{1}{\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}\frac{m}{2}\omega_{r}^{2}r^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t) 
+ \frac{g_{3\mathrm{D}}}{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}|\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)|^{2}|\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)|^{2}\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z).$$
(4.20)

Procedemos a introducir el término de separación  $\mu(r)$ , tal que la función de onda a lo largo del eje z satiface:

$$-\frac{1}{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) + \frac{1}{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}\frac{m}{2}\omega_z^2 z^2 \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) + \frac{g_{3\mathrm{D}}}{\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)} \mid \psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\mid^2 \mid \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)\mid^2 \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) = \mu(r)$$

$$(4.21)$$

que da lugar a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{m}{2}\omega_z^2 z^2 + g_{3\mathrm{D}} \mid \psi_{2\mathrm{D}}(r_\perp, t) \mid^2 \mid \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) \mid^2\right)\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) = \mu(r)\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z), \quad (4.22)$$

esto es, una ecuación para la función de onda  $\phi_{1D}^{\text{Ho}}(z)$  que corresponde a una ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii en el eje z con un potencial químico  $\mu(r)$  local.

Ahora sustituyendo el valor de la ecuación (4.22) en (4.20) se tiene lo siguiente

$$\frac{1}{\psi_{2D}(r_{\perp},t)}i\hbar\frac{\partial\psi_{2D}(r_{\perp},t)}{\partial t} = \mu(r) - \frac{1}{\psi_{2D}(r_{\perp},t)}\frac{\hbar}{2m}\nabla_{\perp}^{2}\psi_{2D}(r_{\perp},t) + \frac{1}{\psi_{2D}(r_{\perp},t)}\frac{m}{2}\omega_{r}^{2}r^{2}\psi_{2D}(r_{\perp},t)$$
(4.23)

que se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla_{\perp}^2 + \frac{m}{2}\omega_r^2 r^2 + \mu(r)\right)\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t).$$
(4.24)

Por otro lado en la parte cinética y del potencial de la ecuación (4.22), sustituimos los valores de las funciones  $\phi_{1D}^{\text{Ho}}(z)$  que corresponden a las funciones de onda del oscilador armónico, esto es,

$$\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) = \left(\frac{1}{\pi l_z^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{z^2}{2l_z}},\tag{4.25}$$

donde  $l_z$  es la longitud natural del oscilador armónico. <sup>1</sup> Realizando las operaciones correspondientes para el eje z el resultado es,

 $\mathbf{54}$ 

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> donde  $l_z^2 = \frac{\hbar}{m\omega_z}$ 

### Ecuación de Gross-Pitaevskii para un gas de Bose en una red desordenada en 2D

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z)}{dz^2} + \frac{m}{2}\omega_z^2 z^2\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) = \frac{h\omega_z}{2}\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z), \qquad (4.26)$$

sustituyendo los nuevos valores de la ecuación (4.26) en (4.22) se tiene lo siguiente

$$\left(\frac{\hbar\omega_z}{2} + g_{3\mathrm{D}} \mid \psi_{2\mathrm{D}}(r_\perp, t) \mid^2 \mid \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) \mid^2 \right) \phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z) = \mu(r)\phi_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{Ho}}(z), \qquad (4.27)$$

ahora integrando la ecuación (4.27) sobre z se encuentra que el potencial químico local es

$$\mu(r) = \frac{\hbar\omega_z}{2} + g_{3\mathrm{D}} \mid \psi_{2\mathrm{D}}(r_\perp, t) \mid^2 \frac{1}{\sqrt{3\pi}l_z}.$$
(4.28)

Finalmente se sustituye el valor del potencial químico encontrado en la ecuación (4.24), lo que resulta en

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla_{\perp}^{2} + \frac{m}{2}\omega_{r}^{2}r^{2} + \frac{\hbar\omega_{z}}{2} + \frac{g_{3\mathrm{D}}\mid\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)\mid^{2}}{\sqrt{3\pi}l_{z}}\right)\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t).$$
(4.29)

La ecuación (4.29) describe la dinámica de un gas de Bose débilmente interactuante en el plano (x, y) con un confinamiento de potencial de oscilador armónico.

Generalizando la ecuación anterior para cualquier potencial en dos dimensiones, se tiene la siguiente expresión

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2\rm D}(r_{\perp},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 \psi_{2\rm D}(r_{\perp},t) + \left(V(x,y) + g_{2\rm D}|\psi_{2\rm D}(r_{\perp},t)|^2\right) \psi_{2\rm D}(r_{\perp},t), \quad (4.30)$$

donde  $g_{2D} = \frac{g_{3D}}{\sqrt{3\pi l_z}}$  es la interacción efectiva de acoplamiento. Del análisis anterior concluimos que al restringir el movimiento de los átomos ya sea en dos dimensiones o incluso en una dimensión [95, 96, 97, 98, 99], el coeficiente de interacción  $g_{3D}$  debe escalarse teniendo en cuenta las dimensiones características del sistema.

Como se ha mencionado en capítulos anteriores se ha emulado el fenómeno de localización de Anderson con gases ultrafríos tanto en una dimensión como en tres dimensiones quedando excluido el caso en dos dimensiones. A continuación utilizaremos la ecuación de Gross-Pitaevskii para estudiar la localización de Anderson en un gas de Bose en dos dimensiones.

#### Ecuación adimensional de Gross-Pitaevskii 4.2.

Una vez obtenida la ecuación de Gross-Pitaevskii en dos dimensiones con su respectiva constante de interacción efectiva  $g_{2D}$ , la propuesta de este trabajo es resolver está ecuación con diferentes geometrías de red desordenadas. En las siguientes secciones se presenta el método para obtener la ecuación de Gross-Pitaevskii en forma adimensional y el método numérico para encontrar las soluciones de estado estacionario.

Sea una energía dada en términos de la constante de reda, esto es,

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{ma^2},\tag{4.31}$$

si la ecuación (4.30) es dividida por  $\varepsilon$  se tiene lo siguiente

$$\frac{i\hbar}{\varepsilon}\frac{\partial\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon}\nabla_{\perp}^2\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t) + \left(\frac{V(x,y)}{\varepsilon} + \frac{g_{2\mathrm{D}}}{\varepsilon}|\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)|^2\right)\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t),$$
(4.32)

simplificando la expresión, se tiene

$$\frac{i\hbar}{\varepsilon}\frac{\partial\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}a^{2}\nabla_{\perp}^{2}\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t) + \left(\frac{V(x,y)}{\varepsilon} + \frac{g_{2\mathrm{D}}}{\varepsilon}|\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t)|^{2}\right)\psi_{2\mathrm{D}}(r_{\perp},t).$$
(4.33)

Para la parte temporal de la ecuación anterior se tiene que  $\hbar/\varepsilon \equiv \tau$  (nuevo tiempo). Sean las coordenadas adimensionales identificadas de la siguiente manera,

tiempo, 
$$t = \tilde{t}\tau$$
 distacia,  $x = \tilde{x}a$ , (4.34)

transformando las derivadas temporal y espacial de la ecuación de Gross-Pitaevskii,

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{t}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} = \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \qquad \qquad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{x}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \qquad \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{a^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}^2}, \tag{4.35}$$

sustituyendo estas definiciones y tomando las coordenadas adimensionales y la función de onda normalizada a 1, se tiene la ecuación de Gross-Pitaevskii es de la siguiente forma  $\psi_{2D}(\tilde{r_{\perp}}, \tilde{t})$ 

$$i\frac{\partial\psi_{\rm 2D}(\tilde{r_{\perp}},\tilde{t})}{\partial\tilde{t}} = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla_{\perp}^2}\tilde{\psi_{\rm 2D}}(\tilde{r_{\perp}},\tilde{t}) + \left(\tilde{v}(x,y) + \tilde{g_{\rm 2D}}|\tilde{\psi_{\rm 2D}}(\tilde{r_{\perp}},\tilde{t})|^2\right)\tilde{\psi_{\rm 2D}}(\tilde{r_{\perp}},\tilde{t}), \quad (4.36)$$

donde  $\tilde{g}_{2D} = \frac{g_{2D}}{\varepsilon}$  es la nueva interacción de los átomos en términos de la energía  $\varepsilon$  y la constante de red, mientras que  $\tilde{v}(x, y) = \frac{V(x, y)}{\varepsilon}$  es el potencial de confinamiento adimensional.

A continuación se describe el método numérico utilizado para el cálculo de los estados estacionarios y los perfiles de densidad de la ecuación de Gross-Pitaevskii (4.36).

### 4.3. Método Split-Step Crank-Nicholson

Usando el método Split-Step Crank-Nicholson [100] es posible encontrar las soluciones estacionarias de la ecuación de Gross-Pitaevskii en una y dos dimensiones. Por simplicidad se iniciará describiendo el método en una dimensión, posteriormente se extrapolará a dos dimensiones.

La ecuación (4.36) en una sola dimensión (x) puede ser separada en dos partes (split-step). La primera parte contiene el potencial de confinamiento y la parte de las interacciones, la segunda parte, corresponde a la segunda derivada de la posición, dando lugar a los siguientes operadores

$$\left(\tilde{v(x)} + \tilde{g_{2D}} \mid \psi(x,t) \mid^2\right) \psi(x,t) \equiv H_1 \psi(x,t), \qquad (4.37)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \equiv H_2\psi(x,t). \tag{4.38}$$

Se procede a evolucionar una función de onda inicial con el operador  $H_1$  y  $\psi(x; t_0)$  dando como resultado

$$\psi(x,t) = \exp(-iH_1t)\psi(0).$$
(4.39)

Para proceder numéricamente, la ecuación anterior se discretiza en el tiempo, esto es, la variable temporal es de la forma  $t_n = n\Delta$ , donde  $\Delta$  es el paso temporal, etiquetando a las funciones de onda como  $\psi^n$  correspondientes al tiempo  $t_n$ . Para propagar al siguiente instante de tiempo, esto es,  $t = t_0 + \Delta$ , y sus correspondientes funciones de onda las etiquetaremos como  $\psi^{n+1/2}$ . Entonces la discretización (4.39), que corresponde a una solución que llamaremos intermedia, es la siguiente

$$\psi^{n+1/2} = \exp(-i\Delta H_1)\psi^n.$$
(4.40)

La solución intermedia es usada como valor inicial para proceder con la segunda parte de la propagación con el operador  $H_2$  de la ecuación (4.38). Para la propagación temporal correspondiente al operador  $H_2$ , se discretiza la ecuación (4.38) y usando el método de Crank-Nicholson se obtienen numéricamente las soluciones en términos de la ecuación (4.40), esto es,

$$\frac{\psi^{n+1} - \psi^{n+1/2}}{-i\Delta} = \frac{1}{2}H_2(\psi^{n+1} + \psi^{n+1/2}).$$
(4.41)

La solución de la ecuación (4.41) corresponde a la incógnita  $\psi^{n+1}$ 

$$\psi^{n+1} = \frac{1 - i\Delta H_2/2}{1 + i\Delta H_2/2} \psi^{n+1/2}, \qquad (4.42)$$

la cual combinamos con la ecuación (4.40) y se tiene la solución para  $\psi^{n+1}$ 

$$\psi^{n+1} = \frac{1 - i\Delta H_2/2}{1 + i\Delta H_2/2} \exp(-i\Delta H_1)\psi^n, \qquad (4.43)$$

donde  $\psi^{n+1}$  es la solución correspondiente al siguiente paso temporal, esto es,  $t_{n+1} = (n+1)\Delta$ . Todas las iteracciones conservan la normalización de la función de onda y el error involucrado en el desdoblamiento del Hamiltoniano es proporcional a  $\Delta^2$ .

Describamos explícitamente el algorítmo de Crank-Nicholson para la ecuación de Gross-Pitaevskii mapeada en una malla espacial de tamaño N correspondiente a una red en una dimensión, esto es, discretizando la parte temporal y espacial de la ecuación (4.38) se tiene

$$i\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^{n+1/2}}{\Delta} = -\frac{1}{2h^2} [(\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i+1}^{n-1}) +$$
(4.44)

$$(\psi_{i+1}^{n+1/2} - 2\psi_i^{n+1/2} + \psi_{i-1}^{n+1/2})], \qquad (4.45)$$

donde la notación de indices significa  $\psi_i^n = (x_i, t_n)$ , h son los pasos espaciales. Se usó la aproximación de diferencias finitas para la derivada temporal. De las ecuaciones anteriores uno se da cuenta de que se tiene un conjunto de ecuaciones con incógnitas  $\psi_{i+1}^{n+1}$ ,  $\psi_i^{n+1}$ ,  $\psi_{i-1}^{n+1}$ ; resolviendo para las incógnitas  $\psi^{n+1}$  se tiene

$$\psi_i^{n+1} - \frac{i\Delta}{2h^2} [(\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i+1}^{n-1})] = b_i, \qquad (4.46)$$

donde

$$b_{i} = \frac{i\Delta}{2h^{2}} (\psi_{i+1}^{n+1/2} - 2\psi_{i}^{n+1/2} + \psi_{i-1}^{n+1/2}) + \psi_{i}^{n+1/2}, \qquad (4.47)$$

se tiene un sistema tridiagonal de ecuaciones, son escritos explícitamente

$$A^{-}\psi_{i-1}^{n+1} + A_{i}^{0}\psi_{i}^{n+1} + A_{i}^{+}\psi_{i+1}^{n+1} = b_{i}, \qquad (4.48)$$

donde  $A_i^- = A_i^+ = -\frac{i\Delta}{2h^2} A_i^0 = 1 + \frac{i\Delta}{h^2}$  de la ecuación (4.48) las cantidades desconocidas son de la forma  $\psi_{i\pm 1}^{n+1}$  y  $\psi_i^{n+1}$ . Para resolver la ecuación (4.48) se toma en cuenta una relación de recursión que es de la siguiente forma,

$$\psi_{i+1}^{n+1} = \alpha_i \psi_i^{n+1} + \beta_i, \tag{4.49}$$

donde  $\alpha_i$  y  $\beta_i$  son coeficientes por determinar. Ahora si sustituimos (4.49) en (4.48) y se resuelve para  $\psi_i^{n+1}$  se tiene

$$\psi_i^{n+1} = \frac{1}{A_i^0 + A_i^+ \alpha_i} (b_i - A_i^- \psi_{i-1}^{n+1} - A_i^+ \beta_i).$$
(4.50)

Reescribiendo la ecuación anterior

$$\psi_i^{n+1} = \gamma_i (A_i^- \psi_{i-1}^{n+1} + A_i^+ \beta_i - b_i), \qquad (4.51)$$

donde  $\gamma_i = -1/(A_i^0 + A_i^+ \alpha_i)$ , se obtienen las relaciones de recursión y se tiene  $\alpha_{i-1} = \gamma_i A_i^-$  y  $\beta_{i-1} = \gamma_i (A_i^+ \beta_i - b_i)$ . Los valores iniciales elegidos son  $\alpha_{N-1} = 0$  y  $\beta_{N-1} = \psi_i^{n+1}$ . Después de determinar los coeficientes  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  y  $\gamma_i$  se usa la relación de recursión

$$\psi_{i+1}^{n+1} = \alpha_i \psi_i^{n+1} + \beta_i, \tag{4.52}$$

de i = 0 hasta N - 1 que corresponde al tamaño de la malla. De esta forma se encuentran las soluciones a la ecuación de Gross-Pitaevskii.

Para dos dimensiones se procede análogamente al caso en una dimensión. La ecuación (4.36) es separada en tres partes, donde  $H = H_1 + H_2 + H_3$  esto es

$$H_1 = v(x, y) + \tilde{g}_{2D} | \psi_{2D}(x, y, t) |^2, \qquad (4.53)$$

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2},\tag{4.54}$$

$$H_3 = -\frac{\partial^2}{\partial y^2}.\tag{4.55}$$

Adoptando el mismo procedimiento, la propagación temporal se determina usando las contribuciones  $H_1, H_2$  y  $H_3$ . La propagación temporal sobre  $H_1$  es dada por

$$\psi^{n+1/2} = \exp(-i\Delta H_1)\psi^n, \qquad (4.56)$$

entonces tenemos

$$i\frac{\partial\psi(x,y,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x,y,t)}{\partial x^2} \equiv H_2\psi(x,y,t), \qquad (4.57)$$

$$i\frac{\partial\psi(x,y,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x,y,t)}{\partial y^2} \equiv H_3\psi(x,y,t), \qquad (4.58)$$

extendiendo el mismo tratamiento que se efectuó para una dimensión, ahora tenemos que la función de onda es discretizada de la forma,  $\psi_{j,p}^n \equiv \psi(x_j, y_p, t_n)$  donde  $y = y_p = ph$ , con  $p = 1, 2...N_y$ ,  $x = x_j = jh$ ,  $j = 1, 2...N_x$ , siendo h el paso espacial.  $\psi_{j,p}^n$ se refiere a fijar  $x_j = jh$  para todo  $y_p = ph$ . Usando las soluciones obtenidas después de una iteracción x como entrada, la discretización de ecuaciones tridiagonales a lo largo de la dirección y para la constante x son resueltas simultáneamente

$$i\frac{\partial\psi(x,y,t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y,t).$$
(4.59)

 $\mathbf{59}$
Usando el método de Crank-Nicholson discretizamos las derivadas

$$i\frac{\psi_{j,p}^{n+1} - \psi_{j,p}^{n+1/2}}{\Delta} = -\frac{1}{2h^2} [(\psi_{j+1,p}^{n+1} - 2\psi_{j,p}^{n+1} + \psi_{j-1,p}^{n-1}) +$$
(4.60)

$$(\psi_{j+1,p}^{n+1/2} - 2\psi_{i,p}^{n+1/2} + \psi_{i-1,p}^{n+1/2})], \qquad (4.61)$$

$$-\frac{1}{2h^2}\left[\left(\psi_{j,p+1}^{n+1} - 2\psi_{j,p}^{n+1} + \psi_{j,p-1}^{n-1}\right) +$$
(4.62)

$$(\psi_{j,p+1}^{n+1/2} - 2\psi_{j,p}^{n+1/2} + \psi_{j,p-1}^{n+1/2})].$$
(4.63)

Ahora trabajando por separado primero en el espacio x tenemos

$$i\frac{\psi_{j,p}^{n+1} - \psi_{j,p}^{n+1/2}}{\Delta} = -\frac{1}{2h^2} [(\psi_{j+1,p}^{n+1} - 2\psi_{j,p}^{n+1} + \psi_{j-1,p}^{n-1}) +$$
(4.64)

$$(\psi_{j+1,p}^{n+1/2} - 2\psi_{i,p}^{n+1/2} + \psi_{i-1,p}^{n+1/2})].$$
(4.65)

Se observa que aparecen las mismas ecuaciones que en una dimensión, esto es, un conjunto de ecuaciones con incógnitas  $\psi_{j+1,p}^{n+1}, \psi_{j,p}^{n+1}, \psi_{j-1,p}^{n+1}$  en el tiempo  $t_{n+1}$ . Se puede notar que solamente cambia la dimensión, esto es, anteriormente era una malla lineal, ahora corresponde a una malla cuadrada, entonces se tienen las mismas ecuaciones que resolver pero para diferentes mallas. Se procede de la misma manera que para una dimensión, pero ahora difieren en que se tienen las mismas ecuaciones tanto para x como para y, y ambas son independientes, esto es, cada una depende sólo de la dimensión ya sea x o y.

Para encontrar el estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii, se utiliza el método de tiempo imaginario [101, 102, 103], el cual consiste en remplazar el tiempo t por una cantidad imaginaria, esto es,  $t = -i\tau$  donde  $\tau$  es sólo un parámetro. Por sencillez, tomando como ejemplo la ecuación en una dimensión, la ecuación (4.36) ahora es de la forma

$$-\frac{\partial\psi(x;\tau)}{\partial\tau} = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{v(x)} + \tilde{g_{2D}} \mid \psi(x,\tau) \mid^2\right]\psi(x,\tau) \equiv H\psi(x,\tau).$$
(4.66)

De la ecuación anterior se puede ver que un eigenestado  $\psi_i$  de eigenvalor  $E_i$  de *H* satisface la ecuación  $H\psi_i = E_i\psi_i$ , se comporta bajo la propagación de tiempo imaginario como

$$\frac{\partial \psi_i(\tau)}{\partial \tau} = -E_i \psi_i(\tau), \qquad (4.67)$$

la solución a la ecuación anterior muestra que todas las eigenfunciones decaerán exponencialmente con el tiempo, esto es,

$$\psi_i(\tau) = \exp(-E_i\tau)\psi_i(0). \tag{4.68}$$

Consecuentemente, después de un intervalo de tiempo, únicamente el estado estacionario sobrevivirá, mientras que el resto estarán decayendo con el tiempo durante la propagación de tiempo imaginario.

### 4.3.1. Energía del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii

Como las partículas son bosones, la función de onda tiene que ser un producto simetrizado de la función de onda de una partícula. En el estado condensado en 3D todos los bosones están en el mismo estado de una partícula, se puede escribir la función de onda del sistema de N patículas de la siguiente forma

$$\Psi(r_1, r_2...r_N) = \prod_{i=1}^N \phi(r_i), \qquad (4.69)$$

61

donde la función de onda de una partícula  $\phi(r_i)$  se encuentra normalizada. Calculando el valor esperado del Hamiltoniano (4.2), esto es,

$$< H >= \int d^{3N} r \left[ \prod_{i=1}^{N} \phi^{*}(r_{i}) \sum_{i=1}^{N} \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + V_{ext}(r_{i}) \right] \prod_{i=1}^{N} \phi(r_{i}) + \frac{g_{3D}}{2} \int d^{3N} r \left[ \prod_{i=1}^{N} \phi^{*}(r_{i}) \sum_{j \neq i} \delta(r_{j} - r_{i}) \prod_{i=1}^{N} \phi(r_{i}) \right].$$
(4.70)

Desarrollando los términos y usando la ortonormalidad de las funciones de onda  $\phi(r_i)$  se obtiene la siguiente expresión

$$< H >= N \int d^{3}r \phi^{*}(r,t) \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + V_{ext}(r) \right] \phi(r,t) + \frac{g_{3D}N(N-1)}{2} \int d^{3}r \mid \phi(r,t) \mid^{4}$$

$$(4.71)$$

Dado que el número de partículas es muy grande  $N \gg 1$ ,  $N-1 \approx N$  y si renombramos  $\Psi = \sqrt{N}\phi$  se obtiene la expresión para la energía

$$E(t) = \int d^3 r \Psi^*(r,t) \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) \right] \Psi(r,t) + \frac{g_{3D}}{2} \int d^3 r \mid \psi(r,t) \mid^4 .$$
(4.72)

Se calculará la energía en dos dimensiones usando la transformación de Madelung [5], en la cual la función de onda se transforma de la siguiente manera

$$\Psi(r,t) = \sqrt{\rho(r,t)} \exp(i\phi(t)). \tag{4.73}$$

Asi, sustituyendo la ecuación (4.73) en la ecuación (4.72) se tiene la siguiente ecuación para la energía

$$E(t) = \int d^2 r \sqrt{\rho(r,t)} \left( -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \sqrt{\rho(r,t)} \right) + \int d^2 r \rho(r,t) V_{ext}(r) + \frac{g_{2D}}{2} \int d^2 r \rho^2(r,t),$$
(4.74)

usando la siguiente identidad

$$f\nabla^2 g = \nabla \cdot (f\nabla g) - \nabla f \cdot \nabla g, \qquad (4.75)$$

reescribimos a la energía

$$E(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^2 r \nabla \cdot \left(\sqrt{\rho(r,t)} \nabla \sqrt{\rho(r,t)}\right) - \int d^2 r \nabla \sqrt{\rho(r,t)} \cdot \nabla \sqrt{\rho(r,t)}. \quad (4.76)$$

Usando el teorema de la divergencia en dos dimensiones, el cual es de la siguiente forma

$$\int_{s} d^{2}r \nabla \cdot \left(\sqrt{\rho(r,t)} \nabla \rho(r,t)\right) = \oint_{\varsigma} dr \cdot \left(\sqrt{\rho(r,t)} \nabla \rho(r,t)\right), \quad (4.77)$$

pero esta integral vale cero pues la densidad es cero sobre el circuito $\varsigma,$ entonces la energía es de la forma

$$E(t) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \int d^2 r \nabla \sqrt{\rho(r,t)} \cdot \nabla \sqrt{\rho(r,t)} \right) + \int d^2 r \rho(r,t) V_{ext} + \frac{g_{2D}}{2} \int d^2 r \rho^2(r,t).$$
(4.78)

Por comodidad reescribiremos a la energía de la siguiente manera

$$E(t) = \int d^2 r \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{m}}\right)^2 \nabla \rho(r, t) \cdot \nabla \rho(r, t) + |\sqrt{V_{ext}(r)}\rho(r, t)|^2 + \frac{1}{2} |\sqrt{g_{2D}}|\rho(r, t)|^2|^2),$$
(4.79)

$$E(t) = \frac{1}{2} \int d^2r \mid \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \nabla \rho(r,t) \mid^2 + \int d^2r \mid \sqrt{V_{ext}(r)} \rho(r,t) \mid^2 + \frac{1}{2} \int d^2r \mid \sqrt{g_{2D}} \rho^2(r,t) \mid^2,$$
(4.80)

para realizar el análisis espectral, se procederá a utilizar el teorema de Parseval que dice lo siguiente

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2r \mid f(r) \mid^2 = \int d^2k \mid f(k) \mid^2, \tag{4.81}$$

donde f(k) es la transformada de Fourier de f(r). Si ahora si se escribe la energía como función de la magnitud del número de onda k y aplicando el teorema de Parseval a cada miembro de la ecuación de la energía se tienen las siguientes ecuaciones

$$\int d^2r \mid \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \nabla \rho(r,t) \mid^2 = \int d^2k \mid (\int \exp(ikr) \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \nabla \rho(r,t) d^2r) \mid^2,$$
(4.82a)

$$\int d^2r \mid \sqrt{V_{ext}(r)}\rho(r,t) \mid^2 = \int d^2k \mid \int \exp(ikr)\sqrt{V_{ext}(r)}\rho(r,t)d^2r \mid^2,$$
(4.82b)

$$\int d^2r \mid \sqrt{g_{2D}} \mid \rho(r,t) \mid^2 \mid^2 = \int d^2k \mid \int \exp(ikr)\sqrt{g_{2D}} \mid \rho(r,t) \mid^2 d^2r \mid^2.$$
(4.82c)

La energía en función del vector de onda es

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_{kc}(k) + \varepsilon_v(k) + \varepsilon_g(k), \qquad (4.83)$$

donde

$$\varepsilon_{kc}(k) = \frac{1}{2} \left| \int d^2 r \exp(ikr) \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \nabla \rho(r, t) \right|^2, \tag{4.84a}$$

$$\varepsilon_v(k) = \left| \int d^2 r \exp(ikr) \sqrt{V_{ext}(r)} \rho(r,t) \right|^2, \tag{4.84b}$$

$$\varepsilon_g(k) = \frac{1}{2} \left| \int d^2 r \exp(ikr) \sqrt{g_{2D}} \left| \rho(r,t) \right|^2 \right|^2.$$
 (4.84c)

Más adelante se utilizarán estas ecuaciones para determinar la energía en el espacio de Fourier para un gas de bosones confinados en un potencial bidimensional con desorden.

## Capítulo 5

# Estados estacionarios de un condensado de Bose en una red desordenada en 2D

Los capítulos anteriores proveen la base del análisis de los estados localizados como función del desorden, los cuales constituyen el resultado principal de este trabajo. En este capítulo se presentará la investigación en torno al estudio de las propiedades estacionarias de bosones confinados en diferentes geometrías de redes ópticas finitas, con desorden en dos dimensiones. En otras palabras se mostrarán los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii (4.36) para diferentes geometrías. El objetivo que se persigue es, por medio de cálculos numéricos y simulaciones, determinar las propiedades físicas descritas en los capítulos anteriores, esto es, determinar las propiedades de localización para diferentes geometrías de redes ópticas en dos dimensiones con desorden, y mostrar si este tipo de localización podría ser semejante a la bien conocida localización de Anderson [4] para redes finitas bidimensionales.

Sin importar el origen del desorden al que los átomos del condensado están sujetos, es decir redes desordenadas, ya sean creadas por las técnicas de *speckle*, redes bicromáticas, o mezclas de diferentes bosones. Lo que se hará en este trabajo es utilizar un desorden no correlacionado como se detalla en las siguientes secciones. Vale la pena enfatizar que potenciales como los que aquí se consideran han sido reportados experimentalmente [26, 30, 104, 105].

### 5.1. Estados estacionarios en dos dimensiones

El problema principal de este trabajo es describir los efectos del desorden con diferentes geometrías de confinamiento en redes ópticas de dos dimensiones con un gas de Bosones débilmente interactuante. En la práctica, la ecuación a resolver es,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\perp}^2\psi(x,y,t) + \left(V(x,y) + g_{2\mathrm{D}}|\psi(x,y,t)|^2\right)\psi(x,y,t), \quad (5.1)$$

donde V(x, y) es el potencial de confinamiento, que en este caso corresponde a la red óptica. La expresión para el potencial V(x, y) contiene no solamente la geometría explícita de cada red, sino también la forma matemática que define el desorden.

El objetivo principal de este trabajo es tratar de responder las siguientes preguntas. ¿Existe el fenómeno de localización de Anderson en redes bidimensionales finitas ?; y, ¿Cómo afecta la geometría y el desorden en la conducción de los átomos en redes bidimensionales finitas?, esto en el régimen de fase superfluido. Para poder responder a estás preguntas se hará uso de la ecuación de Gross-Pitaevskii [106, 107] aplicada al estudio de redes ópticas con desorden.

En los capítulos anteriores se describe cómo confinar un gas de Bosones en diferentes geometrías de redes ópticas en el laboratorio, así como las técnicas experimentales para generar desorden en átomos ultrafríos. En este capítulo se estudiarán tres tipos diferentes de redes ópticas periódicas, que son red cuadrada con número de coordinación z = 4, red triangular con número de coordinación z = 6 y red hexagonal con número de coordinación z = 3.

Los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii (4.36) se encuentran por medio de la técnica de evolución de tiempo imaginario  $(t \rightarrow i\tau)$ . Esto es equivalente a encontrar la solución de menor energía o la solución del estado estacionario  $\psi \to \psi_0$ . Una vez obtenida la amplitud de la función de onda  $\psi(x, y)$ , se está interesado en análizar los perfiles de densidad  $\rho(x,y) = |\psi(x,y)|^2$ . Primeramente se realizará el cálculo para encontrar los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para los tres potenciales de atrapamiento sin desorden, que ya se han mencionado con anterioridad, estos son, potencial red cuadrada, red triangular y red hexagonal. Una vez obtenidas las soluciones estacionarias y los perfiles de densidad para el caso de potenciales de red sin desorden. Introduciremos un término de desorden en las amplitudes del potencial que forman a las redes ópticas con diferente número de coordinación, esto es el motivo principal de estudio de esta tesis. Se investigará si existe la localización de Anderson para estas geometrías de potencial; seguidamente se hará un análisis del escalamiento del sistema. Posteriormente se estudiarán los estados estacionarios y perfiles de densidad en presencia de un potencial oscilador armónico superpuesto al potencial de red óptica con desorden. En los experimentos recientes han logrado implementar esta combinación de potenciales en dos dimensiones [26] y se ha logrado demostrar la existencia de localización de muchos cuerpos en dos dimensiones para átomos ultrafríos.

#### 5.1.1. Valores numéricos

Los átomos confinados en una red óptica se encuentran a una temperatura cercana al cero absoluto, esto implica que las energías de estos átomos son muy bajas, por lo tanto, es natural tomar la banda de energía más baja para encontrar el Hamiltoniano de de Bose-Hubbard [86]. Este Hamiltoniano contiene dos parámetros importantes, el primero es la energía de interacción de las partículas que se encuentran en el mismo sitio de red, esto es, U y es dada por la ecuación (3.33). El segundo parámetro es la energía de tunelamiento que tienen los átomos entre los sitios vecinos que forman a la red óptica y, es denotada por J, su expresión matemática es dada por la ecuación (3.32). Sin embargo, la energía de tunelamiento depende de la dimensionalidad del sistema, esto es, esta energía es diferente cuando los átomos se encuentran en un potencial de red cuadrada (3.48), que en una red triangular o hexagonal (3.49). Al resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii, se consideraron parámetros típicos en experimentos de átomos ultrafríos de <sup>87</sup>Rb confinados en redes ópticas en dos dimensiones [26], donde la profundidad total de la red óptica fue  $V_0 \approx 12E_R$ . El valor del parámetro de la interacción  $g_{2D}$  que se eligió para resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii fue  $g_{2D} = 0.01 \frac{\hbar^2}{m}$ .

Una vez fijado el valor de la interacción  $g_{2D}$  y la profundidad  $V_0$  de los potenciales, se quiere demostrar que estos valores están en una fase superfluida para cada red óptica. Esto es muy importante dada que la ecuación de Gross-Pitaevskii es válida sólo para describir fases superfluidas. Como es bien sabido, el parámetro apropiado que indica si estamos en una fase aislante de Mott o en una fase superfluida es el cociente de J/U. Ahora calculamos los valores numéricos de la energía de interacción  $U/E_R$  (3.44) con el valor de  $g_{2D}$  y la profundidad total de la red  $V_0 = 12E_R$ , esto es,

$$\frac{U^{2D}}{E_R} = \frac{g_{2D} \frac{\pi}{2a^2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}}{E_R}$$

$$= \frac{0.01 \frac{\hbar^2}{m} \frac{\pi}{2a^2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}}{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}}$$

$$= \frac{0.01}{\pi} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}$$

$$= \frac{0.01}{\pi} \sqrt{12}$$

$$\frac{U^{2D}}{E_R} = 0.0110266.$$
(5.3)

La ecuación (5.3) corresponde al valor numérico de la interacción que tienen las partículas en el sitio con los parámetros correspondientes de la profundidad de la red y el valor de la interacción que toma la ecuación de Gross-Pitaevskii.

Procediendo de la misma manera, ahora sustituyamos los valores numéricos en la ecuación (3.48) que corresponde a la energía de tunelamiento que tienen las partículas entre los sitios cuando están en una red cuadrada, esto es,

$$\frac{J}{E_R} = 2\sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right),$$

$$= 2\sqrt{12} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}\sqrt{12}\right),$$

$$\frac{J}{E_R} = 0.00134451.$$
(5.5)

El valor numérico de la ecuación (5.5) corresponde a la energía de tunelamiento cuando la red tiene una profundidad de  $V_0 = 12E_R$ . Finalmente se realizará el cálculo de la energía de tunelamiento que tienen las partículas entre los sitios cuando están en una red hexagonal, la cual fue descrita en el capítulo tres, cuya ecuación es (3.49),

$$\frac{J}{E_R} = \left(\frac{\pi^2}{3} - 1\right) \frac{V_0}{E_R} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{9}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right),$$

$$= \left(\frac{\pi^2}{3} - 1\right) 12 \exp\left(-\frac{2\pi^2}{9}\sqrt{12}\right),$$

$$\frac{J}{E_R} = 0.0137843.$$
(5.7)

El valor numérico de la ecuación (5.7) corresponde a la energía de tunelamiento para la red hexagonal con una profundidad total de  $V_0 = 12E_R$ . Una vez encontrados los valores numéricos para la energía de interacción  $U^{2D}$  y el tunelamiento J en unidades de energía de recoil, se continuará con el cálculo del cociente  $J/U^{2D}$  para las diferentes redes ópticas, esto es, el cociente para la red cuadrada es

$$\frac{J/E_R}{U^{2D}/E_R} = \frac{0.001344}{0.011026} = 0.121933,$$
(5.8)

mientras que para la red hexagonal se tiene el siguiente resultado,

$$\frac{J/E_R}{U^{2D}/E_R} = \frac{0.0137843}{0.011026} = 1.25.$$
(5.9)

En el capítulo 3 en la sección 3.5, se indicaron los valores críticos que toma el cociente  $J/U^{2D}$ , para el cual el sistema sufre una transición de fase cuántica de un estado aislante de Mott a superfluido para las diferentes redes ópticas en las que se está interesado. En este trabajo se está interesado que el sistema se encuentre en la

fase superfluida, ya que la ecuación de Gross-Pitaevskii describe a un superfluido y no estados aislantes. Para la red cuadrada el valor de la transición  $\eta_c = J/U^{2D} = 0.06$ . Comparado este resultado con el valor de la ecuación (5.8) se tiene

$$\frac{J}{U^{2D}} \approx 0.122 > 0.06, \tag{5.10}$$

lo que resulta que el sistema está en una fase superfluida y lejos del punto de transición  $\eta_c$  de aislante de Mott a superfluido. Como se mostró en el capítulo tres, acerca de los valores  $\eta_c$  de la transición de fase cuántica, los diagramas de fase 3.10 para la red triangular y hexagonal  $\eta_c = 0.037$  y  $\eta_c = 0.086$ , comparando el resultado de la ecuación (5.9) con el valor de la transición de aislante de Mott a superfluido para la red hexagonal, se tiene lo siguiente

$$\frac{J}{U^{2D}} \approx 1.25 > 0.086. \tag{5.11}$$

El resultado anterior indica que el sistema está en una fase superfluida y se encuentra muy lejos del punto  $\eta_c$  de transición de fase de aislante de Mott a superfluido.

El análisis anterior confirma que los parámetros elegidos para el valor de la profundiad del potencial  $V_0 = 12E_R$  y el el valor de la interacción en la ecuación de Gross-Pitaevskii  $g_{2D} = 0.01\frac{\hbar^2}{m}$  son apropiados y válidos para proceder a resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii que describe al sistema en una fase superfluida y no se encuentra en fases aislantes.

#### 5.1.2. Redes ópticas cuadradas

En el capítulo dos se describió cómo generar potenciales ópticos con diferente geometría cuadrada. La red óptica más sencilla en dos dimensiones corresponde a la red cuadrada. La cual es generada por cuatro haces de luz láser con la misma frecuencia y propagándose sobre los ejes horizontal y vertical, estos a su vez interfieren y generan una onda estacionaria que forma una geometría cuadrada. La expresión matemática que describe al potencial de red óptica cuadrada es,

$$V(x,y) = v_0 \left( \sin^2(\pi x) + \sin^2(\pi y) \right), \qquad (5.12)$$

donde  $v_0 = 6E_R$ , y la profundidad total del potencial es  $V_0 = 12E_R$  en unidades de energía de recoil. Se resuelve la ecuación de Gross-Pitaevskii con el método de tiempo imaginario<sup>1</sup> y tomando el potencial (5.12), con el valor de la interacción  $g_{2D} = 0.01 \frac{\hbar^2}{m}$ para obtener el estado estacionario.<sup>2</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>El estado inicial utilizado en todos los cálculos para alcanzar el estado estacionario es una distribución constante, esto es,  $\psi(x, y) = \text{const.}$ 

 $<sup>^2</sup>$ Para garantizar la veracidad del estado estacionario encontrado, evolucionamos el estado estacionario en tiempo real con la ecuación de Gross-Pitaevskii y verificamos su invariancia.

En la figura 5.1 se ilustra tanto el potencial (5.12) que forma a la red óptica, como el perfil de densidad  $\rho(x, y)$  en dos dimensiones. Se logra también apreciar como las partículas se sitúan en los mínimos del potencial, esto es, en los sitios de la red óptica con la misma probabilidad.



**Figura 5.1:** (a) Potencial de red óptica cuadrada 5.12. (b) Perfil de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$  obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii con el algoritmo de tiempo imaginario. Las regiones obscuras corresponden a los mínimos y las regiones más brillantes corresponden a los máximos de la función. (c) Se ilustra un corte en y = 0 para el potencial con línea punteada y el perfil de densidad línea continua. Los máximos del perfil de densidad se sitúan en los mínimos del potencial.

#### 5.1.3. Estados estacionarios para la red triangular

En el capítulo 2 se presentó la manera de implementar diferentes haces láser para formar diferentes geometrías, en el laboratorio. En particular una geometría de red óptica triangular y hexagonal. El potencial de red óptica para formar una red triangular es [108]

$$V^{tr}(x,y) = v_0 \left[ \cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{4\pi}{3}\frac{y}{a'}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{4\pi}{3}\frac{y}{2a'}\right) \cos\left(\sqrt{3}\frac{4\pi}{3}\frac{x}{2a'}\right) \right], \quad (5.13)$$

donde  $v_0 = 3.45E_R$  es la profundidad en unidades de energía de recoil, teniendo en cuenta que la profundidad total de la red óptica es  $V_0 = 12E_R$  y la constante de red a' = 0.55a. En la figura 5.2 se ilustra un fragmento del potencial de aproximadamente 1000 sitios y el perfil de densidad correspondiente al estado estacionario de la ecuación de Gross-Piteaevskii para el potencial (5.13).



**Figura 5.2:** (a) Potencial de red óptica triangular 5.13. (b) Perfil de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$  obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii con el algoritmo de tiempo imaginario. Las regiones obscuras corresponden a los mínimos y las regiones más brillantes corresponden a los máximos de la función. (c) Se ilustra un corte en y = 0 para el potencial con línea punteada y el perfil de densidad línea continua. Los máximos del perfil de densidad se sitúan en los mínimos del potencial.

#### 5.1.4. Estados estacionarios para la red hexagonal

Como se mencionó en los capítulos anteriores, la red hexagonal se ha logrado implementar la condensación de Bose-Einstein y estudiar diferentes propiedades tal como la transición superfluido-aislante de Mott [30]. El potencial de confinamiento para una red hexagonal [105]

$$V^{hex}(x,y) = v_0 \left[ \cos\left(\frac{4\pi y}{3a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3a}} - \frac{2\pi y}{3a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3a}} + \frac{2\pi y}{3a}\right) \right], \quad (5.14)$$

donde  $v_0 = 2.66E_R$  es la profundidad en unidades de energía de recoil, dando como resultado una profundidad total del potencial de  $V_0 = 12E_R$ , *a* es la constante de red a = 1. En la figura 5.3 se ilustra un fragmento del potencial, de aproximadamente 1000 sitios y el perfil de densidad correspondiente al estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii para el potencial (5.14).



**Figura 5.3:** (a) Potencial de red óptica hexagonal 5.14. (b) Perfil de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$  obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii con el algoritmo de tiempo imaginario. Las regiones obscuras corresponden a los mínimos y las regiones más brillantes corresponden a los máximos de la función. (c) Se ilustra un corte en x = 0 para el potencial con línea punteada y el perfil de densidad línea continua. Los máximos del perfil de densidad se sitúan en los mínimos del potencial.

#### 5.1.5. Potenciales Desordenados

En el capítulo dos se discutió en forma breve los experimentos en los cuales se observó la localización de Anderson en átomos ultrafríos [15, 16, 17]. A su vez también se aludió a las diferentes técnicas que se utilizan en el laboratorio para generar desorden. En este trabajo se está interesado en una forma especial para modelar un desorden no correlacionado en el potencial de confinamiento, esto es, el desorden está presente en las diferentes redes ópticas que confinan a los átomos. El desorden es introducido en una función  $\delta(x, y)$  que toma valores aleatorios en un intervalo  $[-\delta_{min}, \delta_{max}]$ . Estos valores aleatorios cambian en cada punto (x, y) de la malla que forma al potencial de la red óptica, en otras palabras, la función  $\delta(x, y)$ modifica de manera aleatoria la profundidad del potencial en cada punto de la malla que define a la red, esto es, los potenciales para las diferentes geometrías con desorden son de la forma

$$V^{hex}(x,y) = V_0^{\delta} \left[ \cos\left(\frac{4\pi y}{3a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3a}} - \frac{2\pi y}{3a}\right) + \right. \\ \left. + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3a}} + \frac{2\pi y}{3a}\right) \right],$$

$$V^{sq}(x,y) = V_0^{\delta} \left[ \sin^2\left(\frac{x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{y}{a}\right) \right],$$

$$V^{tr}(x,y) = V_0^{\delta} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{4\pi}{3}\frac{y}{a'}\right) + \right. \\ \left. + \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{4\pi}{3}\frac{y}{2a'}\right) \cos\left(\sqrt{3}\frac{4\pi}{3}\frac{x}{2a'}\right) \right],$$

$$(5.15)$$

donde  $V_0^{\delta} = v_0 (1 + \delta(x, y))$ . El desorden en el potencial es el resultado de sumarle o restarle un número aleatorio  $\delta$  a cada punto de la malla que forma el potencial. Sin embargo, la acción que realizan el conjunto de números aleatorios en el potencial es causante que el desorden sea un ruido blanco, esto es, no guardan correlación estadística. Finalmente este tipo de potenciales son estáticos en el tiempo.

En la figura 5.4 se ilustra un fragmento de potencial dado por la ecuación (5.15), esto es, una red cuadrada para una realización de desorden en las amplitudes. La manera en que se introduce el desorden en este trabajo es similar a considerar un corrimiento de energía en cada sitio, esto es, el trabajo original de Anderson.

Está técnica, la cual se ha decidido elegir para generar desorden en redes ópticas con diferentes geometrías z = 3, z = 4 y z = 6, no está lejos de la situación



Figura 5.4: Representación esquemática de un potencial de red óptica cuadrada en dos dimensiones con una realización de desorden en las amplitudes, a es la constante de red.

experimental de las técnicas de *speckle* montadas con redes ópticas con número de coordinación z = 4. En el grupo experimental liderado por B. DeMarco [109] logran generan un campo de *speckle* y lo añaden a una red óptica con número de coordinación z = 4, dando como resultado un potencial de red óptica con desorden, esto se ilustra en la figura 5.5



Figura 5.5: a) Dispositivo experimental para generar un speckle (luz verde). b) Potencial aleatorio speckle (verde) se agrega independientemente a un potencial de red óptica para crear un potencial desordenado experimentalmente. Imagen tomada de [109].

La manera en la que se ha elegido el desorden en este trabajo garantiza que se modifica la profundidad de la red pero se conserva la estructura de la misma. Para ilustrar el efecto del desorden considerado en este trabajo se elegirá al potencial de red cuadrada. Tomando un corte sobre el eje y = 0 se aplica un rango de valores de la magnitud de desorden al potencial. Los valores de la magnitud del desorden  $\delta(x, y)$ son (a) = 10 %, (b) = 20 %, (c)= 30 %, (d)= 40 %, (e)= 50 %, (f)= 60 %, (g)= 70 %, (h)= 80 %, (i)= 90 %, que equivale al porcentaje del potencial V(x, y) evaluado en los puntos (x, y) que lo forman. En la figura 5.6 se ilustra el comportamiento mencionado anteriormente. Los valores que toma la magnitud del desorden tienen unidades de energía de recoil  $E_R$ .



Figura 5.6: Ilustración para los diferentes valores de desorden (una realización) en el potencial de una red cuadrada, tomando un corte en y = 0.

Por otra parte, las técnicas de *speckle* sin red óptica han dado lugar a observar en el laboratorio la localización de Anderson en una dimensión [15]. El *speckle* usado en el experimento [15] se ilustra en la figura 5.7. Si se compara la figura 5.7 que tiene un corte en una dirección con cualquier elemento de la figura 5.6, se demuestra que la manera en la cual se decidió introducir el desorden es consistente con la técnica de *speckle* y, se puede implementar en un laboratorio de materia ultrafría.

El desorden en el potencial es asumido tal que si se promedian todas las realizaciones de los potenciales con el mismo intervalo de desorden, se recupera el potencial original sin desorden, en otras palabras, el desorden es homogéneo en el sentido de que sus propiedades estadísticas son independientes de las coordenadas absolutas del potencial.

Es importante tener en cuenta que ésta forma de establecer el desorden a través de todo el espacio de coordenadas continuas donde se define la red se asemeja a sistemas reales análogos en materia condensada donde cada partícula siente un entorno energético diferente asociado al desorden.

Los valores de desorden que se consideraron en este trabajo, están en el intervalo



Figura 5.7: Ilustración de un patrón de speckle con su respectivo corte en un eje. Imagen tomada de los datos experimentales de Billy [110].

del = 10% al = 90% del valor que toma V(x, y) en cada punto de la malla que define al potencial. El criterio que permitió establecer los valores donde se puede variar la amplitud del desorden, antes de que el sistema entre en una fase en la cual la densidad del condensado se vuelve discontinua a través de la red, es la función de correlación de la distancia del vecino más cercano, denotada por  $g_1$ . Esta cantidad se puede definir en analogía con la llamada coherencia de fase  $\chi(t)$ , que mide la correlación entre los valores de la función de onda del condensado de Bose en puntos separados por una constante de red a. La coherencia de fase es definida como [111]  $\chi(t) = |\int d^3x \psi^*(r, z; t)\psi(r, z + a; t)|^2$ . Esta coherencia de fase proporciona información confiable del grado de coherencia del gas de Bose confinado en una red óptica, en otras palabras, la coherencia de fase es una cantidad que permite distinguir cuando el condensado no es un vidrio Bose. Procediendo de manera análoga se tiene que la función de correlación entre vecinos más cercanos es definida de la siguiente manera

$$g_1 = \frac{1}{z^2} \sum_{m \in n.n.} \left| \int dx dy \, \psi^*(x, y) \psi(x + x_m, y + y_m) \right|^2, \tag{5.16}$$

donde z es el número de coordinación y m es una etiqueta que identifica los sitios vecinos más cercanos con respecto a un sitio localizado en la posición (x, y). En esté trabajo se está interesado en tres tipos de redes periódicas, que se han logrado implementar en el laboratorio con número de coordinación z = 3, z = 4 y z = 6. Los vecinos más cercanos para este tipo de redes ópticas son los siguientes: para la red hexagonal

$$(x_m/a, y_m/a) = \pm \{(1,0), (-1/2, \frac{\sqrt{3}}{2}), (-1/2, -\frac{\sqrt{3}}{2})\},$$
 (5.17)

para la red cuadrada

$$(x_m/a, y_m/a) = \{(0, 1), (0, -1), (1, 0), (-1, 0)\},$$
(5.18)

y para la red triangular

$$(x_m/a, y_m/a) = \{(1,0), (1, \frac{\sqrt{3}}{2}), (-1/2, \frac{\sqrt{3}}{2}), (-1,0), (-1/2, -\frac{\sqrt{3}}{2}), (1/2, -\frac{\sqrt{3}}{2})\}.$$
(5.19)

La función de correlación manifiesta la información de que valores de la magnitud del desorden deben ser elegidos, para que el gas de Bose confinado en una red óptica con desorden se mantenga en una fase superfluida. Recordando que cuando se aumenta la profundidad de la red óptica esta sufre una transición de fase de superfluido a aislante de Mott [89]. La ecuación de Gross-Pitaevskii describe el comportamiento de un gas de Bosones en la fase superfluida, si el sistema se encuentra en fases aislantes está ecuación de ja de ser válida.

En la figura 5.8 se ilustra el comportamiento promedio de 50 realizaciones diferentes de la función de correlación (5.16) en función de la magnitud del desorden  $\delta$ , para las diferentes redes ópticas.

Los valores de la función de correlación en la gráfica 5.8 están normalizados con respecto al valor de  $\delta = 0$ , esto es, desorden cero. Las barras de error corresponden a la desviación estandar del promedio de 50 realizaciones diferentes de  $g_1$ , para un mismo intervalo de la magnitud de desorden  $\delta$ . Como puede apreciarse en la figura 5.8, el valor de la función de correlación se encuentra por arriba del valor de 0.5 para diferentes valores de la magnitud de desorden, esto significa que los átomos se encuentran distribuidos a través de todos los sitios de la red. Por lo tanto, se puede considerar que la magnitud del desorden por debajo del cien por ciento que toma en cada punto de la malla del potencial V(x, y) se encuentran en el régimen superfluido. Como se menciona al final del capítulo tres, usando el Hamiltoniano de Bose-Hubbard y técnicas de simulación cuántica de Monte-Carlo se encuentra un diagrama de fase en función de  $\Delta/2J$  vs U/J, vea la figura 3.11. Comparando los valores de la interacción y los valores de la magnitud de desorden que se han asignado al sistema, se demuestra que el sistemas se encuentra en la fase superfluida y está lejos de las fases aislante de Mott y vidrio de Bose.



**Figura 5.8:** Cada punto ilustra el valor promedio de 50 realizaciones diferentes de la función de correlación entre vecinos más cercanos, esto es,  $g_1$  en función del desorden  $\delta$ , para la red hexagonal (z = 3), cuadrada (z = 4) y triangular (z = 6). Las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones de  $g_1$ .

### 5.1.6. Estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para diferentes redes ópticas con desorden

Al considerar los efectos del desorden en el potencial, éste se caracteriza por propiedades estadísticas de diferentes realizaciones que toman lugar para una misma magnitud de desorden. Cada muestra es única ya que corresponde a una realización especifica de desorden y sus características universales se obtendrán mediante promedios estadísticos. En otras palabras, el cálculo de cualquier observable en específico para una realización particular de desorden tiene poco sentido, ya que la distribución de desorden cambia de manera aleatoria para una misma magnitud de desorden. Por lo tanto las cantidades observables significativas deberan correponder a promedios estadísticos sobre las realizaciones de los potenciales con el mismo intervalo de desorden. Al promediar la observable sobre las diferentes realizaciones de desorden se obtendrá una observable que describe la situación cuando ésta se encuentra en un entorno desordenado. Hasta la fecha no se ha logrado la implementación experimental de incluir desorden en las redes triangulares y hexagonales y se desconoce la existencia de estados localizados en gases de Bose confinados en dos dimensiones.

Los valores de la magnitud del desorden que cumplen el criterio de la función de correlación  $g_1$  valga 1 y estos valores se encuentran en el régimen de superfluido y esten lejos de fases aislantes y vidrio de Bose son:  $\delta(x, y) = 0.1$  hasta  $\delta(x, y) = 1.0$ . Esto equivale del 10% hasta el 100% del valor de V(x, y) que toma cada punto de la malla que forma al potencial. Por medio del algoritmo de tiempo imaginario

## Estados estacionarios de un condensado de Bose en una red desordenada en 2D

se resuelve la ecuación de Gross-Pitaevskii para encontrar el estado estacionario correspondiente, cuando el gas de Bose se encuentra confinado para cada uno de los potenciales con diferentes magnitudes de desorden, esto es, red hexagonal (z = 3), red cuadrada (z = 4) y red triangular (z = 6). En la figura 5.9 se ilustra un fragmento del perfil de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$  obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii para las diferentes redes ópticas con desorden. Este perfil de densidad correponde para una sola realización de desorden en el potencial y cuyos valores de la magnitud de desorden son:  $\delta x = \delta y = [-0.2, 0.2], \delta x = \delta y = [-0.4, 0.4], \delta x = \delta y = [-0.8, 0.8]$ . El número de sitios que contiene cada potencial de red óptica es de aproximadamente  $\Omega \sim 1000$  sitios.



Figura 5.9: Fragmento de los perfiles de densidad para las redes ópticas hexagonal (z = 3), cuadrada (z = 4) y triangular (z = 6) correspondientes para una sola realización de la magnitud de desorden cuyos valores son:  $\delta = 0.2, 0.4, 0.8$  y un tamaño de  $\Omega \sim 10^3$ . Las regiones brillantes corresponden al máximo de la densidad mientras que las regiones negras corresponden a una ausencia de superfluido.

De una manera cualitativa, de la figura 5.9 se puede dar la siguente información

de los estados estacionarios en dos dimensiones para las redes ópticas.

- Cuando la magnitud del desorden  $\delta$  es diferente de cero, los picos gaussianos son distribuidos de manera aleatoria en algunos sitios de la red y esto depende de la magnitud del desorden  $\delta$ . Varios sitios de la red muestran una densidad superfluida disminuida por lo que presentan picos con amplitudes más bajas y dispersos en algunos sitios de la red. Se suguiere un criterio para contar los picos no despreciables que contribuyan a la densidad superfluida, este criterio es el siguiente. Para una magnitud de desorden dada, sólo los picos que tienen una amplitud mayor al 5 % de la amplitud del pico más alto son considerados para el desarrollo estadístico que se ilustrará más adelante.
- A medida que se va aumentando la magnitud del desorden  $\delta$ , la densidad superfluida se ve fragmentada. Esto es, la distribución del superfluido se concentra en ciertos sitios de la red, lo que da lugar a la formación de islas de superfluido a través de toda la red, tal como se ilustra en la figura 5.9. Estas islas están desconectadas entre si y esto conduce a la supresión del transporte en toda la red.
- Diferentes realizaciones para un mismo intervalo de desorden  $\delta$  muestran que la densidad superfluida se localiza en diferentes sitios de la red de manera aleatoria.
- Cuando la magnitud del desorden es lo suficientemente grande la densidad superfluida colapsa a unos cuantos sitios para las redes con número de coordinación z = 4 y z = 6.

Al observar la figura 5.9 que corresponde a los perfiles de densidad obtenidos de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii, para las diferentes geometrías de potencial con una sola realización de desorden. Se muestra que para ciertos valores de la magnitud del desorden existe localización. Ahora se mostrará la manera en la cual se podrá cuantificar la localización. Como se dijo anteriormente, el cálculo de cualquier observable en una situación que hospede desorden necesita promedios estadísticos sobre las diferentes realizaciones de desorden. En este caso, los potenciales en el cual están confinados los átomos contienen el desorden y por lo tanto, será diferente para cada valor de la magnitud del desorden. Para resolver que cada potencial es diferente en un mismo intervalo de desorden, se han considerado un total de 50 diferentes realizaciones para un mismo intervalo de desorden  $\delta$  y un tamaño de red  $\Omega \sim 1000$  sitios.

Las observables que facilitarán el trabajo para cuantificar el grado de localización son dos: una es la fracción de picos (pf) y la segunda es la distribución de las alturas h de estos picos, ambas en función del desorden  $\delta$ . La observable (pf) se refiere

## Estados estacionarios de un condensado de Bose en una red desordenada en 2D

al número de sitios en el cual existe la densidad superfluida entre el número de sitios totales que hay en la red. De cada perfil de densidad superfluida se analizó la amplitud de los picos para cada red y se consideró el criterio de sólo tomar los picos que fueran mayores al 5 % del pico más alto. Con este criterio se determinó la fracción de picos y las alturas relativas para cada realización diferente del desorden. Entonces, tomando el promedio de 50 diferentes realizaciones del desorden, que corrresponde a resolver 50 veces diferentes la ecuación de Gross-Pitaevskii para un potencial con desorden diferente en cada realización. De esto se obtienen 50 perfiles de densidad diferentes asociados a un mismo intervalo del desorden. Con estos perfiles de densidad se aplica el criterio para la selección de los picos y sus respectivas alturas. Se estima el promedio de las alturas de los picos  $\langle h \rangle$ . En la parte superior de la figura 5.10 se ilustra el comportamiento promedio de la distribución de las alturas  $\langle h \rangle$  en función del desorden para las tres redes con diferente número de coordinación. La distribución de las alturas  $\langle h \rangle$  es normalizada con respecto a la altura cuando en las redes no existe desorden, esto es, en el eje de las ordenadas el valor numérico nos dice qué tan grande es la altura con respecto a la altura que existe a desorden cero. La distribución de las alturas  $\langle h \rangle$  en función del desorden para las tres diferentes redes nos indica lo siguiente: para la red hexagonal las alturas se mantienen constantes para todos los valores de desorden, esto es, no importa si existe un valor de desorden de  $\delta = 0.1$  y un valor de 0.9 de V(x, y), las alturas simpre permaneceran iguales. Por otra parte, la distribución de las alturas para las redes cuadrada (z = 4) y triangular (z = 6)muestran un comportamiento de crecimiento exponencial en función del desorden.

El comportamiento de la observable faltante es la fracción de picos  $(p_f)$ , esta observable es la más importante ya que nos indica el grado de localización que existe en las redes ópticas. En la parte inferior de la figura 5.10 se encuentra el comportamiento promedio de la fracción de picos en función del desorden. Se puede observar que para la red hexagonal no existe una localización, esto es, para desordenes muy grandes la fracción de picos se mantuvo constante al 100% excepto para valores cuya magnitud de desorden  $\delta$  está entre el 80 % y el 90 % de V(x, y). La fracción de picos bajó muy poco a un valor apróximado del 90% de ocupación en los sitios, esto sugiere que la red hexagonal es una excelente conductora. Sin embargo, para los mismos valores de la profundidad del potencial y valores de desorden  $\delta$ , se observa que la densidad superfluida muestra una fragmentación en algunos sitios de la red, esto es, para la red cuadrada (z = 4) y triangular (z = 3) se observa que para un valor crítico del desorden,  $(\delta_c) \ \delta \gtrsim 0.3$  existe una transición suave a la localización, donde las observables  $\langle h \rangle$  y  $p_f$  empiezan a cambiar. En otras palabras, para un desorden mayor a  $\delta_c$ la densidad superfluida se ve fragmentada, esto es, los bosones llenan algunos sitios de la red. Se empiezan a observar picos exponencialmente localizados. Las partículas se logran localizar en algunos sitios de la red de manera aleatoria. Para valores de intensidad del desorden ( $\delta_c$ ) menores al umbral de localización, no aparecen picos localizados en el perfil de densidad. En lugar de esto aparecen amplitudes gaussianas



**Figura 5.10:** Altura promedio  $\langle h \rangle$  y fracción de picos promedio  $p_f$  en función del desorden  $\delta$ , para apróximadamente 1000 sitios y  $V_0 = 12E_R$ . Las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones de  $\langle h \rangle$  y  $p_f$ . La línea punteada azul corresponde para la red hexagonal con  $V_0 = 24E_R$ .

uniformemente distribuidas a lo largo de los sitios que forman a dicha red. Conforme se va aumentando la magnitud de desorden la fracción de picos se ve disminuida, esto es, para valores mayores al 80 % de desorden la densidad superfluida se acapara en unos cuantos sitios. En otras palabras, la densidad colapsa en unos cuantos picos de densidad únicos y ubicados de manera aleatoria en la red óptica, dando lugar al fenómeno de localización en las redes cuadradas y triangulares. Como se mencionó anteriormente en la figura 5.10 se ilustra el comportamiento de las alturas promedios del perfil de densidad y la fracción de picos promedios en función del desorden. En estas gráficas existen líneas continuas que unen a cada punto que corresponde al valor promedio, estas líneas se refieren a un ajuste de dichos puntos. Empezando con el comportamiento de los puntos que describen el valor promedio de las alturas en función de la magnitud del desorden. Estos puntos tiene un comportamiento de manera exponencial creciente para la red triangular y cuadrada. Entonces el ajuste correspondiente a estos puntos está dado por la curva  $1 + \exp(b_{0,\text{red}} + b_{1,\text{red}}\delta + b_{2,\text{red}}\delta^2)$ , con los parámetros (triangular, cuadrada):  $b_{0,red} = (-12.53, -7.84), b_{1,red} = (31.42, 19.98)$ y  $b_{2,\text{red}} = (-15.58, -8.61)$ . Sin embargo, las alturas del perfil de densidad correspondientes para la red hexagonal se mantienen constantes, entonces el ajuste es una curva constante, es decir,  $\langle h \rangle \approx 1$  para  $\delta \lesssim 1$ . Finalmente en la gráfica de los promedios de fracción de picos en función del desorden también existen líneas continuas que son un ajuste a dichos puntos. El ajuste a estos puntos esta dado por dos curvas que se unen cuando el valor del desorden toma el valor crítico  $\delta_c$ , esto es, cuando aparece la transición a la localización en el sistema. Estas dos curvas son:  $1 - \alpha_{\rm red}\delta^2$  para  $\delta \lesssim \delta_c$ , y  $A_{\rm red} \exp(\beta_{\rm 1red}\delta + \beta_{\rm 2red}\delta^2 + \beta_{\rm 3red}\delta^3)$  para  $\delta > \delta_c$ . Los parámetros de las curvas anteriores toman un valor diferente para cada potencial de red óptica, esto es, red (triangular, cuadrada, hexagonal)  $\alpha_{\rm red} = (0.29, 0.022, 0.00051), \ \delta_c \approx (0.3, 0.3, 0.6),$  $A_{\rm red} = (1.023, 0.98, 0.99), \ \beta_{\rm 1, red} = (1.26, 0.0, 0.21), \ \beta_{\rm 2, red} = (-4.17, 3.59, -0.34),$  $\beta_{\rm 3, red} = (-1.93, -11.52, 0.005).$ 

Dado los resultados anteriores se encontró que no aparece el fenómeno de la localización para la red hexagonal para los mismos valores de la magnitud de desorden. En principio se eligió que las tres redes ópticas tengan la misma profundidad en el potencial, esto es, el valor de  $V_0 = 12E_R$ , valor que se eligió para estar en sintonía con los datos experimentales en los cuales hacen las redes ópticas en dos dimensiones [26] y la misma constante de red a = 1. Sin embargo, otro parámetro importante que se ha mencionado en capítulos anteriores es la energía de tunelamiento (3.32). Esta energía la tienen los átomos entre los sitios vecinos cuando estos se encuentran confinados en un potencial de red óptica. Usando los algoritmos [42] [112] [85], se calcula numéricamente las energías de tune lamiento en función de la profundidad  $V_0$ , para los potenciales de red cuadrada y red hexagonal cuando estos tienen la misma constante de red. Estos resultados se ilustran en la figura 5.11. Al observar esta gráfica, se puede concluir que la energía de tunelamiento depende de la geometría del potencial, esto es, la energía de tunelamiento para la red hexagonal es más grande con respecto a la energía de tunelamiento de la red cuadrada, cuando se tiene la misma constante de red y los mismos valores de profundidad  $V_0$ . Entonces, si las energías de tunelamiento de los átomos son diferentes para los mismos parámetros de profundidad de potencial  $V_0$  y constante de red. Se ha demostrado el fenómeno de localización está ausente en aquella red cuya energía de tunelamiento es mayor. Para encontrar el fenómeno de la localización en la red hexagonal se contempló igualar la energía de tunelamiento de esta red (3.49) con la energía de tunelamiento (3.48) que tienen los átomos cuando estan en una red óptica cuadrada de profundidad  $V_0 = 12E_R$ . Cuando se igualan las energías de tunelamiento de los átomos correspondientes a cada potencial de red, se tiene una incognita para la profundidad  $V_0$  en la energía de tunelamiento de los átomos para la red hexagonal, en otras palabaras, se tiene lo siguiente



Figura 5.11: Energías de tunelamiento  $J/E_R$  en función de la profundidad de cada potencial  $V_0/E_R$ , es decir, la energía de tunelamiento correspondiente a los átomos atrapados en el potencial de red hexagonal equivale al color amarillo en los puntos y líneas continuas usando dos algoritmos diferentes, estos fueron [42] [112]. Mientras que la energía de tunelamiento correspondiente a los átomos atrapados en el potencial de red cuadrada equivale al color azul en los puntos y líneas contínuas usando dos algoritmos fueron [28] [112].

$$\left(\frac{J}{E_R}\right)_{z=3} = \left(\frac{J}{E_R}\right)_{z=4}$$
(5.20)  
$$\left(\frac{\pi^2}{3} - 1\right) \frac{V_0}{E_R} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{9}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right) = 2\sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right)$$
(5.21)  
$$\left(\frac{\pi^2}{3} - 1\right) \frac{V_0}{E_R} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{9}\sqrt{\frac{V_0}{E_R}}\right) = 2\sqrt{12} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}\sqrt{12}\right)$$
(5.21)

La ecuación (5.21) se resuleve para la incognita  $\frac{V_0}{E_R}$ , que corresponde a la profundidad del potencial en unidades de energía de recoil, encontrando que la profundidad en la cual se tiene la misma energía de tunelamiento es  $V_0 \approx 24E_R$ .

Conociendo el resultado anterior se cambió el valor de  $v_0 = 2.66E_R$  de la ecuación (5.14) por el valor de  $v_0 = 5.180E_R$ . Entonces el nuevo potencial de red hexagonal tiene ahora una profundidad de  $V_0 \approx 24E_R$ . Una vez teniendo la nueva profundidad

## Estados estacionarios de un condensado de Bose en una red desordenada en 2D

para el potencial de red hexagonal, en este se incluyerón los mismos valores de la magnitud del desorden tal como los que actuaron para los potenciales de red cuadrada y red triangular. Se resolvió la ecuación de Gross-Pitaevskii para obtener el estado estacionario con estos nuevos parámetros de  $V_0$  y mismos valores de desorden. En la figura 5.12 se ilustra el nuevo comportamiento de los perfiles de densidad para el nuevo potencial. En esta figura se logra apreciar que para ciertos valores de la magnitud del desorden aparece el fenómeno de la localización en la red hexagonal. Para cuantificar los efectos de la localización en esta red, se calcularon las mismas observables que en las redes anteriores, esto es, la fracción de picos  $p_f$  y las alturas promedio  $\langle h \rangle$ . Estos resultados se ilustran en la figura 5.10 con una etiqueta de línea azul discontinua. En la gráfica 5.10, la fracción de picos muestra que existe una fragmentación de la densidad a partir de un nuevo valor de desorden, esto es,  $\delta_c = 0.4$ . Para valores mayores a está magnitud de desorden, la red hexagonal tiene un comportamiento similar a las redes con número de coordinación z = 4 y z = 6.



**Figura 5.12:** Fragmento del perfil de densidad para la red hexagonal con la profundidad  $V_0 \approx 24E_R$  y valores de desorden  $\delta = 0.2, 0.4, 0.8$ , y un tamaño de  $\Omega \sim 10^3$ . Las regiones brillantes corresponden al máximo de la densidad mientras que las régiones negras corresponden a una ausencia de superfluido.

La energía de tunelamiento de los átomos atrapados en una red hexagonal cambió con la acción de modificar la profundidad del potencial que forma a la red, gracias a esto se logró observar el fenómeno de localización en la red con número de coordinación z = 3. Se puede concluir que la energía de tunelamiento de los átomos en todas las redes ópticas es un parámetro importante para la ocurrencia de la localización en estos sistemas.

Para estudiar los efectos de escalamiento en la fragmentación de la densidad en el gas de Bose que se produce a medida que se aumenta la magnitud del desorden  $\delta$  y el tamaño  $\Omega$  de las redes, esto es, aumentando el número de sitios en la red. Se realizó el análisis de los estados estacionarios considerando redes de tamaño macroscópico.

Es importante mencionar que para estas redes los efectos de borde son totalmente despreciables. En primera instancia se trabajó con redes considerando los siguientes tamaños  $\Omega = 31 \times 31 = 961$ ,  $\Omega = 45 \times 45 = 2025$ ,  $\Omega = 55 \times 55 = 3025$  y  $\Omega = 64 \times 64 = 4096$  sitios para redes cuadradas; en tanto que para redes triangulares el número de sitios fue de  $\Omega = 686, 1020, 1500, 2000, 3000$  y  $\Omega = 4050$ ; mientras que para redes hexagonales los tamaños son similares, esto es,  $\Omega = 400, 600, 1000, 1500, 2000, 3000$  y 4000 sitios.



**Figura 5.13:** Fracción de picos en función del tamaño del sistema  $\Omega$  para valores de desorden  $\delta = 20 \%$ (azul), 60 %(morado), 80 %(negro) del valor de V(x, y). Las gráficas de arriba a abajo corresponden a hexagonal, cuandrada y triangular, las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones diferentes para un mismo intervalo de desorden  $\delta$ .

En las figura 5.13 se ilustrá el valor promedio de la fracción de picos  $(p_f)$  en función del tamaño del sistema  $\Omega$ . Los páneles de arriba a abajo corresponden a redes hexagonales, redes cuadradas y redes triangulares respectivamente. Se realizaron 50 realizaciones diferentes para un mismo valor del desorden, en este caso los valores fijos del desorden fueron  $\delta = 20\%$  (puntos azules),  $\delta = 60\%$  (puntos morados) y  $\delta = 80\%$  (puntos negros). Las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones diferentes para un mismo intervalo de desorden  $\delta$ . Para valores de desorden de un  $\delta = 20\%$ , se observa que para las tres redes no importa qué tan grande sea el tamaño de la red la densidad superfluida, nunca se fragmentará, esto es, los picos son distribuidos uniformemente en todos los sitios de la red para las tres diferentes redes.

En la región del 30 %  $\lesssim \delta \lesssim 50$  % se producen grandes fluctuaciones en la fracción de picos, pero ocurriendo una estabilización de la  $p_f$  conforme se va aumentando el número de sitios. Este comportamiento es muy similar al observado en las transiciones de fase típicas en la que el sistema experimenta fluctuaciones en la transición. Debemos enfatizar que el tratamiento utilizado en este estudio no puede describir transiciones de fase, ya que el sistema siempre está en la región superfluida. Para  $\delta \gtrsim 60$  % la fracción de picos se satura a un valor pequeño pero constante conforme se aumenta el número de sitios, es decir, la fracción de picos se vuelve independiente del tamaño del sistema para  $\Omega > 3 \times 10^3$ , esto es, a mayor número de sitios, las partículas se localizarán para redes finitas bidimensionales con número de coordinación (z = 4) y (z = 6), no obstante esto es diferente para la red con número de coordinación (z = 3) y una profundidad de  $V_0 = 12E_R$ .

Finalmente para un desorden  $\delta \gtrsim 80\%$ , las redes con número de coordinación (z = 4) y (z = 6) sufren una notable fragmentación de la densidad, esto es, la densidad colapsa a muy pocos sitios, en otras palabras, los átomos se localizan. No obstante, se observa que el sistema no alcanza el límite donde la fracción de picos tienda a cero  $p_f \rightarrow 0$ . Dicho de otra manera, no se logra contemplar la aparición de un solo pico localizado como en la teoría de Anderson [4].

El análisis realizadó en este trabajo es para una interacción débil entre los átomos, esto es,  $g_{2D} = 0.01 \frac{\hbar^2}{m}$ . Estos átomos están confinados en potenciales de redes ópticas de tamaño macroscópico, finitas y desordenadas con número de coordinación z = 3, z = 4 y z = 6. Se encontró que existe el fenómeno de localización de los átomos en algunos sitios que forman a las redes ópticas desordenadas con gemetrías triangular y cuadrada. Este fenómeno de localización aparece para valores arbitrarios de desorden superiores al valor umbral  $\delta_c$ , dependiendo de la geometría de red.

Como se mencionó anteriormente la red hexagonal no exhibe fragmentación de la densidad para los mismos valores de desorden y la misma profundidad del potencial que para las red cuadrada y triangular. Esto también lo confirma el análisis de escalamiento ya que para redes de  $\Omega \approx 10^3$ , la fracción de picos es constante y se mantiene por arriba del 70 % de sitios ocupados en la red hexagonal para los diferentes valores de desorden. De estos resultados se concluye que la red óptica hexagonal es un red con la propiedad de muy buena conducción cuando se encuentra con una profundidad de  $V_0 = 12E_R$ .

Es importante destacar que este fenómeno de localización observado en este trabajo está en la fase superfluida y el sistema está lejos de la fase vidrio de Bose y aislante de Mott. La localización es causada por el desorden que existe en los potenciales de confinamiento donde se encuentran los átomos.

#### 5.1.7. Potencial armónico

Uno de los objetivos principales fue demostrar si existe el fenómeno de localización en redes ópticas en dos dimensiones para átomos ultrafríos. Esto se ha logrado demostrar en la secciones anteriores para ciertas magnitudes del valor del desorden  $\delta$ y profundidad de la red  $V_0$ . En las secciones anteriores se encontró que el fenómeno de localización está presente sin el confinamiento de una trampa armónica. Ahora se quiere realizar el análisis del desorden considerando el confinamiento armónico más una red con desorden. Para el análisis solamente consideraremos a la red cuadrada. Primeramente se procederá a encontar los estados estacionarios y perfil de densidad para el potencial armónico en dos dimensiones, estos estados estacionarios son bien conocidos. El potencial de confinamiento armónico es,

$$V(x,y) = \frac{1}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2).$$
(5.22)

Por simplicidad elegiremos las mismas frecuencias tanto en la dirección x y en la dirección y, esto es,  $\omega_x^2 = \omega_y^2 = 1$ . En la figura 5.14, se ilustra el potencial y el perfil de densidad para bosones con interacción  $g_{2D} = 11.2E_R$  y una frecuencia homogénea. Como se menciona en el apéndice, el comportamiento de los estados estacionarios en una dimensión es muy similar al comportamiento en dos dimensiones, esto es, si se varía la interacción a un valor pequeño, esto es, aproximadamente cero, se encuentra que el resultado para los perfiles de densidad es una gaussiana, pero si la interacción es muy grande se encuentra un comportamiento de una parabola invertida llamada aproximación de Thomas-Fermi.



Figura 5.14: Potencial de atrapamiento armónico, y su respectivo perfil de densidad, para bosones con interacción.

### 5.1.8. Potencial armónico más red óptica con desorden

Dado que experimentalmente se ha caracterizado el perfil de densidad para un potencial armónico y una red cuadrada con desorden en dos dimensiones, se han combinado estos dos aspectos dentro de nuestro estudio numérico con el propósito de estudiar el efecto del confinamiento inhomogéneo. Vale la pena mencionar que en el laboratorio este tipo de arreglos ya se ha logrado implementar en 2016 [26], dando origen al así denominado fenómeno de localización de muchos cuerpos. Sin embargo, en este trabajo el gas de Bose es débilmente interactuante, esto es,  $g_{2D} = 0.01 \frac{\hbar^2}{m}$  y  $v_0 = 6E_R$ . La acción de sumar el potencial armónico más la red óptica con geometría cuadrada desordenada, es de la siguiente forma

$$V(x,y) = \frac{1}{2}\omega^2(x^2 + y^2) + v_0\left(1 + \delta(x,y)\right)\left(\sin^2(\pi x) + \sin^2(\pi y)\right).$$
(5.23)

En la parte izquierda de la figura 5.15 se ilustra la forma del potencial 5.23.



**Figura 5.15:** Potencial de oscilador armónico más red óptica desordenada 5.23, con una frecuencia  $\omega = 1 \text{ y } \delta(x, y) = 0.6 \text{ y su respectivo perfil de densidad } \rho(x, y)$ . Las regiones obscuras corresponden a los mínimos de la función y las regiones más brillantes corresponden a los máximos de la función.

Ahora si calculamos los perfiles de densidad para una frecuencia de  $\omega = 1$  y un intervalo de desorden de  $\delta = [-0.6, 0.6]$  se obtienen los resultados que se ilustran en la parte derecha de la figura 5.15. Claramente los resultados difieren cuando solamente existe una red óptica con desorden en el que aparece la localización para cietra magnitud del desorden y se manifiesta con un conjunto de picos distribuidos de manera aleatoria. En el caso del confinamiento de oscilador armónico este favorece a la localización de las partículas en el centro de la trampa armónica, no importa si el intervalo de desorden a elegir, es un desorden pequeño, esto es,  $\delta = [-0.1, 0.1]$ , o un desorden grande,  $\delta = [-1.0, 1.0]$ , las partículas siempre se localizan en el centro de la trampa armónica. En los resultados anteriores, la frecuencia siempre se mantuvo fija. Esto es, para frecuencias igual a  $\omega = 1$  siempre se observaba un pico de localización. El comportamiento del potencial armónico juega un papel importante para que exista localización de los átomos en el centro de la trampa, a diferencia de cuando sólo existe la red cuadrada con desorden, aquí los átomos sólo se localizan en algunos sitios de la red de manera aleatoria como se ilustra en la figura 5.9. Por otra parte se consideró disminuir la frecuencia de la trampa armónica y calcular los perfilies de densidad para estas frecuencias. Las frecuencias que se consideraron en este trabajo fueron  $\omega_1 = 0.001, \omega_2 = 0.01, \omega_3 = 0.03$  y  $\omega_4 = 1$  con una magnitud de desorden  $\delta = 0.6$ para la red cuadrada. Estos resultados se ilustran en la figura 5.16. Al observar los perfiles de densidad se muestra claramente que el comportamiento es distinto, esto es, el confinamiento armónico destruye el comportamiento de encontrar picos localizados dispersos en algunos sitios de la red, en otras palabras, aparecen varios picos de localización cerca del centro de la trampa pero para frecuencias muy bajas, esto es,  $\omega_1 = 0.001$ .



**Figura 5.16:** Perfiles de densidad  $\rho(x, y)$  para diferentes frecuencias (a)  $\omega_1 = 0.001$ , (b)  $\omega_2 = 0.01$ , (c)  $\omega_3 = 0.03$  y (d)  $\omega_4 = 1$  y una magnitud de desorden fijo de  $\delta = 0.6$ .

### 5.2. Espectro de energía de estados localizados

Una vez caracterizados los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para los tres tipos de red diferentes, esto es, hexagonal, cuadrada y triangular, ahora se investigará el espectro de energía de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii. Como se ilustró en la última sección del capítulo 4, la forma explícita de la energía asociada a la ecuación de Gross-Pitaevskii es de la siguiente forma,

$$E(t) = \int d^2 r \Psi^*(r,t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) \right] \Psi(r,t) + \frac{g_{2D}}{2} \int d^2 r \mid \psi(r,t) \mid^4 .$$
 (5.24)

Como se ha mencionado anteriormente en el potencial  $V_{ext}$  se encuentra la geometría que confina a los átomos y el desorden. Para encontrar la densidad de energía en el espacio recíproco se uso el teorema de Parseval que tiene a la energía en función de la magnitud del número de onda k que es la ecuación (4.83), esta tiene la siguiente forma

$$\varepsilon(k) = \frac{1}{2} \left| \int d^2 r e^{ik \cdot r} \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \nabla \rho(r) \right|^2 + \left| \int d^2 r e^{ik \cdot r} \sqrt{V}_{ext}(r) \rho(r) \right|^2 + \frac{1}{2} \left| \int d^2 r e^{ik \cdot r} \sqrt{g}_{2\mathrm{D}} |\rho(r)|^2 \right|^2.$$
(5.25)

La ecuación (5.25) es una nueva observable asociada a la energía del sistema. Entonces con esta nueva observable se realizarán promedios estadísticos sobre las diferentes realizaciones de desorden, se tomarán un total de 50 realizaciones diferentes para un mismo intervalo de desorden  $\delta$  y un tamaño de red de aproximadamente  $\Omega \sim 1000$  sitios.

Para todos los cálculos numéricos se trabajó en la primera zona de Brillouin. Para una red cuadrada, como es bien sabido, ésta es,  $-\frac{\pi}{a} \leq k_x, k_y \leq \frac{\pi}{a}$ . En tanto que para la red hexagonal y triangular la primera zona de Brillouin es el área de la celda primitiva en el espacio de red recíproco generado por los vectores  $\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$  y  $\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}(0, 1)$ . En la figura 5.17 se ilustra el espectro de energía de las tres redes ópticas, esto es, hexagonal, cuadrada y triangular. En la parte derecha de la figura 5.17 se ilustra el espectro de energía promedio para un valor de la magnitud del desorden  $\delta =$ 80%. En el recuadro superior de cada panel de la figura 5.17 se aprecia el espectro de energía promediado en la primera zona de Brillouin y el resto de la gráfica corresponde a la magnitud del espectro de energía, esto es,  $\epsilon(k_r)$  vs.  $k_r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . En la columna de la izquierda se encuntra el espectro de energía para las tres redes cuando no existe desorden, este es congruente con las mediciones experimentales que reportan en los sigientes experimentos [30, 91, 113]. En el espectro de energía cuando no existe desorden aparecen picos perfectamente localizados originados por la simetría de cada



**Figura 5.17:** Espectro de energía en el espacio recíproco para la red hexagonal parte superior, red cuadrada, en medio, y triangular parte inferior. La columna izquierda corresponde al espectro de energía para una magnitud de desorden  $\delta = 0$  y la columna derecha corresponde al promedio del espectro de energía para una magnitud de desorden  $\delta = 80\%$  de V(x, y). En el recuadro superior en cada panel se muestra la correspondiente gráfica de la densidad del espectro de energía en la primera zona de Brillouin.

potencial. Para desorden cero el espectro de energía para la red cuadrada es similar al espectro mostrado en la figura 3.9 del capítulo tres, correspondiente para una red cúbica con el mismo valor de la profundidad del potencial  $V_0 = 12E_R$  estando en el régimen superfluido.

Sin embargo, cuando existe desorden y se toma el promedio de 50 realizaciones diferentes para un mismo intervalo de desorden  $\delta$  para calcular el espectro promedio de energía  $\epsilon(k_r)$ . Estos resultados se ilustran en la columna derecha de la figura (5.17) y dan la siguiente información. Para la red hexagonal el espectro de energía promedio permanece puntual, no se observa un efecto de desaparición en los picos debido a un desorden aleatorio en esta red con número de coordinación z = 3. Finalmente el espectro de energía promedio para las redes con número de coordinación z = 4

y z = 6, se comporta como un continuo y existe un ensanchamiento de los picos. Resumiendo, la influencia del desorden en el espectro de energía se manifiesta al reemplazar picos de momento bien definidos (picos bien separados, espectro puntual) con una distribución densa (continua), que aún contiene información de la simetría del potencial.

## Capítulo 6

### Desorden en redes cuasicristalinas

En el capítulo anterior se realizó un estudio numérico extenso de los estados estacionarios dentro de la aproximación de campo medio, de los efectos del desorden en un gas de Bose débilmente interactuante confinado en diferentes redes ópticas periódicas. En este capítulo se abordará el estudio de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii en redes ópticas cuasicristalinas con desorden. Con este estudio se tratará de contribuir al entendimiento de la conducción en redes cuasicristalinas imperfectas y, por otro lado, motivados por los recientes logros experimentales en los que se reporta el confinamiento de un gas de Bosones es este nuevo tipo de geometrías sin simetría cristalina [33, 34, 35].

### 6.1. Cuasicristales

En el año de 1984 los investigadores Dan Shechtman, Blech, Gratias y Cahn descubrieron los cuasicristales en la naturaleza, observándolos por primera vez en patrones de difracción de electrones cuya simetría era icosaédrica en aleaciones metálicas de Aluminio y Magnesio. Este patrón se ilustra en la figura 6.1 [114].

El descubrimiento de los cuasicristales cambió profundamente la comprensión del orden estructural a escala atómica. Según la teoría cristalográfica estas estructuras están prohibidas por el teorema de restricción cristalográfica [1, 36]. Antes de enunciar tal teorema se dará la siguiente definición de eje de rotación. Un eje de rotación es de orden n si al girar el cristal sobre el eje un ángulo de  $2\pi/n$  se obtiene el mismo arreglo. Dada esta definición ahora se puede enunciar el siguiente teorema.

Teorema de Restricción Cristalográfica: Las redes periódicas no son compatibles con una simetría rotacional de n = 5 y n > 6. En otras palabras, los ejes de rotación posibles en un cristal corresponden a ordenes n = 1, 2, 3, 4 y 6. Este teorema nos permite establecer la definición de un cuasicristal. Un cuasicristal es aquella estructura que tiene simetrías cristalográficamente prohibidas. Sus rotaciones son de orden


**Figura 6.1:** Patrón de difracción del primer cuasicristal observado en la naturaleza en la Aleación  $Al_6Mn$ . Imagen tomada de [114]

n = 5, 8, 10, 12, dando nombre a los cuasicristales de simetría pentagonal, octagonal, decagonal y dodecagonal respectivamente [115, 116, 117]. Una definición alternativa es en términos de las bien conocidas estructuras cristalinas. Un cuasicristal es un cristal aperiódico con picos de difracción bien definidos, donde sus posiciones pueden ser etiquetadas por n, que corresponde a un conjunto único de números enteros mayores que la dimensión del espacio (en general), es decir, contar un número mínimo de enteros que se necesita para identificar de manera única todos los picos de difracción de un cristal en D-dimensiones. Si este número es finito y más grande que D, entonces el cristal es un cuasicristal. La definición anterior se ilustra con el ejemplo de la figura 6.1.

Los cuasicristales carecen de simetría traslacional y exhiben un orden de largo alcance a través de una estructura de mosaico no periódica. A su vez poseen un orden rotacional, esto es, su patrón de difracción permanece invariante ante ciertas rotaciones. Los cuasicristales constituyen un material intermedio entre materiales que muestran una estructura periódica y un amorfo, es decir, un material desordenado.

Como se ha mencionado anteriormente, los cuasicristales fueron descubiertos en aleaciones de aluminio y magnesio, aunque típicamente los cuasicristales ocurren en aleaciones ternarias o cuaternarias. Una gran clase consiste en aleaciones basadas en Al, siendo las más destacadas Al-Cu-Fe, Al-Pd-Mn y Al-Pd-Re. Estas muestran fases icosaédricas altamente ordenadas. Con el paso del tiempo se han encontrado diferentes aleaciones con diferente patrón cuasicristalino. En la tabla 6.1 se ilustra las aleaciones en la cual se encuentran los cuasicristales con diferentes órdenes de rotación, esto es, n = 8, 10, 12 e icosaédrico [118].

Los primeros estudios teóricos de las geometrías encontradas en los cuasicristales, llamadas teselaciones aperiódicas, datan de los años 70 y fueron propuestas por el ma-

Diferentes fases geométricas en cuasicristales			
Octagonal	Decagonal	Dodecagonal	Icosaédrica
V-Ni-Si, Mn-Si	Al-Cu-Mn, Al-Cu-Fe, Al-Cu-Ni	Cr-Ni,V-Ni	Al-Mn,Al-
			Li-Cu
Mn-Si-Al, Mn-Fe-Si	Al-Cu-Co, Cr-Ni, V-Ni-Si	V-Ni-Si	Al-Mg-Zn,
			Al-Pd-Mn

**Cuadro 6.1:** Algunos ejemplos de aleaciones metálicas que muestran diferentes geometrías cuasicristalinas.

temático Roger Penrose [119]. Hasta la fecha, los cuasicristales han sido ampliamente estudiados fenomenológicamente en el estado sólido, la materia condensada y la cristalografía [120, 121, 122]. Varios experimentos han modelado y recreado estructuras cuasicristalinas, especialmente en sistemas fotónicos [123, 124] y muy recientemente con átomos ultrafríos confinados en redes ópticas [33, 34].

Sorprendentemente, hasta ahora, poca literatura se ha dedicado al análogo óptico de modelar sistemas cuasicristalinos, a pesar de que las redes ópticas ofrecen varias posibilidades para diseñar una amplia gama de geometrías. Las redes ópticas son particularmente adecuadas para emular a los cuasicristales, dado que simetrías rotacionales presentes en los mismos se pueden imponer fácilmente en el laboratorio [33, 34, 35, 125]. Los cuasicristales ópticos se estudiaron por primera vez en experimentos de enfriamiento con láser [126], donde un gas atómico, lejos de la degeneración cuántica, y confinado en una red óptica pierde coherencia cuántica debido a la emisión espontánea. En estos sistemas, se descubrió que la temperatura y la difusión espacial se comportan de manera más lenta con respecto a las redes ópticas periódicas [127]. En el año 2005, se logró por primera vez confinar a un gas de Bose en una geometría cuasicristalina pentagonal (n = 5) [35], estudiando las propiedades dinámicas del gas cuando se encuentra en una red pentagonal. Posteriormente en el año 2019 se realizó un nuevo diseño óptico para construir una nueva red pentagonal para confinar átomos ultrafríos [125]. En el año 2013 se da por primera vez una propuesta para construir estructuras cuasiperiódicas bidimensionales para atrapar átomos con potenciales ópticos con una geometría cuasicristalina octagonal (n = 8)[128]. Sin embargo, 6 años después, esto es, en el año 2019, se logra por primera vez en el laboratorio construir una red cuasicriatlina octagonal para un gas de bosones de  ${}^{39}K$  [33].

Dada la contraparte experimental del confinamiento de átomos de Bose en redes ópticas cuasicristalinas, se tiene una motivación para estudiar y comprender mejor las propiedades físicas. En especial la existencia de estados localizados en presencia de desorden o imperfección estructural en estas geometrías. Es importante mencionar que a la fecha no se han explorado el efecto de desorden o imperfección en gases cuánticos confinados en redes cuasicristalinas.

### 6.2. Potenciales de red óptica cuasicristalinos

Consideremos un gas de Bose débilmente interactuante confinado en un potencial óptico, este potencial es provocado por diferentes haces láser y que generan una geometría cuasicristalina [35], esto es, la forma de la red óptica cuasicristalina con simetría pentagonal está dada por la expresión

$$V(\mathbf{r}) = V_0^{\delta} \left| \sum_{i=0}^4 e^{i2\mathbf{G}_i \cdot \mathbf{r}} \right|^2, \tag{6.1}$$

donde los vectores  $\mathbf{G}_i = [\cos(\frac{2\pi}{5}i), \sin(\frac{2\pi}{5}i)], \mathbf{r} = (x, y), V_0^{\delta} = v_0 (1 + \delta(x, y))$  y  $v_0 = -0.24$  con una profundidad total de  $V_0 = 6E_R$ .

En tanto que para una red cuasicristalina octagonal, esto es n = 8, el potencial creado en el laboratorio resulta de la expresión [33]

$$V(\mathbf{r}) = V_0^{\delta} \sum_{i=1}^4 \cos^2\left(3\frac{\mathbf{G}_i}{2} \cdot \mathbf{r}\right),\tag{6.2}$$

donde los vectores  $\mathbf{G}_1 = (1,0), \ \mathbf{G}_2 = (0,1), \ \mathbf{G}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1), \ \mathbf{G}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1).$  Una amplitud  $V_0^{\delta} = v_0 (1 + \delta(x,y))$  y  $v_0 = 1.5$ , con una profundidad total de  $V_0 = 6E_R$ .

El desorden es introducido de la misma manera que en las redes periódicas, esto es, el desorden es generado a través de una función  $\delta(x, y)$  que toma valores aleatorios en un intervalo  $[-\delta_{min}, \delta_{max}] = \delta(x, y)$  en cada punto (x, y). Si de los potenciales de las ecuaciones (6.1) y (6.2) se toma un corte en el eje x, sin desorden, esto es,  $\delta(x, y) = 0$ , se puede observar de la figura 6.2 que la red muestra pozos de potencial que no exhiben periodicidad, pero sí un arreglo con una estructura con patrones pentagonales y octagonales. Dichos potenciales ópticos generados por las ecuaciones (6.1), y (6.2) corresponden a funciones cuasiperiódicas.

## 6.3. Perfiles de densidad para redes cuasicristalinas

A partir de la motivación experimental arriba descrita y de las correspondientes expresiones matemáticas para los potenciales cuasicristalinos. Ahora determinemos los perfiles de densidad considerando el efecto del desorden en los potenciales cuasicristalinos. Como antes, con la ayuda del método de tiempo imaginario se estudiaron los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii (4.30) para redes cuasicristalinas con simetría pentagonal y octagonal. Como se detalla en el capítulo



Figura 6.2: Ilustración de los potenciales con un corte en y = 0 para las redes ópticas cuasicristalinas a desorden cero, (a) octagonal (b) pentagonal.

anterior, una vez obtenido el estado estacionario por medio de la función de onda  $\psi(x, y)$ , se está interesado en averiguar los perfiles de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$ . Consideremos primeramente a los potenciales de redes cuasicristalinos con desorden igual a cero, esto es,  $\delta(x, y) = 0$ .



**Figura 6.3:** (a) Potencial de red óptica cuasicristalino, esto es, red pentagonal 6.1,  $\delta(x, y) = 0$ a desorden cero para aproximadamente 1700 sitios. (b) Perfil de densidad  $\rho(x, y) =$  $|\psi(x, y)|^2$  obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii con el algoritmo de tiempo imaginario. Las regiones obscuras corresponden a los mínimos y las regiones más brillantes corresponden a los máximos de la función.

En la parte (a) de la figura 6.3 se ilustra el potencial (6.1) que modela a un cuasicristal con eje de rotación n = 5, esto es, un cuasicristal pentagonal. En la parte (b) de la misma figura se ilustra el perfil de densidad obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii. Finalmente en la parte (a) de la figura 6.4 se ilustra el potencial (6.2) que modela a un cuasicristal con eje de rotación n = 8, esto es, un cuasicristal octagonal. En la parte (b) de la figura 6.4 se ilustra el perfil de densidad obtenido del estado estacionario de la ecuación de Grooss-Pitaevskii para el potencial con simetría octagonal. En ambos casos el parámetro de la interacción corresponde al anteriormente utilizado, esto es, el valor de  $g_{2D} = 0.01 \frac{\hbar^2}{m}$ .



**Figura 6.4:** (a) Potencial de red óptica cuasicristalino, esto es, red octagonal 6.2,  $\delta(x, y) = 0$  a desorden cero para aproximadamente 1700 sitios. (b) Perfil de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$  obtenido del estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii con el algoritmo de tiempo imaginario. Las regiones obscuras corresponden a los mínimos y las regiones más brillantes corresponden a los máximos de la función.

De los perfiles de densidad a desorden cero se puede concluir que la densidad del superfluido obedece la simetría de las redes cuasicristalinas, esto es, la densidad de superfluido se localiza en los mínimos absolutos y mínimos locales que existen en toda la red y siguen el patrón del eje de rotación correspondiente a cada red cuasicristalina.

## 6.4. Cuantificación de estados localizados en redes cuasicristalinas

Una vez que se conocen los perfiles de densidad para la red pentagonal y octagonal a desorden cero. Ahora se procede a determinar los perfiles de densidad para diferentes magnitudes de desorden. En principio se tomarán los mismos intervalos de desorden que se consideraron para las redes ópticas periódicas, esto es,  $\delta = [0.1, 0.9]$ . En otras palabras, el desorden equivale a tomar el 10% hasta el 90% del valor de V(x, y) que toma en cada punto de la malla que define al potencial y mostrar si exite el fenómeno de localización en este nuevo tipo de geometrías. Estas geometrías se han logrado implementar en el laboratorio para confinar gases de Bose [33, 34, 35]. En la figura 6.5 se ilustran de los perfiles de densidad  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$ , obtenidos de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para los potenciales cuasicristalinos (6.1) y (6.2) con desorden. Estos perfiles de densidad corresponden para una sola realización de la magnitud de desorden, cuyos valores son  $\delta = 0.2, 0.4, 0.8$ .



**Figura 6.5:** Perfiles de densidad para las redes ópticas cuasicristalinas, pentagonal (n = 5) y octagonal (n = 8) correspondientes para una sola realización de la magnitud de desorden, cuyos valores son:  $\delta = 0.2, 0.4, 0.8$  y para aproximadamente 1700 sitios. Las regiones brillantes corresponden al máximo de la densidad mientras que las regiones negras corresponden a una ausencia de superfluido

El comportamiento de los perfiles de densidad correspondientes para las redes cuasicristalinas tiene un comportamiento cualitativo análogo que el asociado a las redes ópticas periódicas, esto es, a medida que se incrementa la magnitud del desorden la densidad de partículas se va acumulando en cierto número de sitios, es decir, la densidad superfluida se localiza en algunos sitios de la red cuasicristalina siguiendo la geometría de la red misma.

#### 6.4.1. Inverso de la razón de participación o IPR

Una vez obtenido el comportamiento cualitativo de las redes cuasicristalinas con diferentes magnitudes de desorden. Ahora se desea cuantificar y determinar qué red cuasicristalina es más susceptible de exhibir estados localizados. Se proponen dos nuevas observables para determinar el grado de localización del sistema. La primera es el inverso de la razón de participación o IPR (*inverse participation ratio*), la cual para un sistema continuo está definida como [129]

$$IPR(i) = \sum_{j} \int |\psi_{i,j}(x,y)|^4 dx dy, \qquad (6.3)$$

donde  $\psi_{i,j}(x, y)$  es la amplitud de la i-esima función de onda en el j-esimo sitio. El IPR cuantifica el inverso del número de sitios de red con la función de onda que está distribuida, en otras palabras, el IPR mide cuantos sitios están ocupados por la función de onda.

Se desea calcular la integral (6.3) para cada amplitud de la función de onda en los sitios que definen a cada red cuasicristalina. Para acotar los límites de integración, se utiliza como referencia las llamadas regiones de Voronoi [130] correspondientes a cada red cuasicristalina. A continuación, se dará una definición de qué es una región de Voronoi, dado que tiene un gran uso dentro de diferentes áreas de la física [131].

Dado un conjunto de puntos  $\{p_1, p_2, \dots p_n\}$  en el plano que llamaremos sitios, se denominará la celda de Voronoi  $\nu(p_i)$  para  $p_i$ , como el conjunto de puntos q en el plano que están más cerca de  $p_i$  que de cualquier otro sitio. Es decir la celda de Voronoi  $p_i$  se define como

$$\nu(p_i) = \{q, \|p_iq\| < \|p_jq\|, \forall j \neq i\},$$
(6.4)

donde ||pq|| denota la distancia Euclídeana entre los puntos  $p \ge q$ . Todo punto del plano queda asociado a algún  $p_i$ ; en otras palabras, la subdivisión en el plano formada por subregiones tales que cada región i es el conjunto de puntos más cercanos a  $p_i$  que cualquiera de los  $p_j$  para  $j \neq i$ , estos forman conjuntos que cubren el plano y esto es llamado una teselación.

En las ecuaciones (6.1) y (6.2) caracterizan a un potencial de red óptica cuasicristalino con geometría pentagonal y octagonal. Definiremos la red de Voronoi de la red pentagonal y octagonal como los valores que siguen los mínimos absolutos, y mínimos locales que toman estos potenciales que forman a la red cuasicristalina. Los mínimos locales se refieren al hecho que en dichos puntos el potencial toma un valor mínimo, que es crucial en la definición propia de la red, pero no son los mínimos absolutos que constituyen la red en cuestión. En la figura 6.6 se ilustra la red de Voronoi de las redes ópticas cuasicristalinas con órdenes de rotación (n = 5) y (n = 8). Una vez que se conoce la red de Voronoi, se calculará el IPR (6.3), limitado



Figura 6.6: Red de Voronoi para las redes cuasicristalinas de aproximadamente 1700 sitios, en la parte izquierda corresponde para la red pentagonal (n = 5) y la parte derecha para la red octagonal (n = 8).

por la región de Voronoi que define la red cuasicristalina y se cuantificará el grado de localización para las diferentes magnitudes de desorden y se tomará un promedio correspondiente para las diferentes realizaciones que modelan una misma magnitud de desorden que existe en las redes cuasicristalinas.

Para saber si el IPR es una buena observable, se realizó el cálculo del IPR para la red más sencilla que se utiliza en este trabajo, esto es, la red cuadrada. Empezando para desorden cero correspondiente para la red cuadrada. Este resultado se ilustra en la parte izquierda de la figura 6.7 mientras que en la parte inferior se encuntra el valor del IPR acotado en cada celda de Voronoi. La manera de cuantificar el valor del IPR es por medio de un histograma, esto es, en el eje de las ordenadas se muestra el logaritmo del número de sitios que toman cierto valor del IPR, mientras que en el eje de las abscisas se encuentra el valor del IPR. Se puede apreciar en la parte izquierda de la figura 6.7 que el valor del IPR es el mismo para todos los sitios, excepto en las fronteras.

En la figura 6.8 se ilustra el valor del IPR que toma en cada celda de Voronoi correspondiente para la red cuadrada conforme se aumenta la magnitud del desorden. La figura 6.8 ilustra una sola realización para cada magnitud de desorden. Como se había mencionado en los capítulos anteriores se está interesado en valores promedios de las observables para cuantificar la localización del sistema debido al desorden. Ahora, se calcula el IPR promedio de un total de 50 realizaciones diferentes para una misma magnitud de desorden para la red cuadrada.



Figura 6.7: Histograma del IPR para la red cuadrada, octagonal, y pentagonal a desorden cero con sus respectivos diagramas de Voronoi.

En la figura 6.9 se ilustra el valor promedio de 50 realizaciones diferentes de histogramas correspondientes al IPR promedio y diferentes intervalos de de desorden. En el histograma promedio de la figura 6.9 se puede apreciar que existe un valor crítico de desorden  $\delta_c \approx 0.3$ , en el cual el sistema sufre la transición a la localización y para valores mayores a  $\delta > 0.4$ , el sistema ya está localizado. Este resultado es congruente con las anteriores observables con las que se describió la localización, esto es, la fracción de picos  $p_f$  y las alturas promedio. Dado que el método funciona y describe perfectamente la transición a la localización del sistema para una red cuadrada, se procederá con las redes cuasicristalinas.

Primeramente se calculará el IPR en cada región de Voronoi que define a la red cuasicristalina pentagonal y octagonal cuando no existe desorden. El resultado se ilustra en la parte central y derecha de la figura 6.7, como se puede apreciar en la figura, existe una distribución no homagénea de los valores del IPR en cada región de Voronoi para las diferentes redes cuasicristalinas, esto es, diferentes comportamientos para las redes pentagonal y octagonal.

Agregando diferentes magnitudes de desorden, esto es, de un 10 % a un 90 % de desorden en el potencial y obteniendo el estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii para las redes cuasicristalinas desordenadas. Del estado estacionario se cálcula el IPR en cada celda de Voronoi para las diferentes redes cuasicristalinas.



Figura 6.8: Valor del IPR en cada celda de Voronoi para la red cuadrada y una sola realización de desorden, con diferentes magnitudes de desorden. Los colores más brillantes corresponden a un máximo del valor del IPR, mientras que los colores obscuros corresponden a una ausencia del valor del IPR.

De manera ilustrativa en las figuras 6.10 y 6.11 se muestran los valores del IPR en cada celda de Voronoi correspondientes para una sola realización de la magnitud de desorden en las redes cuasicristalinas con eje de rotación n = 5 y n = 8.

Tomando diferentes realizaciones para una misma magnitud de desorden, se cálcula el estado estacionario y el IPR promedio de 50 realizaciones diferentes de desorden. Este resultado se ilustra en forma de histogramas en las figuras 6.12 y 6.13, esto es, cada histograma es el resultado del promedio sobre un ensemble de 50 realizaciones diferentes de histogramas asociados a una misma magnitud de desorden. En el eje de las abscisas se encuentra el valor del IPR en los diferentes sitios que forman a las redes cuasicristalinas, mientras que en el eje de las ordenadas se muestra el logaritmo del número total del valor del IPR en dichos sitios. Los histogramas se construyeron tomando el valor máximo del IPR, que toma en una región de Voronoi por cada



Figura 6.9: Histogramas promedio del IPR para la red cuadrada con diferentes magnitudes de desorden y un total de 40 compartimientos.

realización de desorden, y se tomaron un total de 40 compartimientos.

Al comparar los histogramas promedio de la redes cuasicristalinas, pentagonal y octagonal para las mismas magnitudes de desorden. Se puede apreciar que la red pentagonal sufre una transición a la localización para un valor de desorden de  $\delta_c \approx 0.2$ , mientras que para la red octagonal el valor crítico de desorden es  $\delta_c \approx 0.4$ . En otras palabras, la red con eje de rotación n = 5 es más suceptible a la localización conforme se va aumentado la magnitud del desorden, esto es, la red con eje de rotación n = 8 es mejor conductora, porque existe una mejor distribución de los átomos en los sitios y esto es descrito por la función de onda a la cuarta potencia.

Como se mostró en el capítulo cinco, dos observables que ayudaron a describir la transición de si el sistema está localizado o no fueron la fracción de picos  $p_f$  y las alturas promedios  $\langle h \rangle$  de los picos en los perfiles de densidad. Se procederá a realizar lo mismo con las redes cuasicristalinas. Tomando el criterio de sólo admitir los picos



Figura 6.10: Valor del IPR en cada celda de Voronoi para la red pentagonal y una sola realización de desorden, con diferentes magnitudes de desorden. Los colores más brillantes corresponden a un máximo del valor del IPR, mientras que los colores obscuros corresponden a una ausencia del valor del IPR.

mayores al 5 % del pico más alto en el perfil de densidad.

En la figura 6.14 se ilustra las alturas promedios y la fracción de picos para la red con eje de rotación n = 5. En la figura 6.15 se ilustra las mismas observables con un eje de rotación n = 8 en función del desorden. Para la red pentagonal se muestra que la fracción de picos sufre una transición abrupta a la localización para un valor crítico del desorden de  $\delta_c \approx 0.2$ . Sin embargo, para la red octagonal esta transición es de forma suave y para un valor crítico de  $\delta_c \approx 0.4$ . Comparando estos valores críticos donde se sufre la transición a la localización con los histogramas promedios del IPR para las diferentes redes cuasicristalinas. Se muestra que el IPR y la fracción de picos muestran la misma información para describir si existe localización en el sistema.

Finalmente si se compara las figuras  $6.14 ext{ y } 6.15$ , se muestra que la red octagonal es más persistente a mostar evidencia de localización conforme se aumenta la magnitud



Figura 6.11: Valor del IPR en cada celda de Voronoi para la red octagonal y una sola realización de desorden, con diferentes magnitudes de desorden. Los colores más brillantes corresponden a un máximo del valor del IPR, mientras que los colores obscuros corresponden a una ausencia del valor del IPR.

del desorden.

### 6.4.2. Entropía de Shannon

La segunda observable para cuantificar si el sistema está localizado es la entropía de información de Shannon. Esta nueva observable está definida de la siguiente manera [132, 133, 134, 135, 136].

Sea una distribución de probabilidad en el espacio contiunuo  $\rho(x, y)$ , en este caso  $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$  corresponde a la densidad de probabilidad de encontrar a las partículas en el espacio. La entropía de información de Shannon en el espacio de coordenadas está definida por



Figura 6.12: Histogramas promedio para la red cuasicristalina pentagonal, con sus respectivos valores de desorden  $\delta$ , con un total de 40 compartimientos.

$$S_{\rho} = -\int \rho(x, y) \ln \rho(x, y) dx dy, \qquad (6.5)$$

donde  $\int \rho(x, y) dx dy = 1$ . Sea  $\psi(k_x, k_y)$  la transformada de Fourier de  $\psi(x, y)$ . La entropía de información de Shannon correspondiente en el espacio de momentos está definida por

$$S_{\gamma} = -\int \gamma(k_x, k_y) \left( \ln \gamma(k_x, k_y) \right) dk_x dk_y, \tag{6.6}$$

donde  $\gamma(k_x, k_y) = |\psi(k_x, k_y)|^2$ , con  $\int \gamma(k_x, k_y) dk_x dk_y = 1$ .

El significado físico para estas dos observables es el siguiente. La entropía de Shannon en el espacio de posiciones (6.5) mide la incertidumbre de encontrar un pico localizado, esto es, si  $S_{\rho}$  es grande, la incertidumbre de encontrar un pico localizado, es muy pequeña ya que la incertidumbre es muy grande; cuanto más baja es esta



Figura 6.13: Histogramas promedio para la red cuasicristalina octagonal, con sus respectivos valores de desorden  $\delta$ , con un total de 40 compartimientos.

entropía en el espacio de posiciones, más concentrada es la función de onda, en otras palabras, la incertidumbre es más pequeña y más alta es la precisión para predecir la localización del sistema [137]. Por otra parte el significado de la entropía de Shannon en el espacio de momentos (6.6) corresponde a medir la incertidumbre de predecir el momento de las partículas. Si el sistema no está localizado  $S_{\gamma}$  tiene que tomar valores grandes ya que su momento tiene que ser grande pues las partículas estan en moviento. Sin embargo, si el sistema está localizado, el momento de las partículas es muy pequeño, por lo tanto  $S_{\gamma}$  tiene que ser diminuto. Cabe resaltar que si una entropía disminuye la otra tendría que aumentar.

En la figura 6.16 se ilustra los valores promedio de un total de 50 realizaciones diferentes para una misma magnitud de desorden de las entropías de Shannon  $S_{\rho}$ y  $S_{\gamma}$ , para las redes cuadrada y cuasicristalinas. Los valores de la entropía de  $S_{\rho}$ está normalizada al valor de la entropía que toma a desorden cero. Mientras que  $S_{\gamma}$ es normalizada al valor absoluto que toma la entropía en el espacio de momentos a



**Figura 6.14:** Altura promedio  $\langle h \rangle$  y fracción de picos  $p_f$  en función del desorden  $\delta$  en unidades de  $E_R$  para apróximadamente 1700 sitios para la red cuasicristalina con eje de rotación n = 5 y  $V_0 = 6E_R$ . Las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones de  $\langle h \rangle$  y  $p_f$ .

desorden cero. Se observa que el valor promedio de la entropía  $S_{\rho}$  va disminuyendo conforme se va aumentando la magnitud del desorden para ambas redes, siendo más persistente al cambio la red cuasicristalina octagonal. Tomando la interpretación de la entropía de Shannon de  $S_{\rho}$ , si este valor va disminuyendo esto implica que el sistema se va localizando. En otras palabras, la incertidumbre de encontrar un pico localizado va disminuyendo conforme se va aumentando el desorden, lo cual se ilustra claramente en la parte izquierda de la figura 6.16. Por otra parte, el valor de la entropía de  $S_{\gamma}$  va aumentando conforme se va incrementando la magnitud del desorden, esto quiere decir, que la incertidumbre de encontrar a las partículas con momento va disminuyendo. En otras palabras, si el momento va disminuyendo, las partículas se van localizando en las redes ópticas.

## 6.5. Espectro de energía de estados localizados en redes cuasicristalinas

Como se mostró en las secciones anteriores, existe localización en las redes cuasicristalinas cuando se incrementa la magnitud del desorden, siendo más propensa



**Figura 6.15:** Altura promedio  $\langle h \rangle$  y fracción de picos  $p_f$  en función del desorden  $\delta$  en unidades de  $E_R$  para apróximadamente 1700 sitios para la red cuasicristalina con eje de rotación n = 8 y  $V_0 = 6E_R$ . Las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones de  $\langle h \rangle$  y  $p_f$ .

a la localización la red pentagonal. Ahora queremos mostrar cuáles son los efectos del desorden en el espectro de energía de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii con un potencial cuasicristalino desordenado. Recordando la energía en función de la magnitud del número de onda k es

$$\epsilon(k) = \frac{1}{2} \left| \int d^2 r e^{ik \cdot r} \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \nabla \rho(r) \right|^2 + \left| \int d^2 r e^{ik \cdot r} \sqrt{V}_{ext}(r) \rho(r) \right|^2 + \frac{1}{2} \left| \int d^2 r e^{ik \cdot r} \sqrt{g}_{2\mathrm{D}} |\rho(r)|^2 \right|^2.$$
(6.7)

De la misma forma que en el caso de las redes periódicas, se tomó un promedio sobre las diferentes realizaciones de desorden para el cálculo del espectro de energía (6.7) para cada red cuasicristalina. En la figura 6.17 se ilustra la magnitud del espectro de energía  $\epsilon(k_r)$  vs  $k_r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ , para las dos redes cuasicristalinas pentagonal y octagonal cuando no existe desorden (parte izquirda) y el promedio de 50 realizaciones diferentes del espectro de energía cuando se tiene una magnitud del 90 % de desorden (parte derecha). En el recuadro superior de cada panel de la figura 6.17 se aprecia



**Figura 6.16:** Valores promedio de las diferentes entropías  $S_{\rho}$ ,  $S_{\gamma}$  en función de la magnitud del desorden. Las barras de error están asociadas a la desviación estandar del valor promedio de las 50 realizaciones de las entropías  $S_{\rho}$ ,  $S_{\gamma}$  debido al desorden, para las redes cuasicristalinas con eje de rotación n = 5, n = 8 y la red cuadrada n = 2.

el espectro de energía en un intervalo de  $-\pi \leq k_x, k_y \leq \pi$ . El espectro de energía en función de  $k_r$  muestra lo siguiente: cuando no existe desorden aparecen picos perfectamente localizados y éstos son originados por la simetría de la red cuasicristalina. Se puede notar en la gráfica del recuadro superior de cada figura que existe una simetría de 10 picos para la red pentagonal y una simetría de 8 picos para la red octagonal, esto es congruente con los patrones de difracción de los cuasicristales reportados en la literatura [138] [139]. Tomando un valor alto de la magnitud de desorden, en este caso, un valor del 90 % de desorden. Con este valor el sistema ya se encuentra localizado y se calcula el espectro de energía promediado por cincuenta realizaciones diferentes para el desorden mencionado anteriormente. El resultado en el espectro de energía cuando existe mucho desorden para la red cuasicristalina con eje de rotación n = 5, muestra una distribución densa y continua, pero se mantiene la forma de los picos. Sin embargo, para la red cuasicristalina con eje de rotación n = 8 la simetría del espectro se preserva, esto es, los picos no desaparecen aún cuando existe mucho desorden.

Al comparar los dos espectros de energía, tanto el de la red con eje de rotación n = 5 y la red con eje de rotación n = 8, se puede concluir que el efecto del desorden es más propenso en la red pentagonal que en la red octagonal. Este resultado se puede comparar con los valores del IPR, fracción de picos  $p_f$ , alturas promedios  $\langle h \rangle$  de la densidad y la entropía de Shannon  $S_{\rho}$  y  $S_{\gamma}$ . Estas observables indican los mismos indicios de que la red pentagonal es más propensa a sufrir la localización más rápido que con respecto a la red octagonal para los mismas magnitudes de desorden.



**Figura 6.17:** Espectro de energía en el espacio recíproco para la red cuasicristalina con eje de rotación n = 5 parte superior, y red cuasicristalina con eje de rotación n = 8 parte inferior. La columna izquierda corresponde a una magnitud de desorden  $\delta = 0$ , y la columna derecha para el espectro de energía promedio para una magnitud de desorden  $\delta = 90\%$  de V(x, y). El recuadro superior en cada panel muestra la correspondiente gráfica de la densidad del espectro de energía en un intervalo de  $-\pi \leq k_x, k_y \leq \pi$ .

# Capítulo 7

## Conclusiones

En este trabajo se estudiaron los estados estacionarios de un gas de Bosones débilmente interactuante y confinado en redes ópticas desordenadas en dos dimensiones. En particular se analizaron geometrías cristalinas y cuasicristalinas. En lo que respecta a redes con simetría cristalina, se investigó la influencia del desorden en el potencial con las redes periódicas con números de coordinación z = 3 (red hexagonal), z = 4 (red cuadada) y z = 6 (red triangular). En relación con las redes con estructura cuasicristalina se consideraron aquellas con ejes de rotación n = 5 (red pentagonal) y n = 8 (red octagonal). Fundamentalmente se encontró que la influencia del desorden en las diferentes geometrías es la existencia de estados localizados, como una transición suave, o *crossover*, a medida que aumenta la magnitud del desorden. La caracterización de los estados localizados se realizó mediante un análisis sistemático a través de simulaciones numéricas a nivel de campo medio, esto es, utilizando la ecuación de Gross-Pitaevskii. Las observables que se estudiaron en este trabajo fueron valores promedios de la fracción de picos  $(p_f)$  y las amplitudes de las alturas (h), obtenidas directamente de los perfiles de densidad en función de la magnitud del desorden. Además se estudiaron los espectros de energía del estado base, determinados por la transformada de Fourier de la energía asociada al estado estacionario. Para el análisis numérico, se consideraron redes de tamaño  $\Omega \approx 1000$  sitios. Para las redes periódicas se consideró una misma constante de red y una magnitud de interacción de  $g_{2D} = 0.01 \frac{\hbar^2}{m}$ . El intervalo en el cual se varió la magnitud de desorden fue  $\delta \in [0,1]E_R$ . Se realizó para las redes periódicas un análisis de tamaño finito, considerando los efectos del tamaño del sistema en el rango  $5 \times 10^2 \leq \Omega \leq 5 \times 10^3$ .

En este trabajo se encontró que la localización en redes ópticas en dos dimensiones se produce como un cruce suave para redes con número de coordinación z = 4 cuadrada y z = 6 triangular. Por el contrario, la red con número de coordinación z = 3hexagonal, no exhibe tal localización para el mismo valor de profundidad de red, esto es,  $V_0 = 12E_R$ . Este comportamiento puede atribuirse a la propiedad asociada correspondiente a la energía de tunelamiento (3.50), esto es, la energía de tunelamiento es más grande para la red hexagonal que para la red cuadrada y triangular. Se realizó un análisis de tamaño finito, esto es, se incrementó el número de sitios que forman a las redes ópticas periódicas. Se descubrió que, a partir de una cierta amplitud de desorden, el sistema exhibe una localización parcial manifestándose como islas de densidad desconectadas entre sí. El análisis de la densidad muestra que ésta se satura a un valor constante como función de la magnitud del desorden y el tamaño del sistema. La predicción original establecida por Anderson no se establece por completo. Para las redes ópticas con desorden existe una interacción débil entre las partículas y para valores arbitrarios de desorden no se encuentra un solo pico de localización. Por lo tanto, podemos concluir que No existe localización de Anderson en sistemas bidimensionales finitos.

Sin embargo, la localización existe en pocos sitios y se encuentra para grandes magnitudes del desorden. Para dar una respuesta a la segunda pregunta planteada en este trabajo ¿cómo afecta la geometría y el desorden en la conducción de los átomos en redes bidimensionales finitas?, se dio seguimiento a los valores de desorden en las observables de fracción de picos  $(p_f)$  y las alturas (h) para las redes ópticas periódicas. Se identificaron las siguientes regiones para las redes con número de coordinación z = 4 y z = 6. Para valores de  $\delta \lesssim 0.3$  el sistema no se localiza, existen contribuciones en todos los sitios de la red. Para valores de  $0.3 \leq \delta \leq 0.6$  el sistema sufre una transición suave a la localización, esto es, el sistema se fragmenta en islas. Finalmente para valores de  $\delta \gtrsim 0.6$  el sistema se localiza de manera completa, esto es, la densidad del condensado colapsa en unos cuatos sitios de la red óptica de manera aleatoria. Por lo tanto, el transporte se suprime fuertemente para cualquier geometría de red para una magnitud de desorden suficientemente grande. El análisis también permitió concluir que el número de coordinación determina qué tan rápido se produce la transición suave a medida que aumenta el tamaño del sistema, siendo la red triangular la primera en la que el transporte se inhibe contra las redes cuadrada y hexagonal. Es interesante observar que, aunque la red hexagonal no constituye una red de Bravais, ya que está compuesta por la superposición de dos sub redes triangulares. Los resultados de este trabajo concuerdan con el hecho de que la red hexagonal es un buen conductor intrínseco.

Del análisis del espectro de energía para las redes periódicas se puede concluir que a desorden cero el espectro muestra una simetría la cual está en concordancia con los sistemas experimentales [30, 91, 113] de gases de Bose confinados en este tipo de potenciales periódicos. La influencia del desorden consiste en remplazar una distribución con picos por una continua, en otras palabras, los espectros de energía del sistema con desorden se componen de niveles continuos de energía originados por el efecto del desorden.

Finalmente, se estudió también el efecto de desorden estructural en redes de tipo cuasicristalinas. En particular, las redes consideradas para dicho análisis fueron pentagonal y octagonal y son relevantes a la luz de los recientes resultados experiConclusiones

mentales en los que se ha conseguido producirlas en el laboratorio. La investigación en este nuevo tipo de redes ópticas no periódicas consistió en analizar dos observables como función de la magnitud de desorden. Análogo al caso de las redes cristalinas, se calcularon valores promedios de las observables en cuestión para determinar la influencia de desorden en la localización del sistema. Las nuevas observables fueron el IPR (*inverse participation ratio*), y la entropía de Shannon en el espacio de posiciones y de momentos. Ambas observables permiten identificar que el sistema también sufre una transición a la localización. Ambas observables muestran que la red pentagonal es más susceptible a tener una localización conforme se va aumentando la magnitud del desorden, por lo tanto la red cuasicristalina octagonal es mejor conductora que la pentagonal en el ámbito de redes cuasicristalinas.

En forma análoga al estudio realizado para las redes con geometría cristalina, se determinó el espectro de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para las redes cuasicristalinas. A partir de dicho análisis se encontró que el efecto del desorden y su influencia en la generación de estados localizados es más prominente en la red pentagonal que en la red octagonal. Esta conclusión emerge del hecho que en el caso de la red pentagonal el espectro de energía es esencialmente continuo, preservando siempre la herencia de la estructura pentagonal. Sin embargo, para la red octagonal el espectro de energía permanece siempre puntal, incluso para una magnitud de desorden máxima. En resumen, el efecto del desorden siempre se ve más reflejado en la red con eje de rotación n = 5. La conclusión en este caso es la red con eje de rotación n = 8 ofrece una mayor resistencia a la generación de estados localizados asociados a efectos de desorden.

## Capítulo 8

# Apéndice

En este apéndice mostraremos los resultados de los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii en una dimensión. Los potenciales de confinamiento, fueron un potencial armónico, una red óptica y la combinación del potencial armónico más la red óptica en una dimensión.

### 8.1. Estados estacionarios en 1D

En esta sección se mostrarán los resultados de los estados estacionarios de la ecuación tras resolverla por el método de tiempo imaginario, así como los perfiles de densidad para diferentes potenciales de confinamiento en una dimensión, estos potenciales son, potencial armónico, potencial red óptica y finalmente para un potencial armónico más una red óptica en una dimensión.

#### 8.1.1. Potencial armónico

De manera natural los primeros condensados de Bose-Einstein que se lograron realizar fueron por medio de un potencial de atrapamiento armónico, posteriormente se logró la implementación de redes ópticas tanto en 3 dimensiones como en una dimensión [80]. Como se describe en el capítulo cuatro, usando el método de tiempo imaginario, junto con el método de Crank-Nicholson se resuelve la ecuación de Gross-Pitaevskii para un potencial armónico, en una dimensión, esto es,

$$U(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2.$$
 (8.1)

En la figura 8.1 se ilustran los estados estacionarios y los perfiles de densidad para el potencial armónico, para diferentes frecuencias  $\omega$ , y una interacción fija. En la figura 8.2 se ilustran los estados estacionarios para una frecuencia fija y una interacción variable.



Figura 8.1: Potencial armónico para diferentes valores de frecuencias, con sus respectivos estados estacionarios y perfiles de densidad, los valores de  $\omega$  estan dentro del intervalo [1, 10].



Figura 8.2: Potencial armónico para una frecuencia fija  $\omega$ , con sus respectivos estados estacionarios y perfiles de densidad, pero para diferentes valores de la interacción entre partículas.

Variando la frecuencia de la trampa  $\omega$ , se demuestra que es una forma equivalente de manipular la interacción entre partículas confinadas en la trampa armónica, esto es, frecuencias mayores es equivalente a disminuir la interacción entre las partículas en la trampa armónica. Como se ilustra en la figura 8.2 si la interacción es muy déblil el resultado del estado estacionario debe aproximarse a una gaussiana [106], pero si la interacción es muy grande, la energía cinética es despreciable, esto es conocido como la aproximación de Thomas-Fermi la cual es [106]

$$n(x) = |\Psi(x)|^2 = (\mu - U(x))/U_0, \tag{8.2}$$

donde  $\mu$  es el potencial químico y  $U_0$  es la interacción y el resultado es una parabola invertida para el perfil de densidad, lo cual se observa en la figura 8.2.

#### 8.1.2. Potencial red óptica

Ahora bien el confinamiento de gases de Bose ultrafríos se ha logrado en sistemas unidimensionales, como se describió en los capítulos anteriores estas redes estan formadas por el siguiente tipo de potencial

$$U(x) = A_0 \sin^2(kx),$$
(8.3)

donde  $A_0$  es la amplitud del potencial, y  $k = \frac{\pi}{d}$  donde d es la periodicidad de la red.

Al resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii en una dimensión para el potencial (8.3), y encontrar los estados estacionarios y perfil de densidad para una interacción  $g_{1D} = 0.01\hbar^2/m$  entre las partículas, estas se logran localizar en cada uno de los sitios de la red en una dimensión. En la figura 8.3 se ilustran dichos resultados.



Figura 8.3: Potencial tipo red óptica en una dimensión con su estado estacionario y su perfil de densidad para una interacción entre partículas  $g_{1D} = 0.01\hbar^2/m$ .

### 8.1.3. Potencial armónico mas red óptica

Una vez ya caracterizados los estados estacionarios de un potencial armónico y una red óptica en una dimensión. Ahora nos preguntamos por la forma de los estados estacionarios ¿cuándo se superpone al potencial armónico una red óptica?, esto es, la naturaleza del potencial es:

$$U(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 + A_0 \sin^2(kx) + B_0 \sin^2(kx).$$
(8.4)

Solamente il<br/>ustraremos los resultados para un potencial armónico con frecuencia<br/>  $\omega=0.01$ más red óptica, esto es,

$$U(x) = \frac{\omega x^2}{4} + 2.34 \sin^2(x) + 24 \sin^2(x).$$
(8.5)

En la figura 8.4 se ilustra los estados estacionarios y los perfiles de densidad para una interacción arbitraria. Modificando la interacción de las partículas, esto es,  $g_{1D} = 0.01\hbar^2/m$  pero mantenemos los mismos parámetros del potencial de la ecuación 8.5, los resultados se ilustran en la figura 8.5. La intensidad de la interacción juega un papel importante ya que a interacciones lo suficientemente bajas las partículas se mantienen en el centro de la trampa, mientras que si las interacciones son lo suficientemente grandes las partículas se encuentran situadas en los sitios que forman la red, esto se puede ilustrar más claramente en la figura 8.6.



Figura 8.4: Potencial en una dimensión más su estado estacionario y su perfil de densidad, para una interacción  $g_{\rm 1D}=20\hbar^2/m$ 



**Figura 8.5:** Potencial en una dimensión más su estado estacionario y su perfil de densidad para una interacción  $g_{1\rm D} = 0.01\hbar^2/m$ .



Figura 8.6: Perfil de densidad para el potencial 8.5, para diferentes valores de la interacción.

## Bibliografía

- Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D., Solid State Physics, Saunders, (1976). 1, 6.1
- [2] H. Kamerlingh Onnes, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, 124c (1911.) 1
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer. Physical Review 108 1175 1204.
- [4] Anderson P. W., Phys. Rev., **109** 1492 (1958).
- [5] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 4th. edition, Academic Press, San Diego, (1995.) 1
- [6] Hefei Hu, A. Strybulevych, J. H. Page, S. E. Skipetrov and B. A. van Tiggelen. *Nature Physics* 4 945-948 (2008.) 1, 1, 2.4, 5, 5.1.6
- [7] Dalichaouch R., Armstrong J. P., Schultz S., Platzman P. M. and McCall S. L.Nature 354, 53-55 (1991).
- [8] Mordechai Segev, Yaron Silberberg, Demetrios N. Christodoulides, Nature Photonics. 7, 197-204 (2013).
- [9] T. Sperling, W. Buhrer, C. Aegerter and G. Maret Nature Photonics 7, 48 (2013). 1, 4.3.1

- [10] Tal Scwarz, Guy Bartal, Shmuel Fishman and Mordechai Segev, Nature 446, 52-55 (2007). 1
- [11] M. Anderson , J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, y E. Cornell, *Science* 269, 5221 (1995). 1
- [12] B. De Marco y D. Jin , *Science* **285**, 5434 (1999). 1, 2.2

<sup>1</sup> 

<sup>1</sup> 

- [13] J. Lawall, F. Bardou, B. Saubamea, K. Shimizu, M. Leduc, A. Aspect, C. Cohen-Tannoudji, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1915 (1994.)
- [14] J.R. Anglin and W. Ketterle Nature 461, 211-218 (2002). 1
   1
- [15] Billy J, Josse V, Zuo Z, Bernard A, Hambrecht B, Lugan P, Clement D, Sanchez-Palencia L, Bouyer P and Aspect A Nature 453 891-4. (2008).
- [16] Kondov, S. S., McGehee, W. R., Zirbel, J. J. and DeMarco, B. Science 333, 66-68 (2011).
- [17] F. Jendrzejewski, A. Bernard, K. Müller, P. Cheinet, V. Josse, M. Piraud, L. Pezzé, L. Sanchez-Palencia, A. Aspect and P. Bouyer *Nature* 8 398-403 (2012).
  1, 5.1.5, 5.1.5
- [18] G. Roati. et al. Nature 453, 895-898 (2008.) 3.4, 3.4.2, 5.1.5
- [19] Laurent Sanchez-Palencia and Maciej Lewenstein, Nature 6 87-95 (2010).
- [20] McGehee, W.R., Kondov, S.S., Xu, W.Zirbel, J. J. and DeMarco B. Phys. Rev. Lett. 111, 145303 (2013.) 3.4, 3.4.2
  3.4, 3.4.2
  1
- [21] M. Albiez, R. Gati, J. Folling, S. Hunsmann, M. Cristiani and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005.) 1
- [22] M. R. Mattews, B. P. Anderson, P.C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* 83 2498-2501 (1999.) 1
- [23] B. Villaseñor, R. Zamora-Zamora, D. Bernal and V. Romero-Rochín, Phys. Rev. A 89 033611 (2014.) 1
- [24] A. J. Leggett, J. Phys. 412 C7 (1980.) 1
- [25] T.A. Zaleski and T.K. Kopeć J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 50 085006 (2017.) 1
- [26] Jae-yoon Choi, Sebastian Hild, Johannes Zeiher, Peter Schau, Antonio Rubio-Abadal, Tarik Yefsah, Vedika Khemani, David A. Huse, Immanuel Bloch and Christian Gross Science 352 (6293), 1547-1552 (2016). 1, 3.4, 3.4.2, 5, 5.1, 5.1.1, 5.1.6, 5.1.8

- [27] Rudolf Grimm, Matthias Werdemuller and Yurii B. Orchinnikov. Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics 42, 95-170 (2000). 2.1, 2.1, 2.1
- [28] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008) 2.2, 2.2, 2.2, 2.2, 2.3, 5.11
- [29] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. Hansch and I. Bloch, *Nature* 415, 39-44 (2002). 2.2, 2.2, 2.3.1
- [30] C. Becker, P. Soltan-Panahi, J. Kronjager, S. Dorscher, K. Bongs and K. Sengstock, New J. Phys. 12, 065025 (2010). 2.3.2, 2.3.2, 2.3.2, 2.3.2, 2.3.2, 5, 5.1.4, 5.2, 7
- [31] G. Grynberg, B. Lounis, P. Verkerk, J. Y. Courtois, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* 70, 2249 (1993). 2.3.2
- [32] B. Wunsch, F. Guinea, and F. Sols, New J. Phys. 10, 103027 (2008). 2.3.2, 2.3.2
- [33] Konrad Viebahn, Matteo Sbroscia, Edward Carter, Jr-Chiun Yu, and Ulrich Schneider. Phys. Rev. Lett. 122 110404 (2019.) 2.3.2, 6, 6.1, 6.2, 6.4
- [34] Junpeng Hou, Haiping Hu, Kuei Sun, and Chuanwei Zhang. Phys. Rev. Lett. 120 060407 (2018.) 2.3.2, 6, 6.1, 6.4
- [35] L. Sanchez-Palencia and L. Santos Phys. Rev. A 72, 053607 (2005.) 2.3.2, 6, 6.1, 6.2, 6.4
- [36] Charles Kittel. Introducción a la Física del Estado Sólido, Edit. Reverte (1995)
   2.3.2, 3.1, 3.1, 3.2, 6.1
- [37] K. S. Novoselov et al., *Nature* **438**, 197 (2005). 2.3.2
- [38] Yuanbo Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L. Stormer, and Philip Kim, Nature 438, 201 (2005). 2.3.2
- [39] C. Wu, D. Bergman, L. Balents, and S. DasSarma, Phys. Rev. Lett. 99, 070401 (2007.) 2.3.2
- [40] Wang Yao, Shengyuan A. Yang, and Qian Niu, Phys. Rev. Lett. 102, 096801 (2009). 2.3.2
- [41] Z. Chen and B. Wu, Phys. Rev. Lett. 107, 065301 (2011.) 2.3.2
- [42] Lee K L., Gremaud B., Han R., Englert, B. G. and Miniatura C. Phys. Rev. A 80, 043411 (2009.) 2.3.2, 5.1.6, 5.11
- [43] Parvis Soltan-Panahi et al., *Nature Phys.* 7, 434 (2011.) 2.3.2

- [44] Teichmann N. Hinrichis D. and Holthaus M. Eur. Phys. Lett. 91 10004 (2010.)
   2.3.2, 3.5, 3.10
- [45] P. Vignolo, Z. Akdeniz, and M. P. Tosi. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 36 4535 (2003.) 2.4
- [46] U. Gavish and Y. Castin. Phys. Rev. Lett., 95 020401, (2005.) 2.4
- [47] B. Paredes, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Phys. Rev. Lett., 95 140501, (2005).
   2.4
- [48] J.-F. Schaff, Z. Akdeniz, and P. Vignolo. Phys. Rev. A, 81 041604, (2010). 2.4
- [49] B. Gadway, D. Pertot, J. Reeves, M. Vogt, and D. Schneble. *Phys. Rev. Lett.*, 107 145306, (2011).
- [50] G. Roati et al. *Nature* **453** 895-898 (2008).
- [51] M. Modugno New J. Phys. 11 033023 (2009). 2.4
- [52] S. Aubry and G. Andre. Ann. Israel Phys. Soc. **3** 133 (1980).
- [53] D. R. Grempel, S. Fishman, and R. E. Prange. *Phys. Rev. Lett.* 49, 833 (1982).
   2.4.1, 2.4.1, 2.4.2
- [54] Joseph W. Goodman. Speckle Phenomena in Optics: Theory and Applications. Roberts and Co, Englewood, (2007). 2.4.1
- [55] Giulia Semeghini Ph-D Thesis, Ultracold atoms in three-dimensional disorder, Universita Degli Studi Firenze. Florencia, Italia (2015). 2.4.1, 2.4.1
  2.4.1
- [56] D. Clément, A. F. Varón, J. A. Retter, L. Sanchez-Palencia, A.Aspect, and P. Bouyer. New J. Phys., 8 165, (2006). 2.4.2, 2.4.2
  2.9
  2.4.2, 2.4.2
- [57] D. Clément, A. F. Varón, M. Hugbart, J. A. Retter, P. Bouyer,L. Sanchez-Palencia, D. M. Gangardt, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect. *Phys. Rev. Lett.*, 95 170409, (2005). 2.4.2, 2.4.2
- [58] L. Sanchez-Palencia and M. Lewenstein. Nature Phys., 6 87-95, (2010). 2.10
- [59] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort, and M.In-guscio. *Phys. Rev. Lett.*, **95** 070401, (2005).

- [60] C. Fort, L. Fallani, V. Guarrera, J. E. Lye, M. Modugno, D. S. Wiersma, and M. Inguscio. *Phys. Rev. Lett.*, **95** 170410, (2005).
- [61] L. Sanchez-Palencia, D. Clément, P. Lugan, P. Bouyer, and A. Aspect. New J. Phys., 10 045019, (2008).
- [62] L. Sanchez-Palencia, D. Clément, P. Lugan, P. Bouyer, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect. *Phys. Rev. Lett.*, 98 210401, (2007).
- [63] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect. *Nature*, 453 891-894, (2008).
- [64] A. Aspect and M. Inguscio, *Physics Today* 62, 30 (2009). 2.4.2
   2.4.2
- [65] F. Jendrzejewski, A. Bernard, K. Muller, P. Cheinet, V. Josse, M. Piraud, L. Pezzé, L. Sanchez-Palencia, A. Aspect, and P. Bouyer. *Nature Phys.*, 8 398-403, (2012).
- [66] S. S. Kondov, W. R. McGehee, J. J. Zirbel, and B. DeMarco. Science, 334 66-68, (2011).
- [67] L. Sanchez-Palencia and M. Lewenstein. Nature Phys., 6 87-95, (2010).
- [68] B. Deissler, M. Zaccanti, G. Roati, C. DÉrrico, M. Fattori, M. Modugno, G. Modugno, and M. Inguscio. Nature Phys., 6 354-358, (2010).
- [69] B. Deissler, E. Lucioni, M. Modugno, G. Roati, L. Tanzi, M. Zaccanti, M. Inguscio, and G. Modugno. New J. Phys., 13 023020, (2011).
- [70] E. Lucioni, B. Deissler, L. Tanzi, G. Roati, M. Zaccanti, M. Modugno, M. Larcher, F. Dalfovo, M. Inguscio, and G. Modugno. *Phys. Rev. Lett.*, **106** 230403, (2011).
- [71] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort, and M. Inguscio. *Phys. Rev. Lett.*, 98 130404, (2007).
- [72] M. White, M. Pasienski, D. McKay, S. Q. Zhou, D. Ceperley, and B. DeMarco. *Phys. Rev. Lett.*, **102** 055301, (2009).
- [73] D. Dries, S. E. Pollack, J. M. Hitchcock, and R. G. Hulet. *Phys. Rev. A*, 82 033603, (2010). 2.4.2
   2.4.2
- [74] Z. Hadzibabic, P. Kruger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard. Nature, 441 1118-1121, (2006).

- [75] B. Allard, T. Plisson, M. Holzmann, G. Salomon, A. Aspect, P. Bouyer, and T. Bourdel. Phys. Rev. A, 85 033602, (2012).
- [76] M. C. Beeler, M. E. W. Reed, T. Hong, and S. L. Rolston. New J. Phys., 14 073024, (2012).
- [77] M. Robert-de-Saint-Vincent, J.-P. Brantut, B. Allard, T. Plisson, L. PezzA, C. L. Sanchez-Palencia, A. Aspect, T. Bourdel, and P. Bouyer. *Phys.Rev. Lett.*, **104** 220602, (2010). 2.4.2
- [78] L. Pezzé, M. Robert-de-Saint-Vincent, T. Bourdel, J.P. Brantut, B. Allard, T. Plisson, A. Aspect, P. Bouyer, and L. Sanchez-Palencia. New J. Phys., 13 095015, (2011). 2.11
  - 2.4.2
  - 2.4.2
  - 2.4.2
- [79] M. Greiner Phd Thesis, Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials. Ludwig-Maximilians-Universität München, München, (2003).
- [80] Maciej Lewenstein, Anna Sanpera, and Verónica Ahufinger, Ultracold Atoms in Optical LatticesSimulating quantum many-body systems. Oxford University Press (2013). 2.4.2

2.4.2

- [81] Fritz Haake, Quantum Signatures of Chaos, Springer Berlin (2010). 2.4.2
- [82] Fetter A L and Walecka J D Quantum Theory of Many-Particle System McGraw-Hill New York (1971). 2.4.2
   2.4.2
- [83] W. Zwerger. Journal of Optics B. Quantum and Semiclassical Optics, 5 (2), (2003). 2.4.2
- [84] Kean Loon Lee, Benoit Grémaud, Rui Han Berthold-Georg Englert, and Christian Miniatura, Phys. Rev. A 80, 043411 (2009). 2.4.2
- [85] Julen Ibañez-Azpiroz Asier Eiguren, Aitor Bergara, Giulio Pettini, and Michele Modugno, Phys. Rev. A 87, 011602(R) (2013). 2.4.2
- [86] D. Jaksch, C. Brunder, J.I. Cirac, C. W. Gardiner and P.Zoller *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108 (1998). 2.4.2
  2.4.2

- [87] Matthew P. A. Fisher, Peter B.Weichman, G. Grinstein, Daniel S. Fisher. Phys. Rev. B. 40 546 (1989). 2.4.2
  3.2, 3.5, 3.9
- [88] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort, and M. Inguscio. *Phys. Rev. Lett.* 98 130404 (2007). 3.3, 3.4, 8.1.1
  3.3, 3.3, 3.3
- [89] Greiner M. O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hansch and I. Bloch. Nature 415 39-44 (2002). 3.4, 4.1
  3.4.1, 3.4.1, 3.5
- [90] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. C. Stoof. *Phys. Rev. A*, **63**, 053601 (2001). 3.4.1
  3.4.1, 5.1.6
  3.4.2, 5.1.1
- [91] Spielman I. B. Phillips W.D. and Porto J. V. Phys. Rev. Lett. 98 080404 (2007).
  3.4.2, 3.4.5, 3.5
  3.5
- [92] L. Pollet, N. V. Prokofév, B. V. Svistunov and M. Troyer, *Phys. Rev. Lett.* 103 140402 (2009). 3.4.4, 3.8, 3.5, 3.5, 5.1.5
  3.5
- [93] A. E. Niederle and H. Rieger, New J. Phys. 15, 075029 (2013). 3.5, 5.2, 7
- [94] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* Third Edition (Butterworth Heinemann, 1977) 3.5
- [95] Posazhennikov, Rev. Mod. Phys. 78, 1111 (2006). 3.5, 3.11
   4.1
- [96] Petrov, D. S., Holzmann, M. and Shlyapnikov, G. V. Phys. Rev. Lett. 84, 2551 (2000).
  4.1
- [97] Salasnich, L., Parola, A. and Reatto, L. Phys. Rev. A 65, 043614 (2002). 4.1
- [98] Muñoz Mateo, A. Delgado, V. Phys. Rev. A 77, 013617 (2008). 4.1

- [99] Bao, W., Jaksch, D. and Markowich, P. A. J. of Comput. Phys. 187, 318 (2003).
   4.1
- [100] Crank J., Nicolson P. Proc. Camb. Phil. Soc. 43 (1): 50-67 (1947). 4.3
- [101] Y. Castin and R. Dum. The European Physical Journal D Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics, 7 399-412, (1999). 4.3
- [102] R. Zeng and Y. Zhang. Computer Physics Communications, 180(6) 854-860, (2009). 4.3
- [103] W. Z. Bao and Q. Du. SIAM J. Sci. Comput., 25 (5) 1674-1697, (2004). 4.3
- [104] Shi-Liang Zhu, Baigeng Wang, and L.-M. Duan Phys. Rev. Lett. 98, 260402 (2007). 5
- [105] Chen, Z. and Wu, B. Phys. Rev. Lett. 107, 065301 (2011). 5, 5.1.4
- [106] Pethick Christopher J., Smith H, Bose-Einstein condensation in dilute gases (Cambridge : Cambridge University), (2002). 5.1, 8.1.1
- [107] M Lewenstein, A Sanpera, V Ahufinger Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems (Oxford: University Press), (2012). 5.1
- [108] Jung, J., DaSilva, A. M., MacDonald, A. H. and Adam, S. Nat. Commun. 6, 6308 (2015). 5.1.3
- [109] M. White, M. Pasienski, D. McKay, S. Q. Zhou, D. Ceperley, and B. DeMarco. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 055301 (2009) 5.1.5, 5.5
- [110] BILLY J., Ph-D thesis, Université Paris-sud, Orsay, France (2010). Disponible en https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00492482/en/ 5.7
- [111] Nesi F. and Modugno M. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys 37, S101 (2004). 5.1.5
- [112] R. Walters, G. Cotugno, T. H. Johnson, S. R. Clark, and D. Jaksch. Phys. Rev. A 87, 043613 (2013). 5.1.6, 5.11
- [113] Thomas C. K., Barter T. H., Leung T.-H., Okano M., Jo G-B., Guzman J. Phys. Rev. Lett. 119, 100402 (2017). 5.2, 7
- [114] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. Cahn, Phys. Rev. Lett. 53, 1951 (1984). 6.1, 6.1
- [115] M.Senechal, Quasicrystals and Geometry (Cambridge: CambridgeUniv.Press) (1996). 6.1

- [116] Yurii Kh Vekilov and Mikhail A Chernikov 2010 Phys.-Usp. 53 6 537-560 (2010). 6.1
- [117] Walter Steurer, Zeitschrift fur Kristallographie Crystalline Materials, 219
   (7), 391-446 (2004). 6.1
- [118] F. Samavat, M. Tavakoli, S. Habibi, B. Jaleh and P. Ahmad, Journal of Physical Chemistry, 2 1 7-14, (2012). 6.1
- [119] M. Gardner, Scientific American 236, 110 (1977). 6.1
- [120] C. J. Jenks and P. A. Thiel, Langmuir 14, 1392 (1998). 6.1
- [121] D. Louzguine-Luzgin and A. Inoue, Ann. Rev. Mater. Res. 38, 403 (2008). 6.1
- [122] W. Steurer, Acta Crystallogr. A 74, 1 (2018). 6.1
- [123] Z. V. Vardeny, A. Nahata, and A. Agrawal, Nat. Photonics 7, 177 (2013). 6.1
- [124] W. Jin and Y. Gao, Appl. Phys. Lett. 101, 141104 (2012). 6.1
- [125] Theodore A. Corcovilos, Jahnavee Mittal. Applied Optics 58, 2256-2263, (2019). 6.1
- [126] L. Guidoni, C. Triché, P. Verkerk, and G. Grynberg. Phys. Rev. Lett. 79 18 (1997). 6.1
- [127] L. Guidoni, B. Dépret, A. di Stefano, and P. Verkerk. *Phys. Rev. A* 60 6 (1999).
   6.1
- [128] Anuradha Jagannathan and Michel Duneau. EPL (Euro Physics Letter) 104 66003 (2013). 6.1
- [129] Xiuqing Huang and Xintian Wu. Phys. Rev. B 55, 17 (1997). 6.4.1
- [130] F. Aurenhammer, ACM Comput. Surv. 23 (3) 345 (1991). 6.4.1
- [131] Alva-Sánchez, H. and Martínez-Dávalos, A. and Moreno, Eduardo and Hernández-Reyes, B. and Murrieta, Tirso and Ruiz-Trejo, C. and Brandan, María-Ester and Rodríguez-Villafuerte, M. Nucl Instrum Meth Phys. A 596 384-389, 11 (2008). 6.4.1
- [132] Kajal Krishna Dey, Sudipta Das, and Golam Ali Sekh. Eur. Phys. J. D 73: 18 (2019). 6.4.2
- [133] Thangarasu Sriraman, Barnali Chakrabarti, Andrea Trombettoni, and Paulsamy Muruganandam. Journal of chemical physics 147, 044304 (2017). 6.4.2
- [134] Longyan Gong, Yan Feng, Yougen Ding. Physics Letters A 381 6 (2017). 6.4.2
- [135] Tutul Biswas and Tarun Kanti Ghosh. Pramana J. Phys., 77, 4, (2011). 6.4.2
- [136] S.E. Massen, Ch.C. Moustakidis, C.P. Panos. *Physics Letters A* 299 131-136 (2002). 6.4.2
- [137] Elvira Romera and Francisco de los Santos. Phys. Rev. Lett. 99, 263601 (2007).
   6.4.2
- [138] Jean-Marc Gambaudo and Patrizia Vignolo. New J. Phys. 16 043013 (2014). 6.5
- [139] Marian Florescu, Salvatore Torquato, and Paul J. Steinhardt. Phys. Rev. B 80 155112 (2009). 6.5

# SCIENTIFIC REPORTS

natureresearch

# **OPEN**

Received: 7 June 2018 Accepted: 2 July 2019 Published online: 30 July 2019

# Localisation of weakly interacting bosons in two dimensions: disorder vs lattice geometry effects

Luis A. González-García<sup>1</sup>, Santiago F. Caballero-Benítez<sup>1,2,3</sup> & Rosario Paredes<sup>1</sup>

We investigate the effects of disorder and lattice geometry against localisation phenomena in a weakly interacting ultracold bosonic gas confined in a 2D optical lattice. The behaviour of the quantum fluid is studied at the mean-field level performing computational experiments, as a function of disorder strength for lattices of sizes similar to current experiments. Quantification of localisation, away from the Bose glass phase, was obtained directly from the stationary density profiles through a robust statistical analysis of the condensate component, as a function of the disorder amplitude. Our results show a smooth transition, or crossover, to localisation induced by disorder in square and triangular lattices. In contrast, associated to its larger tunneling amplitude, honeycomb lattices show absence of localisation for the same range of disorder strengths and same lattice amplitude, while also exhibiting partial localisation for large disorder amplitudes. We also conclude that the coordination number *z* have a partial influence on how fast this smooth transition occurs as the system size increases. Signatures of disorder are also found in the ground state energy spectrum, where a continuous distribution emerges instead of a distribution of sharp peaks proper to the system in the absence of disorder.

Absence of transport in solids is intimately related with either, interparticle interactions or structural disorder. Here, we focus our attention in localization phenomenon induced by disorder in lattices in two dimensions. The typical model for a real electronic material that predicts localisation for finite disorder strength (Anderson transition)<sup>1</sup>, states that at zero temperature (T = 0) this occurs for dimensions  $d \le 2^2$ . In other words, a metallic system has always localised states for any disorder strength in  $d \leq 2$ . Several refinements to those predictions have been formulated for isotropic media<sup>3-8</sup> having a random distribution of scatterers. However, since Anderson localization is indeed a universal phenomenon, it than can be found also in anisotropic media, and in different situations than those belonging to the context of electronic transport. For instance, propagation of light in solids<sup>9,10</sup> in either anisotropic or orientationally ordered scatterers have been explored. In the condensed matter scenario, it is difficult to isolate the effects of the underlaying lattice structure against those associated to interparticle interactions. In contrast, ultracold neutral gases are perhaps the most versatile and simple setting to explore new possibilities in the study of transport properties, as compared to the analogous real materials with electrically charged particles<sup>11-14</sup>. Neutral ultracold gases confined in an optical lattice allow to have each aspect related to either dynamical or stationary properties, to be externally controlled with high precision<sup>15</sup>. Mott insulating transitions addressed theoretically in boson<sup>16-18</sup>, and fermion<sup>17,19,20</sup> cases, have been also experimentally tested in both, Fermi<sup>21</sup> and Bose<sup>22</sup> samples. Even more, Bose glass phases<sup>23,24</sup> and Anderson localization and have been realized in bosonic<sup>25-31</sup> and fermionic systems<sup>32,33</sup>. More recently, the interplay of disorder and interactions has been tested in Bose<sup>34,35</sup> and Fermi<sup>36</sup> gases confined optical lattices. In particular, in that experiment, the difficulty to reach equilibrium configurations caused by disorder and the interplay with strong two body on-site interactions were explored. From the theoretical perspective, there has been an extensive amount of work addressing the study of transport in disordered optical lattices<sup>15,37–40</sup>. Additionally, proposals to investigate fractal structure induced by disorder<sup>41</sup> and measurement of system replicas simultaneously<sup>42</sup> have been put forward. The interplay of disorder with spin-orbit coupling<sup>43</sup>, spin degrees of freedom<sup>44,45</sup>, supersolidity<sup>46</sup>, and Dirac fermions<sup>47</sup> are being explored. New developments to diagnose critical behaviour in the Hubbard model using neural networks have

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México, D. F. 01000, Mexico. <sup>2</sup>CONACYT-Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Calle Luis Enrique Erro No. 1, Sta. María Tonantzintla, Pue, CP 72840, Mexico. <sup>3</sup>University of Oxford, Department of Physics, Clarendon Laboratory, Parks Road, Oxford, OX1 3PU, United Kingdom. Correspondence and requests for materials should be addressed to R.P. (email: rosario@fisica.unam.mx) been considered<sup>48</sup>, as well as, engineering of bound states via disorder<sup>49</sup>. Some standard schemes used to study the referred phenomenology are approximations to the extended and hybrid Bose-Hubbard model using Gützwiller ansatz<sup>50</sup>, Stochastic Mean-Field Theory<sup>15,51,52</sup>, Self-energy Functional Theory<sup>53</sup> and the use of Monte-Carlo simulations<sup>54,55</sup>. Numerical exact diagonalization simulations in the full quantum limit are difficult to perform since the size of Hilbert space grows exponentially with the number of lattice sites. Moreover, Renormalization Group schemes are computationally very expensive for systems in dimensions larger than one. Additionally, in the weakly interacting regime Monte-Carlo simulations show strong finite size effects<sup>56</sup>. This makes difficult the characterisation of the states in the simulations and the identification of the corresponding quantum many-body phases of matter. Therefore, other alternatives to address the problem in the lattice with many sites are desirable. A suitable approximation scheme is given by using the Gross-Pitaevskii (GP) equation to effectively describe the ground state of weakly interacting bosonic systems at low temperatures<sup>57,58</sup>. The limitations of this approach are that fluctuations in the number of particles are always poissonian in GP calculations, unable to represent MI states or ensembles of them while depletion is neglected. However, this mean field treatment allows to investigate either stationary or dynamical transport properties in the superfluid (SF) regime (compressible phases) away from insulating states driven by interactions (incompressible phases). The aim of our study is to give an effective picture of the role of geometry in the transport properties of the quantum degenerate gas in the limit of weak interactions in an optical lattice. To this end, we employ an approximate treatment using a mean-field description, GP picture. In this work, we restrict our attention to the characterisation of disorder induced phenomenology and the interplay with the lattice topology via numerical experiments.

In order to identify different signatures of localisation, we describe the weakly interacting bosonic gas in the limit of low temperatures (T = 0), where the system is accurately described by a macroscopic wave function  $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$  describing the condensate component of the system<sup>58,59</sup>. The time evolution of the system is governed by the GP equation under the confinement of the optical lattice. This equation allows us to model the stationary states of the system subject to different lattice geometries, disorder strength  $\delta$ , and effective weak on-site interactions. The analysis of our simulations allows us to identify localisation features by varying the disorder strength ( $\delta$ ) and the system size ( $\Omega$ ). The number of minima induced by the optical lattice where the atoms localise having maximum density peaks defines precisely such a system size. In the absence of disorder ( $\delta = 0$ ), the system is a quantum fluid with translational invariance. As the disorder amplitude  $\delta$  is increased, the formation of regions where the density is negligible appear, that is, a continuous density of the condensate is replaced by islands across the 2D lattice. This generates disconnected islands that lead to the suppression of atomic transport across the whole lattice. We arrived to this conclusion after performing a statistical analysis of several quantities, numerically determined, for the condensate wavefunction confined in the 2D disordered lattices. In particular, we studied the average of peak heights as well as the density across the lattice. Fragmentation of the condensate in islands is qualitatively similar to depletion in the sense that a fraction of the condensate extinguishes in certain regions. However, since we are only considering the ground-state of the condensate, that is the T = 0 wave function, we are unable to consider finite T effects<sup>52,60</sup>. As found in the literature, the inhomogeneity introduced by a random potential generates excitations of low energy finite momentum modes<sup>61-65</sup>, or causes that a fraction of the superfluid become a normal fluid in the 3D case<sup>66</sup>. It has been found in experiments with optical lattices that depletion affects marginally ( $\leq 10\%$ ) the behaviour of the atomic density in low dimensions (1D or 2D) when optical lattice depths are lower than those considered in this work<sup>67</sup>. This supports the use of an effective description given solely in terms of the behaviour of the condensate component in the system as a first approximation. In ultracold gases with weak interactions, this suggests that disorder leads to the fragmentation of the SF in the system. This is the well known scenario that leads to the formation of a Bose-Glass for larger values of disorder strength, which is also a fragmented SF state<sup>57,68</sup>. However, it is important to stress that in our study we considered both, effective interactions and disorder strengths for which the system remains in the superfluid phase, away from the Bose glass and insulating phases.

This work is organised as follows. In the section model, we describe the system and parameters used in our simulations to analyse localisation effects. In section Disorder induced localised states in 2D lattices, we characterise the localisation or density fragmentation, by performing a robust numerical analysis of several observables. Then in section Ground state energy spectra of localised states we study the role of disorder in the 2D lattices in the momentum space. Finally in the last section, we summarise our findings.

#### Model: Weakly Interacting Ultracold Atoms in 2D Disordered Lattices

To analyse the influence that disorder and the lattice geometry have in producing localised states in ultracold systems, we consider a weakly interacting gas of Bose atoms confined in several two dimensional lattices, subjected to white noise disorder of variable strength. The system is described by the mean field Gross-Pitaevskii equation for the amplitude of the wave function  $\psi$ ,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\perp}^2\psi + (V_{\text{Latt}}^{\delta}(x, y) + g_{2\text{D}}|\psi|^2)\psi,\tag{1}$$

where  $\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ , and  $g_{2D}$  being the effective coupling interaction in 2D. [This coupling constant is related to the standard 3D coupling interaction  $g_{3D}$ , as  $g_{2D} \approx \frac{g_{3D}}{l}$ , with  $g_{3D}$  being the usual coupling interaction written in terms of the *s*-wave scattering length  $a_{sc}$ ,  $g_{3D} = \frac{4\pi \hbar^2 a_{sc} N}{m}$ , and  $l_z$  being the natural length of the ground state harmonic oscillator of a condensate originally confined in 3D and then squeezed along *z* direction, thus resulting into a disk shape condensate confined in the x - y plane]<sup>69-74</sup>. The potential  $V_{\text{Latt}}^{\delta}(x, y)$  is given by a two dimensional lattice with triangular, square or honeycomb symmetries<sup>75,76</sup>,



Figure 1. Schematic representation of the two dimensional square disordered lattice potential.

$$V^{\delta}(x, y) = V_0^{\delta} \left[ \cos\left(\frac{4\pi y}{3a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3}a} - \frac{2\pi y}{3a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3}a} + \frac{2\pi y}{3a}\right) \right],$$
  

$$V_{\Box}^{\delta}(x, y) = V_0^{\delta} \left[ \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \right],$$
  

$$V_{\Delta}^{\delta}(x, y) = V_0^{\delta} \left[ \cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{4\pi}{3}\frac{y}{a'}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{4\pi}{3}\frac{y}{2a'}\right) \cos\left(\sqrt{3}\frac{4\pi}{3}\frac{x}{2a'}\right) \right],$$

with *a* the lattice constant and a'=0.55a, labels {,  $\Box$ ,  $\Delta$ } identify honeycomb (z = 3), square (z = 4) and triangular lattices (z = 6), with z being the coordination number (the number of nearest neighbours),  $V_0^{\delta} = V_0^{\text{Latt}}(1 + \varepsilon_{\delta}(x, y))$ , being  $V_0 = 2.66 V_0/12$ ,  $V_0^{\Box} = V_0/2$ , and  $V_0^{\Delta} = 3.45 V_0/12$ . The function  $\varepsilon_{\delta}(x, y)$ , representing a non correlated disorder, takes random values varying in the interval  $[-\delta, \delta]$  at each point (x, y)being  $\delta$  scaled in the same energy units as  $V_0$ . Thus, the total potential depth at each point  $V_{Latt}^{\delta}(x, y)$  (disordered contribution and optical lattice) is the result of adding/subtracting a random number  $\varepsilon_{\delta}$  to the amplitude of the potential  $V_{Latt}^{\delta=0}(x, y)$  at each point (x, y). To perform a reliable analysis of the physical quantities and have meaningful predictions, we average over an ensemble of realisations for each value of the disorder amplitude  $\delta$ . In Fig. 1 we show a fragment of the energy landscape used in our study, illustrating a particular realisation of disorder in a square geometry. Similar to real experiments, multiple realisations will be considered, as one random realisation fails to represent the typical behaviour of multiple scattering events due to uncorrelated disorder. The way in which the disorder has been simulated, warrants that, although the lattice symmetry is altered, the underlying structure is preserved. It is important to note, that this way of setting disorder through the whole continuous coordinate space where the lattice is defined, resembles analog real systems in condensed matter where each particle "feels" a different energy landscape associated to the disorder in the otherwise perfect lattice. Additionally, this way of implementing disorder is similar to consider a random energy shift at each lattice site, as originally formulated<sup>1</sup>. The disordered potentials experimentally created are the result of either, the light arising from an optical speckle field produced when a laser beam passes through a diffusing plate<sup>26,28,29,77</sup>, or the combination of both, a standing wave with a defined lattice geometry and the light arising from an optical speckle field<sup>27,31</sup>.

**Simulation considerations and experimental parameters.** In our simulations, we consider typical parameters of ultracold <sup>87</sup>Rb atoms<sup>35</sup> confined in an optical lattice potential in 2D, having depths of  $V_0 \sim 2E_R$  and a lattice spacing a = 532 nm, where  $E_R$  is the recoil energy  $[E_R = h^2/(8ma^2)]^{78}$ . At these optical lattice depths the single band Bose Hubbard model<sup>15,18,78</sup> is an accurate description. Other natural scales for the energy are the hopping amplitude between nearest neighbours  $t_0$ , and the on-site interaction strength in the optical lattice  $U_{2D}$ . [This onsite effective interaction maintains a proportionality relationship with the coupling interaction  $g_{2D}$ , given by  $U_{2D} = g_{2D} \int d^2 r |w(x, y)|^4$ , being w(x, y) the Wannier functions]. For the lattices here analyzed, the tunneling amplitude  $t_0$  can be estimated analytically in the case of the square lattice<sup>78</sup>, and numerically in the cases of triangular and honeycomb lattices<sup>79-82</sup>. As it is well known, the appropriate parameter to verify the range of validity of the regime away from strong interaction effects, is the quotient between  $t_0$  and  $U_{2D}$ . As reported in the literature, for a filling factor of n = 1, the SF-MI transition occurs for  $\tilde{t}_c^{\Box} = t_0/U_{2D} \approx 0.06$ ,  $\tilde{t}_c^{\Delta} = t_0/U_{2D} \approx 0.04$  and  $\tilde{t}_c = t_0/U_{2D} \approx 0.08$ , for square<sup>22</sup>, triangular and hexagonal<sup>83</sup> lattices respectively. Therefore, stronger effective on-site interactions than those bounds in each case are needed to be able to represent sub-poissonian on-site



**Figure 2.** Correlation function between nearest neighbours  $g_1$  as a function of  $\delta$  for the hexagonal (z=3), square (z=4) and triangular (z=6) lattices. Error bars in this figure are associated to the ensemble of 50 realisations for each value of  $\delta$ .

number fluctuations, that the GP model is unable to reproduce. In our calculations we use  $U_{2D}/E_R \sim 0.01$ . In this case, the system is very far away from the interaction driven insulating states. Therefore, in our simulations there is no competition with Mott states. Moreover, we neglect quantum depletion effects as we are in the T = 0 regime<sup>67</sup>. Therefore, as we are deep in the SF regime in 2D, the GP theory is a pertinent description in the presence of disorder.

A quantity that allows us to establish the range where disorder amplitude can be varied before the system enters into the phase in which the density of the condensate becomes discontinuous across the lattice, is the correlation function at the nearest neighbor distance,  $g_1$ . This quantity can be defined in analogy to the so called phase coherence  $\chi(t)$  that measures the correlation between values of the Bose condensate wave function at points separated one lattice constant d. The phase coherence defined as<sup>84</sup>  $\chi(t) \equiv \left| \int d^3x \psi^*(r, z; t)\psi(r, z + d; t) \right|^2$ , provides reliable information of the degree of coherence of the condensate inside the optical lattice<sup>84</sup>. In our case, the correlation function between nearest neighbors, is defined as

$$g_{1} = \frac{1}{z^{2}} \sum_{m \in n.n.} \left| \int dx dy \psi^{*}(x, y) \psi(x + x_{m}, y + y_{m}) \right|^{2}$$

where z is the coordination number and m is a label that identifies the nearest neighbors sites with respect a site located in (x, y) position. For the particular case of the square lattice we have  $(x_m/a, y_m/a) = \{(0, 1), (0, -1), (1, 0), (-1, 0)\}$  while being  $(x_m/a, y_m/a) = \{(1, 0), (1, \sqrt{3}/2), (-1/2, \sqrt{3}/2), (-1, 0), (-1/2, <math>-\sqrt{3}/2), (1/2, -\sqrt{3}/2)\}$  for the triangular lattice, and  $(x_m/a, y_m/a) = \pm \{(1, 0), (-1/2, \sqrt{3}/2), (-1/2, -\sqrt{3}/2)\}$  for the triangular lattice, and  $(x_m/a, y_m/a) = \pm \{(1, 0), (-1/2, \sqrt{3}/2), (-1/2, -\sqrt{3}/2)\}$  for the honeycomb geometry. The correlation  $g_1$  gets lost when the density of the condensate is discontinuous, thus preventing the GP approach. Therefore, besides considering values of effective interaction for which the system is well below the MI phase, we shall also consider values of disorder strength that guaranty that the interacting Bose gas remains sufficiently smooth, in order to ensure that our description of the condensate in terms of solutions of a differential equation still makes sense. We should mention here that the phase coherence is a quantity that allows to distinguish when the condensate is not a Bose glass<sup>51</sup>. In Fig. 2 we show the behaviour of  $g_1$  as a function of  $\delta$  for the analysed lattices. The values of the correlation  $g_1$  in this plot are normalised with respect to its value at zero disorder. Error bars in this figure are associated to the ensemble of realisations for each value of  $\delta$  (measured in units of recoil energy). As can be appreciated from Fig. 2, for values of  $\delta$  below 1, the system remains distributed across the lattice. Thus we can safely consider disorder strengths below one hundred percent of the recoil energy  $E_R$  to be in the superfluid regime.

In typical ultracold experiments besides disorder in the lattice, the atoms move under the influence of a harmonic confinement, so that  $V \rightarrow V + V_T$ , with  $V_T = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$ . Although this contribution can also be considered in our mean field analysis, and in fact we performed calculations to investigate the modifications that the inhomogeneity introduces, we note that real analog systems are not under the presence of a harmonic potential, but instead each particle is immersed in a very large (infinite) disordered lattice. Also, near the center of the trap in a typical ultracold atom experiment it is reasonable to neglect harmonic confinement for sufficiently large lattices. Thus, our analysis will focus on lattices without the harmonic confinement for simplicity.

**Disorder induced localised states in 2D lattices.** Using the effective model given by Eq. (1), we study the emergence of localisation for honeycomb, square and triangular lattices as a function of the disorder amplitude and the system size. In order to describe the ground state of the system, we numerically solve Eq. (1) using imaginary time evolution  $(t \rightarrow i\tau)$ , which is equivalent to finding the lowest energy solution or steady-state solution  $\psi \rightarrow \psi_0$ . [The size of the grid was chosen to ensure the norm conservation. The Split-Step Crank-Nicholson method in imaginary time was used to find the stationary state. To ensure the reliability of the stationary state found, we evolved such a state in real time and verified its invariance]. This solution represents the amplitude of the macroscopic wave function of the system at T = 0 in the lowest energy state. We simulate the GP equation in continuous coordinate space for a given disorder amplitude  $\delta$  and analyse the obtained density profiles

 $\rho(x, y) = |\psi_0(x, y)|^2$ . As explained previously, the limitations of our treatment are that it does not account for depletion of the condensate, non-poissonian density distributions and it is a zero temperature model. However, it allows to study the combined effects of geometry and disorder, which is the main purpose of this work. The identification of localisation is made from the stationary state by first quantifying the density across the lattice sites, as a function of disorder for a given lattice geometry. Then, to further comprehend the emergence of localisation, we study the behaviour of the stationary localised states as a function of system size. For our calculations, we consider lattices having number of sites used in typical experiments performed in 2D lattices. In order to have meaningful quantities as a function of the disorder amplitude, we consider sets of ~50 realisations of random numbers for each value  $\delta$  and a given lattice size  $\Omega$ . The size  $\Omega$ , is identified as the number of minima of the potential  $V_{Latt}^{\delta}(x, y)$  without disorder. The initial state used in all of our calculations to reach the steady state is a constant distribution  $\psi_0(x, y) = \text{constant}$  [The size of the grid was chosen to ensure the norm conservation. The Split-Step Crank-Nicholson method in imaginary time was used to find the stationary state. To ensure the reliability of the stationary state found, we evolved such a state in real time and verified its invariance].

The information obtained directly from our numerical calculations can be summarised as follows. 1. At zero disorder strength, gaussian peaks centred at lattice sites fill the entire space, being the amplitude of those peaks the same across the lattice, except at the edges where the boundary condition (end of the lattice) give rise to peaks with lower amplitudes, 2. When the magnitude of disorder  $\delta$  is non zero, gaussian peaks are not distributed uniformly in the whole lattice, instead of that, several sites in the lattice show a diminished density, thus exhibiting peaks with lower amplitudes. We fixed an arbitrary criterium to count the non negligible peaks contributing to the superfluid density (for a given disorder strength, only peaks having amplitudes larger than 5 percent of the highest amplitude are considered for the statistics), 3. As expected, different realisations of disorder associated to a given value of the disorder amplitude, produce different distributions of peaks across the lattice. What it is important to stress is that different realisations of disorder have, on average, the same distribution of heights and density peaks, 4. As the size of the disorder amplitude increases, the spatially distributed random peaks become sparse, and therefore, in accordance with the condition of constant density, the heights of the peaks become taller, and 5. As the magnitude of disorder is increased, the zero disorder scenario is replaced by a fragmented density across the lattice. For illustration purposes in Fig. 3, we show the stationary density profiles for one of the realisations and different lattice geometries (z = 3,4,6). These profiles correspond to disorder amplitudes of 20%, 40% and 80% of the value of  $V(x, y)^{\text{lattice}}$  at each point (x, y). The analysis of many realisations of these density distributions is the core of our work.

In the typical model of localisation induced by disorder without interactions, the envelope of the wave function ( $\varphi$ ) gets localised exponentially<sup>1</sup>. In 1D, in an isotropic medium with randomly distributed scatterers  $\varphi(x) \sim exp(-|x - x_0|/(\xi_{Loc}))$  where  $x_0$  is some arbitrary point in the space,  $\xi_{Loc}$  is a localisation length<sup>7</sup>. Within the self consistent theory<sup>8</sup>, the localisation length depends on disorder as  $\xi_{Loc} \sim l \exp(kl)$  in 2D and  $\xi_{Loc} \sim l$  in 1D, where *l* is the scattering mean free path and *k* the wave momentum. In low dimensions (1D and 2D) in the absence of interactions, the localisation length diverges for weak disorder strength, which means that there is no finite value of disorder for which the system can be an ideal conductor. Almost ten years ago, experiments performed in atoms of <sup>87</sup>Rb confined in one dimension, in a quasi-periodic lattice<sup>25</sup>, and in a weak disordered optical potential<sup>26</sup>, showed the typical exponentially localised density profile behaviour. In our problem, instead of studying such a long tail exponential behaviour, we focus our attention on the short distance density variations to characterise the localisation phenomenon. The effects of disorder are captured by performing a robust study of the density profiles. In particular, taking into account the information obtained from our numerical calculations, the quantification of disorder effects in our system will be established in terms of two observables, the peaks heights distribution  $h(\delta)$  and the peak fraction  $p_f$ , as a function of disorder amplitude  $\delta$ . Here we stress that the observables to be studied can be experimentally accessed in actual ultracold atom experiments.

To investigate the dependence of h and  $p_t$  on  $\delta$  we proceed as follows. For fixed disorder strength  $\delta$  and lattice size  $\Omega \sim 10^3$ , we performed ~50 realisations of random numbers. From each density profile of the condensate, we analyse the amplitude of the peaks at each lattice site by selecting the non-negligible peaks, using the criteria described above. With this knowledge we determine both, the relative heights and the peak fraction for each realisation. Then, we take the average of h over the ensemble. In Fig. 4, we summarise the results obtained for honeycomb, square and triangular lattices. There, we plot the average of the peaks heights  $\langle h \rangle$  (top) and the peak fraction  $p_{\ell}$  (bottom) as a function of disorder  $\delta$  in units of the recoil energy  $E_{R}$ .  $\langle h \rangle$  is referenced with respect to the average heigh value without disorder. Blue, purple and black symbols correspond to honeycomb (z = 3), square (z = 4) and triangular (z = 6) lattices respectively. As can be appreciated from Fig. 4, square and triangular lattices suggest a smooth transition to localisation for  $\delta \gtrsim 0.3$  where both,  $\langle h \rangle$  and  $p_e$  start to change. In other words, the density collapses into a single density peak randomly located across the lattice. In contrast, localisation is not observed for the honeycomb lattice for the same range of disorder strength. Interestingly, the continuous lines in Fig. 4, fitting the data of each geometry, allow to conclude that there is not sensitivity of the localisation appearance on the lattices having coordinations z = 4 and z = 6. Blue dashed lines in the top and bottom figures of Fig. 4 correspond to the honeycomb lattice, but with a different value of the potential depth with respect to that considered for the continuous lines. While continuous lines correspond to  $V_0/E_R \sim$  12, dashed lines label  $V_0/E_R \sim 24$ . Therefore, from this figure one can conclude that the stronger tunneling energy of the honeycomb lattice against the lower for square and triangular lattices, for the same lattice amplitude, plays a determinant role in the occurrence of localisation.

We also investigate finite size effects considering lattices of size  $5 \times 10^2 \lesssim \Omega \lesssim 5 \times 10^3$ . In particular, we study how the density fragmentation of the condensate component occurs as disorder amplitude is increased and



**Figure 3.** Fragments of the density profiles for honeycomb, square and triangular lattices with a disorder amplitude  $\delta = 0.2, 0.4, 0.8$  with lattice sizes  $\Omega \sim 10^3$ . Parameters are:  $V_0 = 12E_R$ ,  $U = 0.01E_R$ , spacing is in units of the lattice constant *a*. The bright regions correspond to density maxima while dark regions absence of SF.

the system size is varied. In Fig. 5, we plot the fraction of peaks as a function of  $\Omega$  for several values of  $\delta$ , blue, purple and black points correspond to  $\delta = 20\%$ , 60% and 80% respectively, panels from top to down correspond to honeycomb, square and triangular lattices respectively. Several remarks can be extracted from this figure. First, in our simulations we observe that for disorder amplitudes of  $\sim$ 40% the peak fraction never reaches a constant behaviour for triangular and square geometries. In the region 30%  $\lesssim \delta \lesssim$  50% we observe that large fluctuations in  $p_{\epsilon}$  occur preventing stabilisation. Although this behaviour is similar that observed in typical phase transitions in which critical slowing down and enhanced fluctuations occurs<sup>85</sup>, we should stress that the treatment used for our study is unable of describing phase transitions. For  $\delta \gtrsim 50\%$ , (in Fig. 5 we just illustrate  $\delta = 60\%$  and 80%) the peak fraction saturates to a small but constant value for these geometries. That is, we see that the fraction of peaks becomes independent of the lattice size for  $\Omega > 3 \times 10^3$  for  $\delta \gtrsim 50\%$ . This result confirms that lattices with coordinations z = 4 and z = 6 suffer a noticeable density fragmentation for disorder strengths above  $\delta \gtrsim 30\%$ . Although, we observe that the system does not reach the limit where  $p_{\ell} \rightarrow 0$ , as in the standard notion of a single localised peak, this result for our lattices in 2D is analogous to the 1D case in which, for non-trapped gases and finite repulsive interactions, the Bose gas populates a finite number of localised single-particle Lifshitz states<sup>68</sup>. In agreement with the results found for lattices of size  $\Omega \sim 10^3$ , honeycomb lattices do not exhibit such fragmentation for the same disorder strengths and the same lattice amplitude. It is important to stress that this density fragmentation observed for the analysed lattices is away of the Bose-Glass phase<sup>57,68,86,87</sup> since, as described in the previous section, the correlation function at the nearest neighbour distance is well above of zero, thus indicating that the system is not an insulator.

**Ground state energy spectra of localised states.** Complementing our analysis, we investigate the energy spectrum of the stationary states from our simulations. To proceed, we consider the energy associated to the stationary GP equation as a function of the disorder strength  $\delta$  and a fixed value of the mean field interaction U. The energy functional is given in terms of the stationary state  $\psi_0 = \lim_{t\to\infty} \psi = \lim_{t\to0} \psi$  by,



**Figure 4.** Average of the peaks heights  $\langle h \rangle$  (top) and the peak fraction  $p_f$  (bottom) as a function of disorder  $\delta$  in units of  $E_R$ .  $\langle h \rangle$  is normalised to the largest height amplitude. Blue, purple and black symbols correspond to honeycomb (z=3), square (z=4) and triangular (z=6) lattices respectively. Parameters are:  $\Omega \sim 10^3$ ,  $V_0 = 12E_R$  (solid lines) and  $V_0 = 24E_R$  (dashed line for honeycomb),  $U = 0.01E_R$ , with ~50 disorder realisations at each data point, the bars denote the standard deviation for each ensemble of disorder amplitude  $\delta$ . The honeycomb lattice with  $V_0 = 24E_R$  (dashed blue) and the square lattice with  $V_0 = 12E_R$  (solid purple) have equivalent tunneling amplitudes in the tight binding limit, see the main text for details. The continuous lines for  $\langle h \rangle$  are given for triangular and square by:  $1 + \exp(b_0 + b_1\delta + b_2\delta^2)$ , with parameters (triangular, square):  $b_{0,\text{Latt}} = (-12.53, -7.84)$ ,  $b_{1,\text{Latt}} = (31.42, 19.98)$ , and  $b_{2,\text{Latt}} = (-15.58, -8.61)$ . For the honeycomb lattice,  $\langle h \rangle \approx 1$  for  $\delta \leq 1$  with  $V_0 = 12E_R$ ; for  $V_0 = 24E_R$ ,  $b_0 = -26.04$ ,  $b_1 = 54.58$ , and  $b_2 = -25.68$ . The solid lines for  $p_f$  are given by:  $1 - \alpha\delta^2$  for  $\delta \leq \delta_c$  and  $A \exp(\beta_1\delta + \beta_2\delta^2 + \beta_3\delta^3 + \beta_4\delta^4)$  for  $\delta > \delta_c$ . The fitting parameters are for  $V_0 = 12E_R$  (triangular, square, honeycomb):  $\alpha_{\text{Latt}} = (0.29, 0.022, 0.00051)$ ,  $\delta_{c,\text{Latt}} \approx (0.3, 0.3, 0.6)$ ,  $A_{\text{Latt}} = (1.023, 0.98, 0.99)$ ,  $\beta_{1,\text{Latt}} = (1.26, 0.0, 0.21)$ ,  $\beta_{2,\text{Latt}} = (-4.17, 3.59, -0.34)$ ,  $\beta_{3,\text{Latt}} = (-1.93, -11.52, 0.005)$ ,  $\beta_{4,\text{Latt}} = 0.0$ . For the honeycomb lattice with  $V_0 = 24E_R$ ,  $\alpha = 0.006$ ,  $\delta_c \approx 0.4$ , A = 0.98,  $\beta_1 = 0$ ,  $\beta_2 = 0.69$ ,  $\beta_3 = 0$ ,  $\beta_4 = -3.64$ .



**Figure 5.** Normalized fraction of peaks as a function of the lattice size  $\Omega$ . The values of the disorder amplitude are  $\delta = 20\%$  (blue), 60% (purple), 80% (black) of the potential depth  $V_0 = 12E_R$ . From top to bottom panels correspond to honeycomb, square and triangular lattices respectively. Interestingly, the honeycomb lattice (z = 3) is resilient towards disorder induced localisation, as compared to other geometries with more nearest neighbours (z = 4, 6). The fitted lines different from  $p_f \sim 1$  are given by:  $p_f \sim B \exp(-c\Omega) + D$ . For honeycomb:  $\delta = 0.8$ , (B, D, c) = (0.42, 0.8, 0.0017). For square:  $\delta = 0.6$ , (0.51, 0.03, 0.00073);  $\delta = 0.8$ , (0.16, 0.0072, 0.00097). For triangular:  $\delta = 0.8$ , (0.72, 0.15, 0.0023);  $\delta = 0.8$ , (0.26, 0.06, 0.0037).

$$E_{0} = \int d^{2}r \left\{ \psi_{0}^{*} \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{\perp}^{2} + V_{\text{Latt}}^{\delta}(x, y) \right] \psi_{0} + \frac{U}{2} |\psi_{0}|^{4} \right\},$$
(2)

where the disorder is considered in the effective potential  $V_{Latt}^{\delta}$  for honeycomb  $(V_{\Box}^{\delta})$ , square  $(V_{\Box}^{\delta})$  and triangular  $(V_{\Delta}^{\delta})$  lattices (see section Model). The integrand is the ground state energy density in continuous coordinate space. To find the ground state energy density in the reciprocal space, namely the ground state energy spectra, we first rewrite the kinetic term in a quadratic form,

$$\int d^2 r \psi_0^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \right) \psi_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^2 r \nabla_\perp \psi_0^* \cdot \nabla_\perp \psi_0.$$
(3)

Then, it follows from the use Parseval's theorem<sup>88</sup>, the expression in momentum space,

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \frac{1}{2m} \mathbf{P}_{\psi_0}^* \cdot \mathbf{P}_{\psi_0} + \frac{|U|}{2} \left| \int d^2 r e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} |\psi_0|^2 \right|^2 + \left| \int d^2 r e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{k}_\perp} \sqrt{V_{\text{Latt}}^{\delta}(x, y)} \psi_0 \right|^2,$$
  
$$\mathbf{P}_{\psi_0} = \hbar \int d^2 r e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{k}_\perp} \nabla_\perp \psi_0,$$
(4)

with  $\mathbf{r}_{\perp} = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y$ ,  $\mathbf{k}_{\perp} = k_x\hat{e}_x + k_y\hat{e}_y$  and  $\hat{e}_{x/y}$  unit vectors in 2D. As it turns out from Eq. (4), the ground state energy spectrum associated to a particular realisation of disorder encodes the structure of the ground state energy in momentum space.

Analogously to the previous analysis for characterisation of density profiles, the ground state spectra analysis was done considering a significant number of realisations for a given disorder amplitude. Specifically, the results presented here correspond to the average over ~50 realisations. For all of our numerical calculations, we use  $\Omega \sim 10^3$  and work within the first Brillouin zone (FBZ). For square lattices, this region is bounded by  $-\frac{\pi}{a} \le k_x, k_y \le \frac{\pi}{a}$ , while for honeycomb and triangular lattices the FBZ is the area of the primitive cell in the reciprocal lattice space generated by vectors  $\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$  and  $\mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}(0, 1)$ . In Fig. 6, we show the energy spectra of the lattices considered in our study for  $\delta = 0,80\%$  (left and right columns respectively) of the potential depth  $V_{\text{Latt}}^{\delta=0}(x, y)$ , in the first quadrant of the FBZ. From top to down, we plot  $\varepsilon(k_r)$  vs.  $k_r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ for honeycomb, square and triangular lattices respectively. The inset of each panel contains a density plot of ground state spectra in the full FBZ, associated to both,  $\delta = 0$  (left column) and  $\delta = 80\%$  (right column), we should emphasize that left column corresponds to the averaged ground state spectra. We observe that the system with disorder presents a ground state spectra which is no longer composed of sharp energy peaks, originated from the lattice symmetry. Disorder broadens the peaks in the distribution. In other words, instead of the sharp ground state spectra at zero disorder, we have a dense continuous behaviour when the disorder amplitude is different from zero. Interestingly, even though disorder is spanned across the entire lattice, and that this corresponds to the average over many realisations, we do not observe any cancellation effect due to randomness. Regarding the influence of the disorder strength, we found that as the disorder amplitude is increased the magnitude of the background increases until it becomes comparable to the amplitude of the signal due to the lattice symmetry. At this point, it is when the disorder effectively destroys the lattice symmetry, rendering the geometry effects indistinguishable. Summarising, the influence of disorder on the ground state spectra is manifested in replacing well defined peaks as a function of momenta with a super-imposed dense distribution due to incommensurability of spatial frequencies.

Summary of findings and outlook. We have studied the stationary states of ultracold weakly interacting bosonic atoms confined in two dimensional disordered optical lattices having different lattice geometries. In particular, we investigated the influence of energetic disorder in lattices with honeycomb (graphene like), square and triangular geometries, in producing localised states. The characterisation of localised states was performed by means of a systematic analysis through numerical simulations at mean-field level, using the Gross-Pitaevskii equation. The quantities analysed in our study, as a function of the disorder amplitude, were the average of the heights amplitudes and the fraction of peaks obtained directly from the density profiles, and the ground state spectra determined by Fourier transforming the energy associated to the ground state. For our numerical analysis, we considered lattices of size  $\Omega \sim 10^3$  sites, constant effective on-site interaction strength  $U = 0.01E_R$ , and variable disorder amplitude in the interval  $\delta \in [0, 1] E_R$ , being these two quantities such that the Bose gas is well inside in the superfluid region. We also performed a finite size analysis considering the effects of the system size in the range  $5 \times 10^2 \lesssim \Omega \lesssim 5 \times 10^3$ .

We found that localisation in two dimensional lattices occurs as a smooth crossover for square and triangular lattices. On the contrary, honeycomb lattices do not exhibit such localisation for the same disorder amplitudes and the same lattice amplitude  $V_0/E_R$ . This behaviour can be attributed to the characteristic larger tunneling energy of the honeycomb lattice with respect to that for square and triangular geometries. From the analysis of large lattice sizes, we found that starting from a certain disorder amplitude, the system exhibits partial localisation manifested as disconnected islands of density. We arrived at this conclusion from the analysis of the density since it saturates to a constant value as a function of the disorder strength. The original prediction made by Anderson is not completely restored for our weakly interacting disordered lattices in the sense that arbitrary disorder values do not produce localisation effects. Being this result analogous to that occurring in 1D, in which a weakly interacting Bose gas populates a finite number of localised single-particle Lifshitz states<sup>68</sup>. However, localisation in few



**Figure 6.** Energy spectrum in reciprocal space for honeycomb (top row), square (middle row) and triangular (bottom row) lattices in arbitrary units. Left and right columns correspond to disorder amplitudes of  $\delta = 0$  and  $\delta = 80\%$  of the potential depth  $V_0 = 12E_R$  respectively. Each of the energy spectra on the right column is the average over ~50 realizations for a given disorder amplitude. The inset in each panel shows the corresponding density plot of the energy spectrum in the Brillouin zone.

sites is found for large disorder strengths. Therefore, although localisation or density fragmentation occurs as a smooth crossover, we can identify regions with marginal localisation for  $\delta \lesssim 0.3$ , weak localisation for  $0.3 \lesssim \delta \lesssim 0.6$  and strong localisation for  $\delta \gtrsim 0.6$ . We recognised such strong localisation as the collapse of the condensate density into a single density peak randomly located across the lattice, the limit when  $p_f \rightarrow 0$ . Thus, transport is strongly suppressed for any lattice geometry for sufficiently large disorder strength. Our analysis also allowed to conclude that the coordination number determines how fast the smooth transition occurs as the system size increases, being the triangular lattice the first in which transport in inhibited against square and honeycomb lattices. It is interesting to note that although the honeycomb lattice do not constitute a bonafide Bravais lattice in 2D since it is composed by the superposition of two sub-lattices, our results are in good agreement with the fact that this lattice is an intrinsic good conductor.

From the analysis of the ground state spectra, we conclude that the influence of disorder is to replace a sharply peaked distribution for a continuous one. The disordered system ground state spectra is composed by continuous energy levels originated from disorder and the sharp energy level contribution originated from the underlaying symmetry of the lattice. In essence, the spatial random inhomogeneous distribution translates into broadening of the characteristic peaks of perfect lattices in the ground state energy distribution in momentum space.

Summarising, in our work we have been able to quantify the crossover to localisation as a function of the disorder amplitude for three different geometries. A general statement arising from our investigation is that disordered honeycomb lattices are robust against disorder as compared to triangular and square geometries for the same parameter ranges. As mentioned above, associated to the larger tunneling energy of the honeycomb lattices against their respective in square and triangular lattices, the honeycomb structure would have better conductivity in the presence of disorder in 2D.

The present work provides some insight to understand localisation phenomena induced by disorder in two dimensional weakly interacting systems for lattices of different geometries having coordination z = 3,4 and 6. It is interesting to note although Gross-Pitaevskii equation has an intrinsic mean-field nature, the quantities analysed to investigate localisation phenomena, namely the density distribution across the lattice and the ground

state spectra, indeed exhibit signatures associated to the lattice geometry. Additionally, the information displayed in the ground state spectra in the reciprocal space can be compared with direct experimental measurements in ultracold systems via time of flight measurements<sup>89</sup>. Further investigations of transport phenomena can be addressed with the approach followed in the present work. For instance, it is possible to consider in a square lattice, different disorder amplitudes in  $\hat{e}_x$  and  $\hat{e}_y$ , that is, setting  $\delta_x \neq \delta_y$ . In view of the results obtained here, this could trigger the formation of stripes where transport could be manipulated via disorder induced localisation. Moreover, dynamical effects in adiabatic and non-adiabatic transfer protocols for the engineering of quantum states could be analysed<sup>90,91</sup>. Beyond ultracold atoms, systems of ions<sup>92</sup>, superconducting devices (Circuit-QED)<sup>93</sup>, polariton systems<sup>94,95</sup> and the addition of high-Q cavities<sup>96</sup> offer opportunities to test our findings analogously via quantum simulation<sup>97,98</sup>. Moreover, the interplay of these effects in lattices with dissipation offer another venue of exploration<sup>99,100</sup> or measurement induced dynamics<sup>101</sup>. The findings of our work can aid in the development and characterise of transport properties in two dimensional systems for the development of new analog quantum technologies<sup>102,103</sup>.

### References

- 1. Anderson, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. Phys. Rev 109, 1492 (1958).
- Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciardello, D. C. & Ramakrishnan, T. V. Scaling theory of localisation: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 42, 673 (1979).
- 3. Thouless, D. J. Electrons in disorderen systems and the theory of localisation. J. Phys. Repts 13C, 93 (1974).
- 4. Licciardello, D. C. & Thouless, D. J. Costancy of minimum metallic conductivity in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1475 (1975).
- 5. Lee, P. & Ramakrishnan, T. V. Disordered electronic systems. Rev. Mod. Phys. 57, 287-337 (1985).
- Gornyi, I. V., Mirlin, A. D. & Polyakov, D.-G. Interacting electrons in disordered wires: Anderson localisation and low-T transport. *Phys. Rev. Lett.* 95, 206603 (2005).
- 7. Vollhardt, D. & Wölfe, P. Anderson Localization in  $d \le 2$  Dimensions: A Self-Consistent Diagrammatic Theory. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 842–846 (1980).
- Wölfle, P. & Vollhardt, D. Self-Consistent theory of Anderson localization: General formalism and Applications. Int. J. Mod. Phys. B 24, 1526–1554 (2010).
- 9. Pine, D. J., Weitz, D. A., Chaikin, P. M. & Herbolzheimer, E. Diffusing-Wave Spectroscopy. Phys. Rev. Lett. 60, 1134 (1988).
- Kao, M. H., Jester, K. A., Yodh, A. G. & Collings, P. J. Observation of Light Diffusion and Correlation Transport in Nematic Liquid Crystals. *Phys. Rev. Lett.* 77, 2233 (1996).
- 11. Modugno, G. Anderson localization in Bose-Einstein condensates. Rep. Prog. Phys. 73, 102401 (2010).
- Sanchez-Palencia, L. & Lewenstein, M. Disordered quantum gases under control. *Nat. Phys.* 6, 87 (2010).
   Beeler, M. C., Reed, M. E. W., Hong, T. & Rolston, S. L. Disorder-driven loss of phase coherence in a quasi-2D cold atom system. *New J. Phys.* 14, 073024 (2012).
- 14. Allard, B., Plisson, T., Holzmann, M., Salomon, G., Aspect, A., Bouyer, P. & Bourdel, T. Effect of disorder close to the superfluid transition in a two-dimensional Bose gas. *Phys. Rev. A* **85**, 033602 (2012).
- Lewenstein, M., Sampera, A. & Ahufinger, V. Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-Body Systems (Oxford University Press, New York, 2012).
- 16. Jaksch, D., Bruder, C., Cirac, J. I., Gardiner, C. W. & Zoller, P. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108 (1998).
- 17. Jaksch, D. & Zoller, P. The cold atom Hubbard toolbox. Ann. Phys 315, 52 (2005).
- Fisher, M. P. A., Weichman, P. B., Grinstein, G. & Fisher, D. S. Boson localisation and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev.* B 40, 546 (1989).
- Liu, X.-J., Drummond, P. & Hu, H. Signature of Mott-Insulator transition with ultracold fermions in a one-dimensional optical lattice. *Phys. Rev. Lett.* 94, 136406 (2005).
- Goldman, N. Mott-Insulator transition for ultracold fermions in two-dimensional optical lattices. *Phys. Rev. A* 77, 053406 (2008).
   Jördens, R., Strohmaier, N., Günter, K., Moritz, H., Esslinger, T. & Mott, A. insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature* 455, 204 (2008).
- 22. Spielman, I. B., Phillips, W. D. & Porto, J. V. Mott-Insulator transition in a two-dimensional atomic Bose gas. *Phys. Rev. Lett.* 98, 080404 (2007).
- 23. Deissler, B. et al. Delocalisation of a disordered bosonic system by repulsive interactions. Nat. Phys 6, 354–358 (2010).
- 24. Meldgin, C., Ray, U., Russ, P., Chen, D., Ceperley, D. M. & DeMarco, B. Probing the Bose glass as superfluid transition using quantum quenches of disorder. *Nat. Phys* 12, 646 (2016).
- 25. Roati, G. et al. Anderson localisation of a non-interacting Bose-Einstein condensate. Nature 453, 895-898 (2008).
- Billy, L., Josse, V., Zuo, Z., Bernard, A., Hambrecht, B., Lugan, P., Clément, D., Sanchez-Palencia, L., Bouyer, P. & Aspect, A. Direct observation of anderson localisation of matter waves in a controlled disorder. *Nature* 453, 891–894 (2008).
- White, M., Pasienski, M., McKay, D., Zhou, S. Q., Ceperley, D. & DeMarco, B. Strongly Interacting Bosons in a Disordered Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.* 102, 055301 (2009).
- 28. Plodzień, M. & Sacha, K. Matter-wave analog of an optical random laser. Phys. Rev. A 84, 023264 (2011).
- Piraud, M., Aspect, A. & Sanchez-Palencia, L. Anderson localization of matter waves in tailored disordered potentials. *Phys. Rev. A* 85, 063611 (2012).
- 30. Jendrzejewski, F. et al. Nat. Phys. 8, 398 (2012).
- 31. Pasienski, M., McKay, D., White, M. & DeMarco, B. A disordered insulator in an optical lattice. Nat. Phys 6, 677 (2010).
- 32. Kondov, S. S., McGehee, W. R., Zirbel, J. J. & DeMarco, B. Three-Dimensional Anderson Localization of Ultracold Matter. *Science* 334, 66 (2011).
- McGehee, W. R., Kondov, S. S., Xu, W., Zirbel, J. J. & DeMarco, B. Three-Dimensional Anderson Localization in Variable Scale Disorder. *Phys. Rev. Lett.* 111, 145303 (2013).
   Carleo, G., Boéris, G., Holzmann, M. & Sanchez-Palencia, Laurent Universal Superfluid Transition and Transport Properties of
- Two-Dimensional Dirty Bosons. *Phys. Rev. Lett.* 111, 050406 (2013).
   Choi, J., Hild, S., Zeiher, J., Schauß, P., Rubio-Abadal, A., Yefsah, T., Khemani, V., Huse, D. A., Bloch, I. & Gross, C. Exploring the
- Kondov, S. S., McGehee, W. R., Xu, W. & DeMarco, B. Disorder-Induced Localization in a Strongly Correlated Atomic Hubbard
- Gas. Phys. Rev. Lett. 114, 083002 (2015).
  37. Sanchez-Palencia, L. et al. Strongly correlated Fermi-Bose mixtures in disordered optical lattices. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39,
- S121 (2006).
  Scarola, V. W. & DeMarco, B. Dynamics of Hubbard-band quasiparticles in disordered optical lattices. *Phys. Rev. A* 92, 053628 (2015).

- Vettchinkina, V., Kartsev, A., Karlsson, D. & Verdozzi, C. Interacting fermions in one-dimensional disordered lattices: Exploring localization and transport properties with lattice density-functional theories. *Phys. Rev. B* 87, 115117 (2013).
- 40. Verdozzi, C. Three-dimensional dynamics of a fermionic Mott wedding-cake in clean and disordered optical lattices. *Sci. Rep.* **3**, 2570 (2013).
- 41. Werner, M. A., Demler, E., Aspect, A. & Zaránd, G. Selective state spectroscopy and multifractality in disordered Bose-Einstein condensates: a numerical study. *Sci. Rep* **8**, 3641 (2018).
- Morrison, S. *et al.* Physical replicas and the Bose glass in cold atomic gases. *New J. Phys.* 10, 073032 (2008).
   Orso, G. Anderson transition of cold atoms with synthetic spin-orbit coupling in two-dimensional speckle potentials. *Phys. Rev. Lett.* 118, 105301 (2017).
- 44. Łcki, M., Paganelli, S., Ahufinger, V., Sanpera, A. & Zakrzewski, J. Disordered spinor Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. A* 83, 013605 (2011).
- Kovalev, V. M. & Savenko, I. G. Paramagnetic resonance in spin-polarized disordered Bose-Einstein condensates. Sci. Rep 7, 2076 (2017).
- 46. Lin, F., Maier, T. A. & Scarola, V. W. Disordered supersolids in the extended Bose-Hubbard model. Sci. Rep. 7, 12752 (2017).
- Ma, T., Zhang, L., Chang, C.-C., Hung, H.-H. & Scalettar, R. T. localisation of interacting Dirac fermions. *Phys. Rev. Lett.* 120, 116601 (2018).
- Huembeli, P., Dauphin, A. & Wittek, P. Identifying quantum phase transitions with adversarial neural networks. *Phys. Rev. B* 97, 134109 (2018).
- 49. Xiao, Y.-X., Zhang, Z.-Q. & Chan, C. T. A band of bound states in the continum induced by disorder. Sci. Rep 8, 5160 (2018).
- Yan, M., Hui, H.-Y., Rigol, M. & Scarola, V. W. Equilibration dynamics of strongly interacting Bosons in 2D lattices with disorder. *Phys. Rev. Lett.* 119, 073002 (2017).
- 51. Niederle, A. E. & Rieger, H. Superfluid clusters, percolation and phase transitions in the disordered, two-dimensional Bose-Hubbard model. *New J. Phys.* **15**, 075029 (2013).
- 52. Yukalov, V. I. & Graham, R. Bose-Einstein-condensed systems in random potentials. *Phys. Rev. A* **75**, 023619 (2007).
- Hügel, D., Strand, H. U. R. & Pollet, L. Self-energy functional theory with symmetry breaking for disordered lattice bosons. *Quantum Sci. Technol* 3, 034006 (2018).
- 54. Gurarie, V., Pollet, L., Prokofév, N. V., Svistunov, B. V. & Troyer, M. Phase diagram of the disordered Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. B* **80**, 214519 (2009).
- Lin, F., Sorensen, E. S. & Ceperley, D. M. Superfluid-insulator transition in the disordered two-dimensional Bose-Hubbard model. Phys. Rev. B 84, 094507 (2011).
- 56. Zhang, C., Safavi-Naini, A. & Capogrosso-Sansone, B. Equilibrium phases of two-dimensional bosons in quasiperiodic lattices. *Phys. Rev. A* **91**, 031604(R) (2015).
- Fallani, L., Fort, C. & Inguscio, M. Bose-Einstein Condensates in Disordered Potentials. Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics 56, 119–160 (2008).
- 58. Giorgini, S., Pitaevskii, L. & Stringari, S. Effects of disorder in a dilute Bose gas. Phys. Rev. B 49, 12938–12944 (1994).
- Perrin, H. Ultra cold atoms and Bose-Einstein condensation for quantum metrology. *Eur. Phys. J. Special Topics* 172, 37–55 (2009).
   Falco, G. M., Pelster, A. & Graham, R. Thermodynamics of a Bose-Einstein condensate with weak disorder. *Phys. Rev. A* 75, 063619 (2007).
- Lugan, P., Clément, D., Bouyer, P., Aspect, A. & Sanchez-Palencia, L. Anderson Localization of Bogolyubov Quasiparticles in Interacting Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 99, 180402 (2007).
- 62. Gaul, C. & Müller, C. A. Bogoliubov excitations of disordered Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 83, 063629 (2011).
- 63. Müller, C. A. & Gaul, C. Condensate deformation and quantum depletion of Bose-Einstein condensates in external potentials. New
- J. Phys. 14, 075025 (2012).
  64. Lellouch, S., Lim, L.-K. & Sanchez-Palencia, L. Propagation of collective pair excitations in disordered Bose superfluids. Phys. Rev. A 92, 043611 (2015).
- Lugan, P. & Sanchez-Palencia, L. Localization of Bogoliubov quasiparticles in interacting Bose gases with correlated disorder. *Phys. Rev. A* 84, 013612 (2011).
- 66. Huang, K. & Meng, H.-F. Hard-Sphere Bose Gas in Random External Potentials. Phys. Rev. Lett. 69, 644 (1992).
- Xu, K., Liu, Y., Miller, D. E., Chin, J. K., Setiawan, W. & Ketterle, W. Observation of Strong Quantum Depletion in a Gaseous Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* 96, 180405 (2006).
- Lugan, P., Clément, D., Bouyer, P., Aspect, A., Lewenstein, M. & Sanchez-Palencia, L. Ultracold Bose Gases in 1D Disorder: From Lifshits Glass to Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett* 98, 170403 (2007).
- Posazhennikov, A. Colloquium: Weakly interacting, dilute Bose gases in 2D. *Rev. Mod. Phys.* 78, 1111 (2006).
   Petrov, D. S., Holzmann, M. & Shlyapnikov, G. V. Bose-Einstein condensation in quasi-2D trapped gases. *Phys. Rev. Lett.* 84, 2551 (2000).
- Salasnich, L., Parola, A. & Reatto, L. Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates. *Phys. Rev. A* 65, 043614 (2002).
- Muñoz Mateo, A. & Delgado, V. Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 77, 013617 (2008).
- Bao, W., Jaksch, D. & Markowich, P. A. Numerical Solution of the Gross-Pitaevskii Equation for Bose-Einstein Condensation. J. of Comput. Phys. 187, 318 (2003).
- Trallero-Giner, C., Cipolattu, R. & Liew, T. C. H. One-dimensional cubic-quintic Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensates in a trap potential. *Eur. Phys. J. D* 67, 143 (2013).
- Chen, Z. & Wu, B. Bose-Einstein condensate in a honeycomb optical lattice: fingerprint of superfluidity at the Dirac point. *Phys. Rev. Lett.* 107, 065301 (2011).
- Jung, J., DaSilva, A. M., MacDonald, A. H. & Adam, S. Origin of band gaps in graphene on hexagonal boron nitride. Nat. Commun. 6, 6308 (2015).
- Clément, D., Varón, A. F., Retter., J. A., Sanchez-Palencia, L., Aspect, A. & Bouyer, P. Experimental study of the transport of coherent interacting matter-waves in a 1D random potential induced by laser speckle. *New J. Phys.* 8, 165 (2006).
- 78. Bloch, I., Dalibard, J. & Zwerger, W. Many-body physics with ultracold gases. Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).
- Walters, R., Cotugno, G., Johnson, T. H., Clark, S. R. & Jaksch, D. Ab initio derivation of Hubbard models for cold atoms in optical lattices. *Phys. Rev. A* 87, 042613 (2013).
   Underson A. Brittini, C. & Madama, M. Ab initia derivation of Hubbard and due to the cold atoms in optical sectors. *A Science A* 87, 042613 (2013).
- Ibañez-Azpiroz, J., Eiguren, A., Bergara, A., Pettini, G. & Modugno, M. Ab initio derivation of Hubbard models for cold atoms in optical lattices. *Phys. Rev. A* 87, 011602 (2013).
- Marzari, N., Mostofi, A. A., Yates, J. R., Souza, I. & Vanderbilt, D. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications. *Rev. Mod. Phys.* 84, 1419 (2012).
- Lee, K. L., Grémaud, B., Han, R., Englert, B.-G. & Miniatura, C. Ultracold fermions in a graphene-type optical lattice. *Phys. Rev. A* 80, 043411 (2009).
- 83. Teichmann, N., Hinrichis, D. & Holthaus, M. Reference data for phase diagrams of triangular and hexagonal bosonic lattices. *Eur. Phys. Lett.* **91**, 10004 (2010).

- Nesi, F. & Modugno, M. Loss and revival of phase coherence in a Bose-Einstein condensate moving through an optical lattice. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys 37, S101 (2004).
- 85. Fisher, D. S. Scaling and critical slowing down in random-field Ising systems. Phys. Rev. Lett. 56, 416 (1986).
- Ristivojevic, Z., Petković, A., Le Doussal, P. & Giamarchi, T. Superfluid/Bose-glass transition in one dimension. Phys. Rev. B 90, 125144 (2014).
- Álvarez Zúñiga, J. P., Luitz, D. J., Lemarié, G. & Laflorencie, N. Critical Properties of the Superfluid-Bose-Glass Transition in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 114, 155301 (2015).
- 88. Nore, C., Abid, M. & Brachet, M. E. Decaying Kolmogorov turbulence in a model of superflow. Phys. Fluids 9, 9 (1997).
  - Weinberg, M., Jürgensen, O., Ölschläger, C., Lühmann, D.-S., Sengstock, K. & Simonet, J. Symmetry-broken momentum distributions induced by matter-wave diffraction during time-of-flight expansion of ultracold atoms. *Phys. Rev. A* 93, 033625 (2016).
  - Caballero-Benitez, S. F. & Paredes, R. Glassy dynamics and Landau-Zener phenomena in trapped quasi-one dimensional coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 87, 053603 (2013).
  - 91. Caballero-Benitez, S. F. & Paredes, R. Phase diagram of Landau-Zener phenomena in coupled one-dimensional Bose quantum fluids. *Phys. Rev. A* 85, 023605 (2012).
  - 92. Bermudez, A., Martin-Delgado, M. A. & Porras, D. The localisation of phonons in ion traps with controlled quantum disorder. *New J. Phys.* **12**, 123016 (2010).
  - Leib, M., Deppe, F., Marx, A., Gross, R. & Hartmann, M. J. Networks of nonlinear superconducting transmission line resonators. New J. Phys 14, 075024 (2012).
  - 94. Hartmann, M. J., Brandão, F. G. S. L. & Plenio, M. B. Strongly interacting polaritons in coupled arrays of cavities. Nat. Phys 2, 849 (2006).
- 95. Greentree, A. D., Tahan, C., Cole, J. H. & Hollenberg, L. C. L. Quantum phase transition of light. Nat. Phys 2, 856 (2006).
- Caballero-Benitez, S. F., Mazzucchi, G. & Mekhov, I. B. Quantum simulators based on the global collective light-matter interaction. Phys. Rev. A 93, 063632 (2016).
- 97. Georgescu, I. M., Ashhab, S. & Nori, F. Quantum simulation. Rev. Mod. Phys. 86, 153 (2014).
- 98. Hofstetter, W. & Qin, T. Quantum simulation of strongly correlated condensed matter system. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 51, 082001 (2018).
- 99. Creatore, C., Fazio, R., Keeling, J. & Türeci, H. E. Quench dynamics of a disordered array of dissipative coupled cavities. *Proc. R. Soc. A* **470**, 0328 (2014).
- Gangat, A. A., McCulloch, I. P. & Kao, Ying-Jer Symmetry between repulsive and attractive interactions in driven-dissipative Bose-Hubbard system. *Sci. Rep* 8, 3698 (2018).
- Mazzucchi, G., Kozlowski, W., Caballero-Benitez, S. F., Elliot, T. J. & Mekhov, I. B. Quantum measurement-induced dynamics of many-body ultracold bosonic and fermionic systems in optical lattices. *Phys. Rev. A* 93, 023632 (2016).
- 102. Bloch, I., Dalibard, J. & Nascimbène, S. Quantum simulations with ultracold quantum gases. Nat. Phys. 8, 267 (2012).
- Kurizki, G., Bertet, P., Kubo, Y., Mølmer, K., Petrosyan, D., Rabl, P. & Schmiedmayer, J. Quantum technologies with hybrid system. PNAS. 112, 3866 (2015).

#### Acknowledgements

This work was partially funded by grants IN105217, IN111516, IN109619 from DGAPA-UNAM, 255573 and A1-S-30934 from CONACYT. L.A.G.G. acknowledges scholarship from CONACYT. S.F.C.B. acknowledges support from Cátedras CONACYT para Jóvenes Investigadores project No. 551 and EPSRC Project EP/I004394/1. S.F.C.B. also thanks Consorcio CICESE-INAOE-CIO in PIIT, Apodaca N.L., IF-UNAM, and the University of Oxford for their hospitality.

# **Author Contributions**

L.A.G.G. performed the numerical experiments. S.F.C.B. supervised the numerical experiments and R.P. supervised the project. All authors analysed and worked in the interpretation of the results. All authors reviewed and wrote the manuscript.

#### Additional Information

Competing Interests: The authors declare no competing interests.

Publisher's note: Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

**Open Access** This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons license, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons license, unless indicated otherwise in a credit line to the material. If material is not included in the article's Creative Commons license and your intended use is not permitted by statutory regulation or exceeds the permitted use, you will need to obtain permission directly from the copyright holder. To view a copy of this license, visit http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/.

© The Author(s) 2019

# Artículos para su próxima publicación

## Localized states in imperfect quasicrystalline lattices in 2D

L. A. González-García, H. Alva-Sánchez and R. Paredes

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, Mexico.

(Dated: February 5, 2020)

We investigate the emergence of localization in a weakly interacting gas of Bose atoms confined in non-perfect or disordered quasicrystalline lattices in 2D. To quantify the effects of such a disorder, we perform a robust numerical analysis, at a mean field level, of the stationary density profiles in pentagonal and octagonal macroscopic structures. The studied physical quantities are, the Shannon information entropy, the inverse participation ratio and the energy spectrum. Our investigation allowed us to identify a smooth crossover from extended to localized states as a function of the disorder magnitude in both lattices. Remarkably, the octagonal quasicrystalline structure against pentagonal reflects persistence of extended states as the disorder amplitude is increased.

#### I. INTRODUCTION

Due to the perfect long range order, but absence of translational periodicity, unconventional structures exhibiting rotational 5, 8, 10 and 12 fold symmetries, namely the known quasicrystals existent in matter [1, 2, 22], have well defined and different physical properties to those exhibited by crystalline structures. For instance, large variations in surface related properties [4] with respect to common metals are found quasicrystals. Among them, surface energy, mechanical properties as hardness and coefficient of friction, and thermal and electrical conductivities. This is why, since its discovery in 1984 in Aluminium based alloys, these unusual solids have opened new routes to be explored, with the aim of exploiting their intrinsic quasicrystalline structure. Up to now, the understanding of transport properties and the collateral knowledge of thermal and electrical potential applications, rely mostly on a phenomenological perspective. precisely in this context, it is well known that quasicrystals have thermal and electrical conductivity that closely resembles that of an amorphous solid. Lacking of periodicity in one side but perfect rotational symmetry in the other side, situates to quasicrystals in the middle, where well established theories describing crystals and amorphous materials respectively does not apply.

The purpose of this manuscript is to address on the appearance of localized states associated to imperfect quasicrystalline structures. Since the non ideal quasicrystallinity can arise as result of either vacancies or substitutional impurities arising during the solid formation, or temperature external fields

Experimental studies on ultracold quantum matter have reported Bose-Einstein condensates confined in fivefold and eightfold quasicrystallyne optical lattices [5–8]. The relevance of such an experimental success is that it might provide the opportunity to test, as previuosly demonstrated in the case of crystalline optical lattices, the analogous physics of electrons traveling in layered materials. In particular, enables the study of transport properties and definite quantum phases as superfluid, Mott insulator (MI), supersolid (SS) and charge density wave (CDW), emerging from competing short- and long-range interactions. Previous mean field analysis have explored these ground state phases of an ultracold gas of Bose atoms loaded into an optical lattice having eight-fold symmetry, showing . Particularly, the well-known Mott-insulator (MI) to superfluid (SF) transition within the standard Bose-Hubbard model has been studied, leading to discern the characteristic lobes separating those phases. Even more, supersolid phases are shown to arise as a direct result of the aperiodic nature of the under lying lattice, with the variation of the local number of nearest neighbors being the key ingredient.

The paper is organized as follows. In Section II we describe the lattices that will be considered in our study as well as the theoretical approach employed to analyze the influence of disorder in localizing the superfluid density. In Section III we concentrate in characterizing the transition to localization as a function of the disorder magnitude, through the study of several stationary properties. In particular, to discern extended from localizes states as a function of the disorder magnitude, we study the Sahnon entropy and from the Voronoi construction associated to both pentagonal and octagonal lattices we analyze the inverse participatio ratio. Finally, we present our conclusions in Section VI.

## II. MODEL

The quasicrystalline lattice lattices here analyzed have pentagonal and octagonal symmetries. The lattice structure associated to a pentagonal symmetry can be generated through the potential,

# Relaxation of ferromagnetic domains in a disordered lattice in 2D

C. Madroñero,<sup>1</sup> G.A. Domínguez-Castro,<sup>1</sup> L. A. González-García,<sup>1</sup> and R. Paredes<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, Mexico.

We investigate the relaxation process of ferromagnetic domains in 2D subjected to the influence of both, static disorder of variable strength and weak interactions. The domains are represented by a two species bosonic mixture of <sup>87</sup>Rb ultracold atoms, such that initially each specie lies on left and right halves of a square lattice. The dynamics of the double domain is followed by describing the two-component superfluid, at mean field level, through the time dependent Gross-Pitaevskii coupled equations, considering values of the intra and inter-species interaction, reachable in current experimental setups, that guaranty miscibility of the components. A robust analysis for several values inter-species interaction leads us to conclude that the presence of structural disorder leads to slowdown the relaxation process of the initial ferromagnetic order. As shown by our numerical experiments, magnetization is maintained up to 60 percent of its initial value for the largest disorder amplitude.

#### I. INTRODUCTION

As much of the many-body problems within the condensed matter field, magnetism and particularly the dynamics of microscopic spins lying in ultrathin films in definite regions of space, the so-called magnetic domains dynamics, remain until now as an open question [1-3]. The origin of this dynamics can be attributed to several factors, for instance, the presence of external drivings as magnetic or electric fields, the existence of spinpolarized currents inducing the transference of momentum to the domain wall [4, 5], or the inner dynamics associated with both, the interactions between the microscopic constituents as well as the energetic landscape where the constituents move. In the present investigation, we concentrate on analyzing the dynamics of the magnetic domains arising from the last causes. In particular, we focus on the effects of energy disorder in preventing the motion of spin domains.

Motivated by the notable control achieved with large conglomerates of atoms in its quantum degenerate state, and particularly the production of mixtures composed of either, Bose condensates in different hyperfine states [6], or different atomic species [7–11], confined in particular geometries [12-16], we propose here the design of an *ultracold atom device* to quantum simulate the decay of magnetization in magnetic domains in disordered square lattices in 2D. Our proposal is based on various experimental situations, previously performed with <sup>87</sup>Rb atoms, intended to explore the many-body localization phenomenon [17, 18]. In particular, in [17], the initial state prepared is a Bose condensate composed of about one hundred atoms confined in a 2D square lattice in its Mott equilibrium state, and then allowed to evolve in a disordered potential under its own dynamics after suddenly changing an external parameter. Such a quantum quench protocol planned to track the effects of disorder on the atom flux moving across the 2D lattice, together with the possibility of spatially separating different hyperfine components, are the basis of our proposal to study the dynamics of the ferromagnetic domains, particularly its magnetization decay. As we describe below, in this work we shall consider a two-species Bose condensate as the analog of a double spin domain in which each hyperfine component lies in the halves of an inhomogeneous square lattice, thus setting initial configuration that will evolve in a disordered media (see Fig. 1). This arrangement together with a recent study, performed at mean field level, where the effect of disorder is to induce the emergence of spatially localized densities, as a function of the disorder magnitude [19], are our starting point to study the dynamics of the double spin domain. The idea here presented can be extended to other geometrical configurations, like those considered in [19] that can be useful for practical purposes as for instance the design of spin based magnetic protocols with complex configurations.

Here we present the results of an extensive set of numerical calculations performed, at the mean-field level through the coupled Gross-Pitaevskii (GP) equations, to describe the evolution in time of the hyperfine spin components spatially separated at t = 0, and then allowed to evolve under the influence of non-correlated static disorder. Working within the superfluid regime, which is considering values of the intra-species interaction coupling for which the system is far from the Mott insulating phases (MI), we analyze the evolution of the initial state for different values of the ration among intra and inter-species interaction strengths.

This work is organized as follows. In section 2, we present the model that we use to describe the relaxation of the ferromagnetic domains under the influence of disorder. Furthermore, we briefly explain the construction of the initial state from which the evolution in time is followed. In section 3 we show the results of our numerical study about the relaxation process of the ferromagnetic domains, as a function of the disorder amplitude and different interaction strengths. Finally, in section 4, we

<sup>\*</sup>Electronic address: rosario@fisica.unam.mx

summarize our findings.

## II. MODEL AND INITIAL STATE PREPARATION

The model here proposed to study the persistence of magnetization in definite regions of space, is based, as described previously, on a series of experimental designs created with ultracold <sup>87</sup>Rb atoms confined in 2D optical lattices, and their remarkable attribute of generating localized states as a result of both, disorder and two-body interactions. Here we concentrate on weakly interacting systems subjected to disorder. The system under study consists of a mixture of two hyperfine spin components,  $|\uparrow\rangle = |F = 1, m_F = -1\rangle$  and  $|\downarrow\rangle = |F = 2, m_F = -2\rangle$ , lying in a 2D inhomogeneous square lattice, represented by  $V_{\text{ext}}(\vec{r})$ . Within the mean-field formalism the wave functions  $\Psi_{\uparrow,\downarrow}$  of the two species  $|\uparrow\rangle$  and  $|\downarrow\rangle$  obey the following effective coupled GP equations:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\uparrow}(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[ H_0(\vec{r}) + g_{\uparrow\uparrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 + g_{\uparrow\downarrow} |\Psi_{\downarrow}|^2 \right] \Psi_{\uparrow}(\vec{r},t)$$
$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\downarrow}(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[ H_0(\vec{r}) + g_{\downarrow\downarrow} |\Psi_{\downarrow}|^2 + g_{\downarrow\uparrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 \right] \Psi_{\downarrow}(\vec{r},t), \quad (1)$$

where  $H_0(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\perp}^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r})$  with  $\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  is the Laplacian operator in 2D and *m* the equal mass of the two spin components. The external potential in 2D has the following form:

$$V_{\text{ext}}\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{2}m\omega_r^2 r^2 + V_0^{\delta} \left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)\right], \quad (2)$$

being  $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$ ,  $\omega_r$  the radial harmonic frequency, which is fixed to a common value used in current experiments  $\omega_r = 2\pi \times 50$  Hz, a is the lattice constant and  $V_0^{\delta} = V_0(1 + \epsilon_{\delta}(x, y))$ , the potential depth at each point (x, y). The function  $\epsilon_{\delta}(x, y)$  represents a non-correlated disorder spanned across space and takes random values in the interval  $\epsilon_{\delta}(x,y) \in [-\delta,\delta]$ , being  $\delta$  the disorder amplitude  $\delta \in [0,1]$ . The random depth  $V_0^{\delta}$  mimics the disordered environment introduced by speckle patterns [20] and is scaled in units of the recoil energy  $E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , with  $k = \pi/a$ . Thus, besides the contribution of the harmonic confinement, the potential depth at each point (x, y) is the result of adding/subtracting a random number  $\epsilon_{\delta}(x, y)$  to the amplitude of the potential defining the square lattice at zero disorder. Several previous studies have shown that the mean-field approximation describes the main effects of weakly interacting disordered systems [19, 21-24].

The values of the effective interaction couplings  $g_{\sigma\sigma'}$ with  $\sigma, \sigma' = \{\uparrow, \downarrow\}$  are written in terms of the s-wave scattering length  $a_{\sigma,\sigma'}$  as,  $g_{\sigma\sigma'} = 4\pi N\hbar^2 a_{\sigma\sigma'}/m$ , being N the number of particles in the condensate. We should point here that these interaction coefficients must be substituted by effective interaction couplings that take into account that the atom collision processes occur in 2D [25– 31]. The effective scattering length in the plane x - y becomes  $a_{\sigma\sigma'} \rightarrow a_{\sigma\sigma'}/\sqrt{2\pi}l_z$ , with  $l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ , being  $\omega_z$  a typical frequency of condensates confined in 2D [32, 33]. In typical experiments the values of the coupling constants  $g_{\sigma\sigma'}$ , can be varied via Feshbach resonances, and thus adjusted to have either, equal or different values of the intra and inter-species interactions, that is  $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g_{\uparrow\downarrow}$ , or  $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} \neq g_{\uparrow\downarrow}$ . In the present investigation we consider  $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow}$  and  $g_{\uparrow\downarrow} = g_{\downarrow\uparrow}$ . As stated in [11, 34], miscibility of the two component mixture is determined by the relation between  $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow}$  and  $g_{\uparrow\downarrow} = s_{\downarrow\downarrow}$  and  $g_{\uparrow\downarrow}$ , as a matter of fact, the separation of the hyperfine components happens when the condition  $g_{\uparrow\downarrow} > \sqrt{g_{\uparrow\uparrow}g_{\downarrow\downarrow}}$  is satisfied. In our analysis we shall consider values of the intra and inter-species interaction that guaranty miscibility of the hyperfine components.



FIG. 1: Schematic form of the density profile prepared as the initial state. Left and right sides represent the superfluid density associated with the hyperfine components  $\uparrow$  and  $\downarrow$ . Such profiles correspond to densities at zero disorder amplitude and a given value of the intra and inter-species interactions amplitudes  $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow}$ , and  $g_{\uparrow\downarrow}$ .

#### A. Initial ferromagnetic state

To set the initial state from which we shall follow the dynamics to track the demagnetization process, we first solve the coupled equations (1) for an optical lattice with lattice spacing a = 532 nm and a depth  $V_0/E_R = 4$  without disorder, that is  $\delta = 0$  and determine the stationary state. For this purpose free energy minimization is performed by means of imaginary time evolution  $\tau \rightarrow it$ [35–37]. After this procedure, we manually remove the particles having spin component  $\sigma = \uparrow$  from the left half layer, while particles with  $\sigma = \downarrow$  from the right half layer, see Fig.1. This removal of particles mimics experimental procedures in which a digital mirror device is used to optically remove the particles at specific positions [17]. Another route to achieve ferromagnetic domains is by means of a magnetic field [38]. Notice that in our case similar ground state densities of different hyperfine states remain at each half in the 2D lattice. This pattern manually created, that is the two ferromagnetic domains, is our starting point to study its time evolution under the influence of static non-correlated disorder. We should

note here that such an initial state is non-stationary, and consequently it evolves under their own dynamics. Interestingly, this kind of states from which a system evolves under its own dynamics are the so called quantum quenches created in the laboratory. Our particular interest is to investigate how the local magnetization of the ferromagnetic domains degrades when the weakly interacting 2D Bose mixture evolves in the absence of other external fields, except the one produced from the combination of a speckle pattern and the square lattice. It is important to mention that the effective coupling interaction coefficients must be rescaled for t > 0 since half of the population is removed to have the magnetic domains, that is  $N \to N/2$ .

#### III. RESULTS: DEMAGNETIZATION VS. DISORDER

With the purpose of establishing how magnetic domains demagnetize, we follow the time dynamics of an initial state prepared as described in the previous section, namely, spatially separated populations of the hyperfine components  $\downarrow$  and  $\uparrow$  lying in left and right sides of the 2D square lattice respectively. In Fig.1 we show a schematic plot of the initial state. In our simulations we consider N = 300 giving rise to interaction strengths  $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = 10$ , and lattices having ~ 30 × 30 occupied sites. As stated in section II, the non-correlated disorder is introduced across the whole lattice through the function  $\epsilon_{\delta}(x, y)$ . To perform a reliable analysis of the physical quantities and have meaningful predictions, we take the average over an ensemble of 200 realizations for each value of the disorder amplitude  $\delta$ , and given values of the ratio among intra and inter-species interactions  $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\downarrow\uparrow}$ . The purpose behind considering multiple realizations of disorder for a given value of the disorder strength, is to recreate the situation of experiments in which, typically, a single random realization could be not sufficient to represent the usual behavior of multiple scattering events due to uncorrelated disorder. We should notice that the way in which the disorder has been simulated, warrants that although the lattice symmetry is altered, the underlying structure is preserved, that is, the square geometry and the harmonic confinement prevail. Also, we must point out that the initial state depends on the particular values that the intra and inter-species interactions have.

The observables to be studied in our analysis are the magnetization in left and right sides  $m_L$  and  $m_R$ as a function of time. These quantities are defined in terms of the local magnetization  $m(x, y; t) = \rho_{\uparrow}(x, y; t) - \rho_{\downarrow}(x, y; t)$ , where  $\rho_{\uparrow}(x, y; t)$  and  $\rho_{\downarrow}(x, y; t)$  are the densities associated with the components  $\uparrow$  and  $\downarrow$  respectively. Thus, magnetization in left and right sides are,

$$m_L = \int \int_{\Omega_L} dx \, dy \, m(x, y; t)$$
  
$$m_R = \int \int_{\Omega_R} dx \, dy \, m(x, y; t), \qquad (3)$$

where  $\Omega_R$  and  $\Omega_R$  are the left and right halves of the system, respectively. Because of the particular election of the initial state we have that  $m_L(t=0) = -0.5$  and  $m_R(t=0) = 0.5$ . For our analysis, besides the set of random realizations  $\epsilon_{\delta}(x, y)$  for a given disorder magnitude, we shall consider three different values of ratio  $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\downarrow\uparrow}$ . We shall identify the dimensionless time in all of our calculations as  $\tau = E_R t/\hbar$ . The time dynamics was followed for a period of time such that at zero disorder and a given value of the coupling interactions the magnetization in left and right sides become null. As we shall see, the elapsed time during which the time dynamics is studied depends on the values of the inter- and intraparticle interaction strengths. That is, the relaxation of magnetization at zero disorder is different for each ratio  $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$  considered. It is important to mention here that all of our numerical calculations were performed ensuring that changing  $\tau \to -\tau$ , at any temporal step along the time dynamics, allow us to recover the initial state. Furthermore, we found that the high precision used in our numerical simulations allowed us to observe a kind of macroscopic spin oscillation phenomenon, namely, that in the absence of disorder, the domains oscillate back and forth for extremely long evolution times.



FIG. 2: Snapshots of the local magnetization in the square lattice for three different values of the disorder amplitude. Left, center and right columns correspond to three different values of disorder amplitude  $\delta$  as indicated in the figure. Upper, middle and bottom rows are associated to  $\tau = 0$ ,  $\tau = 180$  and  $\tau = 360$  respectively. The ratio of the intra and inter-species interaction is,  $g_{\uparrow\downarrow} = 0.9g_{\uparrow\uparrow}$ .

Since the prepared initial state is non-stationary, the hyperfine spin populations will evolve under the influence of both, disorder and interactions. Previous analysis of a single BEC component confined in a disordered square in 2D have shown that, in the weakly interacting regime, the net effect of the disorder is to localize the condensate density in bounded regions [19]. As a matter of fact, the size of those bounded regions become shorter and shorter as the amplitude of the disorder strength is increased. Therefore, what we expect in the case of the two component condensate is to have spatially localized densities of the condensate as the disorder magnitude grows, and thus preservation of magnetic domains. In Fig. 2 we show snapshots of the local magnetization for three different values of the disorder amplitude,  $\delta = 0$ ,  $\delta = 0.5$  and  $\delta = 0.9$  (left, center and right columns respectively), and three different times along the dynamics,  $\tau = 0, \tau = 180$  and  $\tau = 360$ . Each plot is a snapshot associated to a given realization of disorder  $\epsilon_{\delta}(x, y)$  and fixed value of the intra and inter-species interaction ratio,  $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ . As one can see from this figure, at zero disorder amplitude,  $\uparrow$  and  $\downarrow$  density configurations remain exactly opposite, while showing an asymmetric behavior for  $\delta \neq 0$ . We also observe how larger values of the disorder amplitude leads to a slow down the dynamics of the magnetic domains. That is, the initial state persists for larger times, thus showing a persistence of the magnetic domains during the time evolution. Fig. 2 is representative of the magnetization behavior observed at different times as disorder is increased for the ensemble of disorder realizations. In the next paragraphs we outline the findings of our numerical experiments.



FIG. 3: Magnetization on the right side as a function of time for different values of disorder amplitude  $\delta$ , colors indicate the size of such a disorder. The ratio of the intra and inter-species interaction is  $g_{\downarrow\uparrow}/g_{\uparrow\uparrow} = 0.9$ . Magnetization in the left side is shown in the inset. Each point in these curves is the result of the average over 200 realizations of disorder for a given value  $\delta$ . The shadow area around each curve corresponds to the root mean square deviation.

As described above, to determine the influence of both, disorder and interactions, we track the evolution of the



FIG. 4: Magnetization in the right side as a function of time for different values of disorder amplitude  $\delta$ , colors indicate the size of such a disorder. The ratio of the intra and inter-species interaction is  $g_{\downarrow\uparrow} = 0.8g_{\uparrow\uparrow}$ . Magnetization in the left side is shown in the inset. Each point in these curves is the result of the average over 200 realizations of disorder for a given value  $\delta$ . The shadow area around each curve corresponds to the root mean square deviation.

magnetization for an ensemble of realizations for a given value of the disorder amplitude. We restate that the values of the intra and inter-species interaction considered in our study are such that the miscibility of hyperfine components can occur. In Figures 3, 4 and 5 we summarize the results of our analysis. Each plot correspond to the average of the magnetization on the right (main plot) and left (inset) sides as a function of time for different values of disorder amplitude  $\delta$ . The specific values of  $\delta$  are indicated in the figures. The values of the intra and interspecies interaction of figures 3, 4 and 5 are  $g_{\downarrow\uparrow} = 0.9g_{\uparrow\uparrow}$ ,  $g_{\downarrow\uparrow} = 0.8 g_{\uparrow\uparrow}$  and  $g_{\downarrow\uparrow} = 0.7 g_{\uparrow\uparrow}$  respectively. Different curves in each plot are the average over the realizations for a given values of  $\delta$ , being the shadow area around each curve associated with the root mean square deviation. From these figures, one can observe that for short times  $\tau \lesssim 50$ , the general relaxation behavior of the magnetization takes quite similar values, independent of the disorder strength. However, for later times  $\tau\gtrsim 50,$  each magnetization curve departs from each other, thus revealing the effects of the disordered media. Furthermore, as the disorder amplitude is increased, the ferromagnetic order in each domain is preserved against the relaxation process. This slow relaxation dynamics induced by disorder enhances memory-like effects in the coupled magnetic domains. In particular, for the largest value of the disorder amplitude considered, that is  $\delta = 1$ , the value of the magnetization in left and right sides remains unaltered around 60%. One can also notice two main outcomes associated with the value of the ratio  $g_{\downarrow\uparrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ . The first is



FIG. 5: Magnetization on the right side as a function of time for different values of disorder amplitude  $\delta$ , colors indicate the size of such a disorder. The ratio of the intra and inter-species interaction is  $g_{\downarrow\uparrow} = 0.7g_{\uparrow\uparrow}$ . Magnetization in the left side is shown in the inset. Each point in these curves is the result of the average over 200 realizations of disorder for a given value  $\delta$ . The shadow area around each curve corresponds to the root mean square deviation.

that at zero disorder the relaxation time is decreased as the ratio  $g_{\downarrow\uparrow}/g_{\uparrow\uparrow}$  is diminished. The second one is that as this ratio is increased, the magnetization becomes progressively worse with respect to its initial value.

The time dependence of the left and right magnetizations are well described by a power-law ansatz  $m_R(\tau) \propto b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}$ . We fit the curves of figures 3, 4 and 5 with such a power-law ansatz at intermediate times scales, where one neglects the transient behavior at short times. We should notice that the coefficients  $\gamma$  and b also depend upon the ratio among  $g_{\downarrow\uparrow}$  and  $g_{\uparrow\uparrow}$ . In Figure 6 we plot the behavior of  $\gamma$  as a function of  $\delta$ .

From this figure one can notice how the value of the characteristic exponent  $\gamma$  is modified as the ratio  $g_{\downarrow\uparrow}/g_{\uparrow\uparrow}$  is varied. Here it is important to stress that  $\gamma$  is also influenced by the presence of the harmonic confinement. The value of this exponent is reduced as  $\delta$  grows, and thus the relaxation process becomes slower in time. Quite remarkable is the fact that for strong disorder strengths  $\delta$ , the  $\gamma$  parameters take very similar values, almost independent of the ratio of the inter and intra-species interaction coupling. This can indicate that the disorder has become the dominant contribution during the elapsed evolution. The inset in Fig. 6 shows the error of the magnetization fit.



FIG. 6: Power-law fit  $m_R(\tau) \propto b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}$  for the magnetization on the right side as a function of  $\delta$  for three different values of the ratio of the intra and inter-species interaction.

#### **IV. FINAL REMARKS**

We have studied the time dynamics of initially localized ferromagnetic domains evolving under the influence of both, disordered confinement and contact interactions. The purpose of such an investigation was to establish the persistence of ferromagnetic order in the domains, namely spatial regions with definite magnetization, when the competition of structural disorder and interactions could lead the system, evolving under their inner dynamics, to nullify such an initial magnetic pattern. To study such a magnetization relaxation process as a function of time, we proposed a model system simulating a double ferromagnetic domain evolving under static disorder. The model consisted of a two-species <sup>87</sup>Rb Bose-Einstein condensate, whose components labeled as  $\uparrow$  and  $\downarrow$  states. were placed spatially separated, lying each one in the halves of a 2D potential resulting from the superposition of a harmonic potential and a square lattice. The description of the dynamics was addressed within the mean field Gross-Pitaevskii approach, by solving the coupled equations associated to different hyperfine components. To have a reliable analysis of the evolution in time of the magnetization under the presence of disorder, our analysis consisted of an extensive set of numerical calculations over different realizations of non-correlated disorder having a given amplitude  $\delta$ , and constant values of the intra and inter-species interactions  $g_{\downarrow\uparrow}$  and  $g_{\uparrow\uparrow}$  respectively. Regarding the magnitude of the intra and inter-species interaction  $g_{\downarrow\uparrow}$  and  $g_{\uparrow\uparrow}$ , we worked in the regime in which the ratio between these coefficients  $g_{\downarrow\uparrow}/g_{\uparrow\uparrow}$  guaranty miscibility of hyperfine components, and also considering appropriate coupling interaction strengths away from the strong interaction effects.

Our main conclusion is that the relaxation process of a double ferromagnetic domain, that is loss of magnetization in definite regions of space, becomes slower and slower as the structural disorder is increased, while in contrast, increasing the ratio between inter and intra particle contact interactions  $g_{\downarrow\uparrow}/g_{\uparrow\uparrow}$  tends to degrade the initial state. We reach these result from a robust study of the time evolution of the right and left magnetization of a quantum system described above. Textures or local magnetization, as referred in current literature, are suitable observables to track the effects of the disorder media in systems having more that one component and, also, are accessible physical quantities with single spin resolution techniques [39, 40] used in current experimental setups.

The manuscript here presented sets a platform for the design of specific protocols appropriate to study demagnetization processes or frustration effects associated to geometry and energy disorder [41–44]. Also, our study aims for the investigation of the dynamics induced by measurement in the sense that sources of disorder can be either internal as those here considered, or external as those associated to reservoirs in contact with assessable quantum systems [45]. We expect that our work will trigger further theoretical analysis as for instance, the long range character proper of the dipole-dipole mag-

- F. J. Himpsel, J. E. Ortega, G. J. Mankey, and R. F. Willis, Advances in Physics 47 511 (1998).
- [2] Y. M. Kim, S. H. Han, H. J. Kim, D. Choi, K. H. Kim, and J. Kim, Journal of Applied Physics **91** 8462 (2002).
- [3] T. Thomson, Metallic Films for Electronic, Optical and Magnetic Applications: Structure, Processing and Properties 454 (2014).
- [4] A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat, and N. Vernier, Journal of Applied Physics 95 7049 (2004).
- [5] K. J. A. Franke, B. Van de Wiele, Y. Shirahata, S.J. Hämämläinen, T. Taniyama, and S. van Dijken, Phys. Rev. X 5 011010 (2015).
- [6] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. 78 586 (1997).
- [7] G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 89 190404 (2002)
- [8] G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **100** 210402 (2008).
- [9] A. D. Lercher, T. Takekoshi, M. Debatin, B. Schuster, R. Rameshan, F. Ferlaino, R. Grimm, and H.-C. Nägerl, Eur. Phy. J. D 65 3 (2011).
- [10] D. J. McCarron , H. W. Cho, D. L. Jenkin, M. P. Köppinger, and S. L. Cornish, Phys. Rev. A 84 011603(R) (2011).
- [11] F. Wang, X. Li, D. Xiong, and D. Wang, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49 015302 (2016).
- [12] E. A. Hinds and I. G. Hughes, J. Phys. D: Appl. Phys. 32 R119 (1999).
- [13] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics 40 95 (2000).
- [14] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen, and U. Sen, Ad. Phys. 56 243 (2007).
- [15] C. Gross and I. Bloch, Science **357** 995 (2017).
- [16] A. L. La Rooij, H. v. L. van den Heuvell, and R. J. C.

netic interactions, as well as the homogeneous environment where the elemental constituents move. Those aspects still remain as open questions to be addressed. Understanding the dynamics of magnetic domains, have become nowadays a relevant topic not only within the context of the fundamental physics, but also associated to the emergence of technological uses. Practical applications of the investigation here presented are directly related with the design of magnetic logic and memory devices.

#### Acknowledgments

This work was partially funded by grant IN10620 DGAPA (UNAM). G.A.D.C., would like to thank V. Romero-Rochín for computational resources at Skyrmion IF-UNAM, and R. Zamora-Zamora for useful guidance. G.A.D.C., L.A.G.G. and C.M., acknowledge scholarship from CONACYT.

Spreeuw, Phys. Rev. A **99** 022303 (2019).

- [17] J.-y. Choi, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauß, A. Rubio-Abadal, T. Yefsah, V. Khemani, D.A. Huse, I. Bloch, and C. Gross, Science **352** 1547 (2016).
- [18] A. Rubio-Abadal, J.-y. Choi , J. Zeiher, S. Hollerith, J. Rui, I. Bloch, and C. Gross, Phys. Rev. X 9 041014 (2019).
- [19] L. A. González-García, S. F. Caballero-Benítez, and R. Paredes, Sci. Rep. 9 11049 (2019).
- [20] P. Bouyer, Rep. Prog. Phys. 73, 062401 (2006).
- [21] S. Ray, M. Pandey, A. Ghosh, and S. Sinha, New. J. Phys. 18, 013013 (2016).
- [22] T. Schulte, S. Drenkelforth, J. Kruse, R. Tiemeyer, K. Sacha, J. Zakrzewski, M. Lewenstein, W. Ertmer, and J. J. Arlt, New. J. Phys. 8, 230 (2006).
- [23] S. K. Adhikari and L. Salasnich, Phys. Rev. A 80, 023606 (2009).
- [24] M. Kobayashi, M. Tsubota, and T. Iida, Physica B: Condensed Matter **329-333**, 210-211 (2003).
- [25] A. Posazhennikov, Rev. Mod. Phys. 78, 1111 (2006).
- [26] L. Salasnich, A. Parola, L. and Reatto, Phys. Rev. A 65, 043614 (2002).
- [27] A. M. Mateo and V. Delgado, Phys. Rev. A 77, 013617 (2008).
- [28] W. Bao, D. Jaksch, and P. A. Markowich, J. of Comput. Phys. 187 318 (2003).
- [29] C. Trallero-Giner, R. Cipolatti, and T. C. H. Liew, Eur. Phys. J. D. 67 143 (2013).
- [30] R. Zamora-Zamora R, G. A. Domínguez-Castro, C. Trallero-Giner, R. Paredes and V. Romero-Rochín, J. Phys. Comm. 3 085003 (2019).
- [31] D. S. Petrov, M. Holzmann and G. V Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. 84, 2551 (2000).
- [32] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier and J. Dalibard, Nature 441 1118 (2006).
- [33] C.-L. Hung, X. Zhang, N. Gemelke, and C. Chin, Nature

**470** 236 (2011).

- [34] S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **101** 040402 (2008).
- [35] The grid used in our numerical calculations was  $512 \times 512$ . All the calculations were implemented in state of the art GPU hardware.
- [36] R. Dum, Y. Castin, Eur. Phys. J. D 7, 399 (1999).
- [37] R. Zeng, Y. Zhang, Comput. Phys. Commun. 180, 854-860 (2008).
- [38] D. M. Weld, P. Medley, H. Miyake, D. Hucul, D.E. Pritchard, W. and Ketterle, Phys. Rev. Lett. **103**, 245301 (2009).
- [39] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr, Nature 471, 319 (2011).
- [40] M. Boll, T. A. Hilker, G. Salomon, A. Omran, J. Nespolo, L. Pollet, I. Bloch, and C. Gross, Science 353,

6305 (2016).

- [41] M. S. Pierce, C. R. Buechler, L. B. Sorensen, S. D. Kevan, E. A. Jagla, J. M. Deutsch, T. Mai, O. Narayan, J. E. Davies, Kai Liu, G. T. Zimanyi, H. G. Katzgraber, O. Hellwig, E. E. Fullerton, P. Fischer, and J. B. KortrightPhys. Rev. B 75, 144406 (2007).
- [42] Y. W. Windsor, A. Gerber, and M. Karpovski Phys. Rev. B 55, 064409 (2012).
- [43] I. Korzhovska, H. Deng, L. Zhao, Z. Chen, M. Konczykowski, S. Zhao, S. Raoux, and Lia Krusin-Elbaum arXiv:1911.00070 (2019).
- [44] J. Reindl, H. Volker, N.P. Breznay and M. Wuttig, npj Quantum Materials 4, 57 (2019).
- [45] H. M. Hurst and I. B. Spielman, Phys. Rev. A 99 053612 (2019).